Moindres généralisés

Fabien Torre

Université de Lille

Mercredi 30 septembre et 7 octobre 2009

Motivations et Intuitions

Difficultés pour les arbres de décision

- tester plusieurs attributs à la fois ;
- capturer les problèmes disjonctifs (*tic-tac-toe* par exemple).

x	x	x	x	o	o	x	o	o	positive
x	x	x	o	o	b	b	b	b	positive
x	x	x	o	x	o	x	o	o	positive
x	x	x	?	?	?	?	?	?	positive

... et sur des attributs continus ?

5	1	1	1	2	1	3	1	benign
5	4	4	5	7	10	3	2	benign
[5 ;5]	[1 ;4]	[1 ;4]	[1 ;5]	[2 ;7]	[1 ;10]	[3 ;3]	[1 ;2]	benign
6	8	8	1	3	4	3	7	benign
[5 ;6]	[1 ;8]	[1 ;8]	[1 ;5]	[2 ;7]	[1 ;10]	[3 ;3]	[1 ;7]	benign

Plus formellement

Définition : moindre généralisé

Étant donné un ensemble d'exemples $E \subseteq \mathcal{X}$, une hypothèse $h \in \mathcal{H}$ est dite *moindre généralisée* de E si et seulement si :

- $\forall e \in E : h \succeq e$;
- il n'existe pas h' vérifiant $\forall e \in E : h' \succeq e$ et $h \succeq h'$.

Cette définition implique-t-elle l'unicité ? Soit $\mathcal{E} = \mathbb{R}^2$, pour chaque $\mathcal{H}$ possible :

- est-ce que le moindre généralisé est unique ?
- comment le calculer ?

Candidats : rectangles, carrés, cercles, etc.

Deux profils

Deux vues algorithmiques :

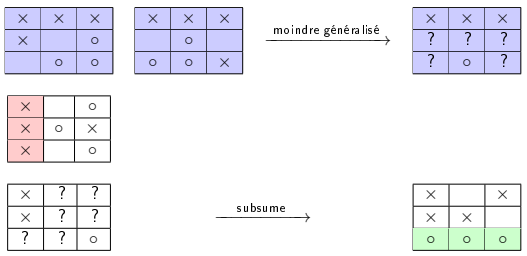
- $\texttt{MG}(e_1, e_2, \ldots, e_n \in \mathcal{X})$ returns $h \in \mathcal{H}$;
- $\texttt{MG}(h_{n-1}, e_n)$ returns $h \in \mathcal{H}$.

on préfère la deuxième version, plus efficace pour l'apprentissage.

La suite : utiliser les classes !

Intuitions

Généralisation d'exemples d'une même classe sans couvrir aucun exemple d'une autre classe.



Calcul [Torre, 1999]

une graine et sa classe	exemples de la même classe	généralisation maximalement correcte
x_1, y_1	x_5 x_8 $\not x_2$ $x_{14}\ldots$	$g_1 = \text{MG}(\{x_1, x_5, x_8, x_{14}, \ldots\})$ $g_1 \rightarrow y_1$
x_2, y_2	$\not x_{14}$ x_3 $\not x_{10}$ $x_{12}\ldots$	$g_2 = \text{MG}(\{x_2, x_3, x_{12}, \ldots\})$ $g_2 \rightarrow y_2$

- Exemple : âge $\in [25, 40] \rightarrow$ positif ;
- instable : dépend de la graine et de l'ordre des exemples ;
- pour un exemple donné, un moindre généralisé correct conclut sur une unique classe (-1 ou $+1$) ou s'abstient (0).

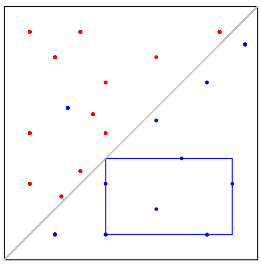
Algorithme MGC

Entrées : $E = [e_1, \ldots, e_n] \subseteq \mathcal{X}$ un ensemble *ordonné* de n exemples de la même classe, N un ensemble de contre exemples.

Sortie : $h \in \mathcal{H}$ une généralisation de E, maximalement correcte par rapport à E et N.

1: $h = e_1$
2: **for** $i = 2$ to n **do**
3: $\quad h' = \texttt{MG}(h, e_i)$ {Généralisation entre deux hypothèses.}
4: $\quad$ **if** $(\forall e \in N : h' \not\succeq e)$ **then**
5: $\quad\quad h = h'$ {h' (correcte) devient la généralisation courante.}
6: $\quad$ **end if**
7: **end for**
8: **return** h

Déroulement de MGC



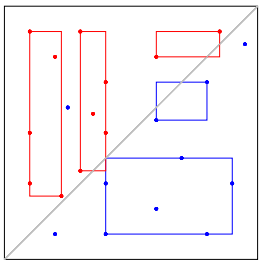
L'algorithme DLG [Webb and Agar, 1992]

Entrées : A un ensemble de n exemples (x_i, y_i).
Sortie : H un ensemble de règles.

1: $H = \emptyset$; $O = A$; $j = 1$
2: **while** $(O \neq \emptyset)$ **do**
3: $\quad target$ = classe du premier exemple de O
4: $\quad P = [x_i \in O | y_i = target]$
5: $\quad N = [x_i \in A | y_i \neq target]$
6: $\quad h_j = \mathtt{MGC}(P, N)$
7: $\quad O = O - [x \in O : h_j \succeq x]$
8: $\quad$ ajouter h_j à H ; $j = j + 1$
9: **end while**
10: **return** H

Déroulement

Couverture gloutonne des exemples : on répète le calcul de moindre généralisé correct sur les exemples non couverts jusqu'à couverture complète des exemples.



Bilan DLG

Avantages

- rapide ;
- permet d'appréhender les attributs pertinents ;
- donne des indications sur la difficulté du problème d'apprentissage : nombre de règles apprises, couverture de chaque règle.

Inconvénients

- glouton ;
- peu prédictif ;
- peu compréhensible