Uma introdução ao Meta-aprendizado

Prof. Ana C. Lorena e Prof. Luís Paulo F. Garcia

Divisão de Ciência da Computação (IEC) Instituto Tecnológico de Aeronáutica (ITA) aclorena@ita.br

Departamento de Ciência da Computação (CIC) Universidade de Brasília (UnB) luis.garcia@unb.br

Agosto de 2020



Agenda

- Introdução
- Meta-Aprendizado
- 3 Análise de resultados
- 4 Conclusões

Introducão

O uso de Aprendizado de Máquina (AM) tem se popularizado, com casos de sucesso reportados em diversas áreas:

- Sistemas de recomendação;
- Segmentação de clientes;
- Identificação de fraudes;
- Robótica:
- Visão computacional;
- Processamento de Linguagem Natural;
- Jogos;
- Etc.







000000000

E existem vários repositórios com conjuntos de dados e comparações de algoritmos de AM:















000000000

E existem vários repositórios com conjuntos de dados e comparações de algoritmos de AM:















Meta-aprendizado [Vilalta and Drissi, 2002, Vanschoren, 2019]

Extrair (meta-)conhecimento a partir de tarefas resolvidas com sucesso por AM, para usá-lo na solução de novas tarefas.

No-free lunch theorem [Wolpert, 2002, Adam et al., 2019]

- O desempenho médio de dois algoritmos de AM é o mesmo, considerando todos os possíveis problemas.
- Ou seja, não existe um único algoritmo que será adequado para todas as situações.



Figura: Sydney Firmin, Alteryx, *There is No Free Lunch in Data Science*, KDDNuggets



0000000000

Cada algoritmo tem um viés que pode ser adequado a uma determinada classe de problemas e não a outra.

Definição de viés [Mitchell, 1997]

Preferência pela escolha de uma hipótese específica sobre outras, restringindo o **espaço de busca e de representação**, e tornando o aprendizado a partir de dados possível.



000000000

Cada algoritmo tem um viés que pode ser adequado a uma determinada classe de problemas e não a outra.

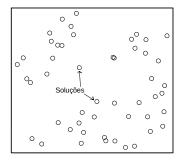
Definição de viés [Mitchell, 1997]

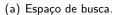
Preferência pela escolha de uma hipótese específica sobre outras, restringindo o **espaço de busca e de representação**, e tornando o aprendizado a partir de dados possível.

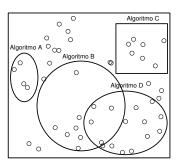
Atenção:

Sem viés não há generalização e, consequentemente, aprendizado!

Hipóteses e espaço de busca



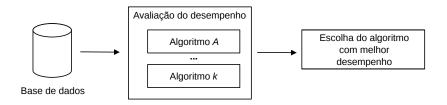




(b) Exemplos de possíveis vieses de alguns algoritmos.

0000000000

- Dessa forma, geralmente a escolha de algoritmos (e de seus hiper-parâmetros) envolve diversos experimentos.
- Em geral, em uma abordagem de tentativa e erro.



Abordagem de tentativa e erro

• É custosa e subjetiva, dependendo de conhecimento do usuário para definir o que testar;

0000000000

Abordagem de tentativa e erro

- É custosa e subjetiva, dependendo de conhecimento do usuário para definir o que testar;
- Aumenta o tempo de geração dos modelos consideravelmente;

0000000000

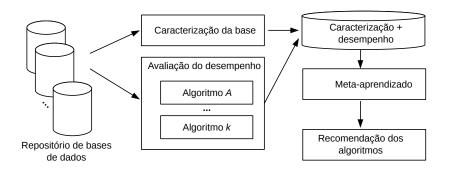
Abordagem de tentativa e erro

- É custosa e subjetiva, dependendo de conhecimento do usuário para definir o que testar;
- Aumenta o tempo de geração dos modelos consideravelmente;
- Pode levar a super-ajustes (overfitting);

Abordagem de tentativa e erro

- É custosa e subjetiva, dependendo de conhecimento do usuário para definir o que testar;
- Aumenta o tempo de geração dos modelos consideravelmente;
- Pode levar a super-ajustes (overfitting);
- Os resultados tornam-se mais difíceis de serem reproduzidos.

 Usando conhecimento sobre outros problemas para solucionar um novo...



Introdução

0000000000

Abordagem de Meta-aprendizado (MtL)

 Também é trabalhosa, considerando que é necessário ao menos caracterizar uma nova base de dados, mas é objetiva;

- Também é trabalhosa, considerando que é necessário ao menos caracterizar uma nova base de dados, mas é objetiva;
- O uso do meta-modelo produzido é rápido, eliminando necessidade de treinar múltiplos modelos para um novo conjunto de dados;

- Também é trabalhosa, considerando que é necessário ao menos caracterizar uma nova base de dados, mas é objetiva;
- O uso do meta-modelo produzido é rápido, eliminando necessidade de treinar múltiplos modelos para um novo conjunto de dados;
- Pode auxiliar a evitar super-ajustes;

Abordagem de Meta-aprendizado (MtL)

- Também é trabalhosa, considerando que é necessário ao menos caracterizar uma nova base de dados, mas é objetiva;
- O uso do meta-modelo produzido é rápido, eliminando necessidade de treinar múltiplos modelos para um novo conjunto de dados;
- Pode auxiliar a evitar super-ajustes;
- Melhora reprodutibilidade de resultados experimentais;

Abordagem de Meta-aprendizado (MtL)

- Também é trabalhosa, considerando que é necessário ao menos caracterizar uma nova base de dados, mas é objetiva;
- O uso do meta-modelo produzido é rápido, eliminando necessidade de treinar múltiplos modelos para um novo conjunto de dados;
- Pode auxiliar a evitar super-ajustes;
- Melhora reprodutibilidade de resultados experimentais;
- Auxilia usuários não especializados.

Alguns pontos importantes

• A partir de que problemas o meta-conhecimento será extraído?

Alguns pontos importantes

- A partir de que problemas o meta-conhecimento será extraído?
- Que características extrair dos conjuntos de dados?

- A partir de que problemas o meta-conhecimento será extraído?
- Que características extrair dos conjuntos de dados?
- Que algoritmos considerar?

- A partir de que problemas o meta-conhecimento será extraído?
- Que características extrair dos conjuntos de dados?
- Que algoritmos considerar?
- Que medida de desempenho será usada na avaliação dos algoritmos?

- A partir de que problemas o meta-conhecimento será extraído?
- Que características extrair dos conjuntos de dados?
- Que algoritmos considerar?
- Que medida de desempenho será usada na avaliação dos algoritmos?
- Como será gerado o meta-modelo?

- A partir de que problemas o meta-conhecimento será extraído?
- Que características extrair dos conjuntos de dados?
- Que algoritmos considerar?
- Que medida de desempenho será usada na avaliação dos algoritmos?
- Como será gerado o meta-modelo?
- E como avaliar os resultados obtidos?

Outline

- 1 Introdução
- 2 Meta-Aprendizado
- 3 Análise de resultados
- 4 Conclusões

Meta-aprendizado

Introdução

Definição [Brazdil et al., 2009]

Métodos que exploram **meta-conhecimento** para obter soluções de AM mais eficientes e melhores.

Definição [Brazdil et al., 2009]

Métodos que exploram **meta-conhecimento** para obter soluções de AM mais eficientes e melhores.

Algumas aplicações:

- Otimização [Kanda et al., 2011];
- Análise de séries temporais [Rossi et al., 2014];
- Recomendação de técnicas de pré-processamento [Garcia et al., 2016a];
- Seleção de classificadores [Garcia et al., 2018a];
- Ajuste de hiper-parâmetros de SVM [Mantovani et al., 2015].

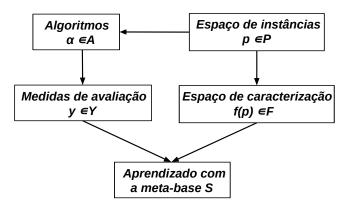


Figura: Arcabouço de seleção de algoritmos, adaptado de [Smith-Miles, 2008] com base em [Rice, 1976]

Introdução

Em AM, P será composto por diversos conjuntos de dados p.

Introdução

Em AM, P será composto por diversos conjuntos de dados p.

- Podem ser coletados de repositórios como:
 - UCI [Lichman, 2013];
 - Keel [Alcalá-Fdez et al., 2011];
 - OpenML [Vanschoren et al., 2013];
 - Competições.

Em AM, P será composto por diversos conjuntos de dados p.

- Podem ser coletados de repositórios como:
 - UCI [Lichman, 2013];
 - Keel [Alcalá-Fdez et al., 2011];
 - OpenML [Vanschoren et al., 2013];
 - Competições.
- E/ou também podem ser gerados:
 - Conjuntos sintéticos [Vanschoren and Blockeel, 2006, Macià and Bernadó-Mansilla, 2014, Muñoz et al., 2018];
 - Datasetoids [Soares, 2009, Prudêncio et al., 2011].

Em AM, P será composto por diversos conjuntos de dados p.

- Podem ser coletados de repositórios como:
 - UCI [Lichman, 2013];
 - Keel [Alcalá-Fdez et al., 2011];
 - OpenML [Vanschoren et al., 2013];
 - Competições.
- E/ou também podem ser gerados:
 - Conjuntos sintéticos [Vanschoren and Blockeel, 2006, Macià and Bernadó-Mansilla, 2014, Muñoz et al., 2018];
 - Datasetoids [Soares, 2009, Prudêncio et al., 2011].

Objetivo:

Introdução

Ter diversidade de instâncias do problema.

Introdução

Exemplo: OpenML [Vanschoren et al., 2013]





Prática: coletando bases de dados do OpenML

https://lpfgarcia.github.io/mtl/coletando_bases



Meta-atributos (F)

- Extraem propriedades gerais dos conjuntos de dados p, na forma f(p).
- Devem prover evidência sobre o desempenho futuro das técnicas investigadas [Soares et al., 2001].
- E distinguir bem problemas com diferentes níveis de dificuldade [Smith-Miles, 2008].
- Idealmente, devem ter baixo custo computacional.

Meta-atributos (F)

Os principais grupos de meta-atributos são:

- Gerais: informações simples e básicas dos conjuntos de dados;
- Estatísticos: indicadores da distribuição dos dados;
- Informação: baseados em conceitos de teoria da informação;
- Baseados em modelos: usam modelos simples nos dados e extraem características deles.
- Landmarking: desempenho de algoritmos simples e eficientes nos dados.
- Complexidade: buscam capturar o nível de dificuldade associado à resolução do problema.

Os meta-atributos **gerais** compreendem informações básicas extraídas dos conjuntos de dados:

- números de instâncias, de atributos, de classes;
- porcentagem de instâncias em cada classe.

Exemplos:

Conjunto 'iris' (classificação)

- # instâncias = 150;
- # atributos = 4;
- \sharp classes = 3.

Conjunto 'swiss' (regressão)

- # instâncias = 47;
- # atributos = 5;

Os meta-atributos **estatísticos** extraem informações sobre a distribuição dos dados:

- matrizes de correlação e covariância dos atributos;
- obliquidade e curtose dos atributos quantitativos.

Exemplos:

Conjunto 'iris'

- obliquidade média = 0.063;
- curtose média = -0.811:

Conjunto 'swiss'

- obliquidade média = 0.484:
- curtose média = 0.742;

As medidas baseadas em **teoria da informação** capturam a quantidade de informação no conjunto de dados, por meio de relações entre os atributos.

- Entropia;
- Informação mútua;
- Razão sinal-ruído.

Exemplos:

Conjunto 'iris'

• informação mútua total = 3.296;

Conjunto 'swiss'

• informação mútua total = 2.823;

Meta-atributos (F)

Introdução

Os meta-atributos baseados em **modelos** extraem informações sobre modelos simples extraídos dos dados, tais como de uma Árvore de Decisão:

- Profundidade da árvore;
- Distribuição das folhas;
- Número de nós.

Exemplos:

Conjunto 'iris'

- profundidade AD = 3;
- \sharp nós = 5.

Conjunto 'swiss'

- profundidade AR = 4;
- \sharp nós = 7.

Os meta-atributos de **landmarking** provêm medidas do desempenho de modelos simples aplicados aos conjuntos de dados:

- Modelos lineares;
- Elite-Nearest Neighbor;
- ADs com um único nó (Decision Stumps).

Exemplos:

Conjunto 'iris'

- acurácia do discriminante linear = 0.98;
- acurácia do eliteNN = 0.94.

Conjunto 'swiss'

- MSE do regressão linear
 = 41.24:
- MSE so eliteNN = 12.07.

Prática: caracterizando bases de dados

https://lpfgarcia.github.io/mtl/tradicionais



Os meta-atributos de **complexidade** tentam estimar a complexidade do modelo que deve ser ajustado aos dados [Lorena et al., 2018, Lorena et al., 2019]:

- Porcentagem de pontos na fronteira (N1);
- Razão de distâncias médias intra e extra-classe (N2);
- Suavidade da distribuição das saídas (S1);
- Suavidade da distribuição das entradas (S2).

Exemplos:

Conjunto 'iris'

• N1 = 0.10;

• N2 = 0.19.

Conjunto 'swiss'

• S1 = 0.12;

S2 = 0.25.

Prática: caracterizando bases de dados

https://lpfgarcia.github.io/mtl/complexidade



Algoritmos (A)

Introdução

Conjunto de algoritmos α que serão aplicados aos conjuntos de dados $(\alpha(p))$, candidatos no processo de seleção de algoritmos.

Algoritmos (A)

Conjunto de algoritmos α que serão aplicados aos conjuntos de dados $(\alpha(p))$, candidatos no processo de seleção de algoritmos.

- Classificadores, regressores, algoritmos de agrupamento [Garcia et al., 2018b, Pimentel and de Carvalho, 2019]
- Algoritmos de pré-processamento de dados [Garcia et al., 2016b]
- Hyperparêmetros de algoritmos [Mantovani et al., 2019]
- Algoritmos de otimização [Kanda et al., 2016]
- Análise de séries temporais [Rossi et al., 2017]
- entre outros ...

- Random Forest [Breiman, 2001, Ho, 1998]
- Redes Neurais Artificiais [Haykin et al., 2009]
- Árvores de Decisão [Quinlan, 1986]
- k-vizinhos mais próximos [Cover and Hart, 1967]
- Support Vector Machine [Schlkopf et al., 2018]
- ..

Medidas de Avaliação (Y)

Avaliação dos modelos obtidos pelos algoritmos α nos conjuntos de dados coletados $y(\alpha(p))$

- Classificação: acurácia, F_{β} , AUC, kappa, etc.
- Regressão: MSE, RMSE, NMSE, etc.
- Agrupamento: ARI, NMI, etc.
- ...

Prática: induzindo modelos de classificação

https://lpfgarcia.github.io/mtl/classificadores



Meta-modelo (S)

Introdução

Uma meta-base é formada a partir da coleção de meta-exemplos:

- Cada meta-exemplo é representado pelas medidas de caracterização f(p)
- E é rotulado de acordo com o resultado da avaliação dos algoritmos $y(\alpha(p))$

Meta-modelo (S)

Meta-{classificação, regressão e ranqueamento}:



Obtendo S a partir de uma meta-base:

Um novo problema de aprendizado!

Sistema de recomendação baseado em MtL

Usar técnicas de AM para induzir meta-modelos a partir da meta-base

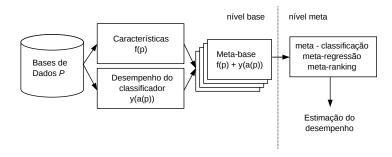
Procedimento:

Dado um novo conjunto de dados p:

- ullet Extração dos meta-atributos f(p)
- ullet Consulta ao meta-modelo S(f(p))

Sistema de recomendação baseado em MtL

Exemplo: recomendando um algoritmo



https://lpfgarcia.github.io/mtl/meta_base



Outline

- 1 Introdução
- 2 Meta-Aprendizado
- Análise de resultados
- 4 Conclusões

Análise padrão

Introdução

Avaliando o meta-modelo:

 Análise da meta-base: distribuição dos algoritmos na meta-base, etc.

Análise padrão

Introdução

Avaliando o meta-modelo:

- Análise da meta-base: distribuição dos algoritmos na meta-base, etc.
- Análise no nível meta: desempenho dos meta-classificadores na predição do melhor classificador.

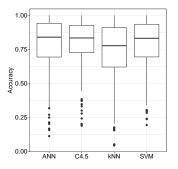
Avaliando o meta-modelo:

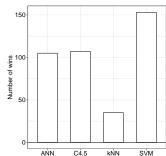
- Análise da meta-base: distribuição dos algoritmos na meta-base, etc.
- Análise no nível meta: desempenho dos meta-classificadores na predição do melhor classificador.
- Análise no nível base: ganho acumulado que os meta-classificadores geram em comparação com a classe majoritária.

Avaliando o meta-modelo:

- Análise da meta-base: distribuição dos algoritmos na meta-base, etc.
- Análise no nível meta: desempenho dos meta-classificadores na predição do melhor classificador.
- Análise no nível base: ganho acumulado que os meta-classificadores geram em comparação com a classe majoritária.
- Tempo de execução: diferença de tempo entre executar MtL e uma abordagem de tentativa e erro para um novo conjunto de dados.

Análise da meta-base





- (a) Distribuição de acurácias.
- (b) Classificadores ganhadores.

Figura: Desempenho dos classificadores base.

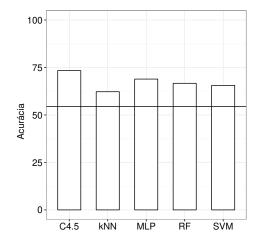


Figura: Desempenho dos meta-classificadores.

Análise de nível base

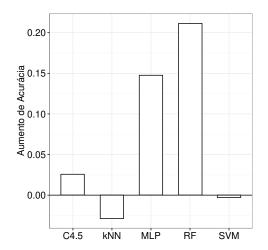
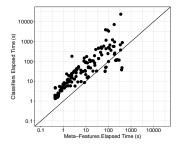
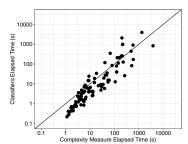


Figura: Melhora na acurácia dos classificadores de base sobre baselines.

Tempo de execução





(a) Tempo médio para computar (b) Tempo médio para computar as os meta-atributos e consultar os medidas de complexidade e consultar classificadores.

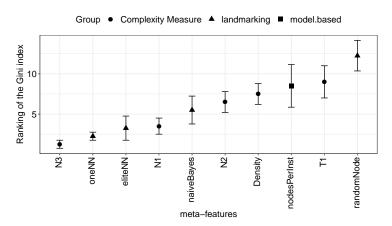


Figura: Meta-atributos melhor ranqueados (meta-regressor RF)

Outline

- Introdução
- 2 Meta-Aprendizado
- 3 Análise de resultados
- 4 Conclusões

Conclusões

Conclusões

Principais contribuições de MtL:

- Auxiliar em processos decisórios no pipeline de AM, reduzindo tentativas-e-erros
- Prover um melhor entendimento de que tipos de problemas cada técnica de AM possui melhor desempenho
- Melhor entendimento dos conjuntos de dados e de suas semelhanças/diferenças, pelo exame de suas características

000

Conclusões

Principais limitações de MtL:

- Escolhas de P. F. A. Y
- Indução de meta-modelos S é um problema de AM por si só, que também implica na escolha de um algoritmo e seus hiper-parâmetros
- ullet A obtenção de S é custosa, embora seu uso seja rápido

000

Conclusão

Alguns pacotes de MtL

- https://CRAN.R-project.org/package=ECoL
- https://CRAN.R-project.org/package=mfe
- https://pypi.org/project/pymfe/
- https://github.com/byu-dml/metalearn
- https://github.com/openml/openml-python
- https://github.com/MichaelMMeskhi/MtL-Progress-github.io

Agradecimentos



Adam, S. P., Alexandropoulos, S.-A. N., Pardalos, P. M., and Vrahatis, M. N. (2019). No free lunch theorem: a review. In Approximation and Optimization, pages 57-82, Springer, Alcalá-Fdez, J., Fernández, A., Luengo, J., Derrac, J., and García, S. (2011). Keel data-mining software tool: Data set repository, integration of algorithms and experimental analysis framework Multiple-Valued Logic and Soft Computing, 17(2-3):255-287. Brazdil, P., Giraud-Carrier, C. G., Soares, C., and Vilalta, R. (2009). Metalearning - Applications to Data Mining. Springer, 1 edition. Breiman, L. (2001). Random forests Machine learning, 45(1):5-32. Cover, T. and Hart, P. (1967). Nearest neighbor pattern classification. IEEE transactions on information theory, 13(1):21-27. Garcia, L. P., de Carvalho, A. C., and Lorena, A. C. (2016a). Noise detection in the meta-learning level. Neurocomputing, 176:14-25. Garcia, L. P., Lorena, A. C., de Souto, M. C., and Ho, T. K. (2018a). Classifier recommendation using data complexity measures. In 2018 24th International Conference on Pattern Recognition (ICPR), pages 874-879. IEEE.

```
Garcia, L. P. F., Lorena, A. C., and de Carvalho, A. C. P. L. F. (2016b). Ensembles of label noise filters: a ranking approach.
```

Data Mining and Knowledge Discovery, 30(5):1192 - 1216.

Garcia, L. P. F., Lorena, A. C., de Souto, M. C. P., and Ho, T. K. (2018b).

Classifier recommendation using data complexity measures.

In 24th International Conference on Pattern Recognition (ICPR), pages 874-879.

Haykin, S. S. et al. (2009).

Neural networks and learning machines/simon haykin.

Ho, T. K. (1998).

The random subspace method for constructing decision forests.

IEEE transactions on pattern analysis and machine intelligence, 20(8):832-844.

Kanda, J., de Carvalho, A. C. P. L. F., Hruschka, E. R., and Soares, C. (2011). Selection of algorithms to solve traveling salesman problems using meta-learning.

International Journal of Hybrid Intelligent Systems, 8(3):117–128.

Kanda, J., de Carvalho, A. C. P. L. F., Hruschka, E. R., Soares, C., and Brazdil, P. (2016).

Meta-learning to select the best meta-heuristic for the traveling salesman problem: A comparison of meta-features.

Neurocomputing, 205:393-406.

Lichman, M. (2013).

UCI machine learning repository.

http://archive.ics.uci.edu/ml.

References III

Introdução

Lorena, A. C., Garcia, L. P., Lehmann, J., Souto, M. C., and Ho, T. K. (2019). How complex is your classification problem? a survey on measuring classification complexity. *ACM Computing Surveys (CSUR)*, 52(5):1–34.

Lorena, A. C., Maciel, A. I., de Miranda, P. B., Costa, I. G., and Prudêncio, R. B. (2018). Data complexity meta-features for regression problems.

Machine Learning, 107(1):209-246.

Macià, N. and Bernadó-Mansilla, E. (2014). Towards uci+: A mindful repository design. *Information Sciences*, 261:237–262.

Mantovani, R. G., Rossi, A. L. D., Alcobaça, E., Vanschoren, J., and de Carvalho, A. C. P. L. F. (2019). A meta-learning recommender system for hyperparameter tuning: Predicting when tuning improves SVM classifiers.

Information Sciences, 501:193-221.

Mantovani, R. G., Rossi, A. L. D., Vanschoren, J., Bischl, B., and de Carvalho, A. C. P. L. F. (2015). To tune or not to tune: Recommending when to adjust SVM hyper-parameters via meta-learning. In International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN), pages 1–8.

Mitchell, T. M. (1997).

Machine Learning.

McGraw Hill series in computer science. McGraw Hill.

Mu \tilde{n} oz, M. A., Villanova, L., Baatar, D., and Smith-Miles, K. (2018). Instance spaces for machine learning classification.

Machine Learning, 107(1):109-147.

```
Pimentel, B. A. and de Carvalho, A. C. P. L. F. (2019).
```

A new data characterization for selecting clustering algorithms using meta-learning.

Information Sciences, 477:203 - 219.

Prudêncio, R. B. C., Soares, C., and Ludermir, T. B. (2011).

Uncertainty sampling-based active selection of datasetoids for meta-learning.

In 21th International Conference on Artificial Neural Networks (ICANN), volume 6792, pages 454-461.

Quinlan, J. R. (1986).

Induction of decision trees.

Machine learning, 1(1):81-106.

Rice, J. R. (1976).

The algorithm selection problem.

In Advances in computers, volume 15, pages 65-118. Elsevier.

Rossi, A. L. D., de Carvalho, A. C. P. L. F., Soares, C., and de Souza, B. F. (2014).

Metastream: A meta-learning based method for periodic algorithm selection in time-changing data. *Neurocomputing*, 127:52–64.

Rossi, A. L. D., de Souza, B. F., Soares, C., and de Carvalho, A. C. P. L. F. (2017).

A guidance of data stream characterization for meta-learning.

Intelligent Data Analysis, 21(4):1015–1035.

Schlkopf, B., Smola, A. J., and Bach, F. (2018).

Learning with kernels: support vector machines, regularization, optimization, and beyond.

Smith-Miles, K. A. (2008).

Cross-disciplinary perspectives on meta-learning for algorithm selection.

ACM Computing Surveys, 41(1):6:1 - 6:25.

Soares, C. (2009).

Uci++: Improved support for algorithm selection using datasetoids.

In Pacific-Asia Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, pages 499-506. Springer.

Soares, C., Petrak, J., and Brazdil, P. (2001).

Sampling-based relative landmarks: Systematically test-driving algorithms before choosing.

In 10th Portuguese Conference on Artificial Intelligence (EPIA), pages 88 – 95.

Vanschoren, J. (2019).

Meta-learning.

In Automated Machine Learning, pages 35-61. Springer, Cham.

Vanschoren, J. and Blockeel, H. (2006).

Towards understanding learning behavior.

In 15th Annual Machine Learning Conference of Belgium and the Netherlands, pages 89–96.

Vanschoren, J., van Rijn, J. N., Bischl, B., and Torgo, L. (2013).

Openml: Networked science in machine learning.

SIGKDD Explorations, 15(2):49-60.

Vilalta, R. and Drissi, Y. (2002).

A perspective view and survey of meta-learning.

Artificial intelligence review, 18(2):77-95.

References VI

Wolpert, D. H. (2002). The supervised learning no-free-lunch theorems. In Soft computing and industry, pages 25-42. Springer.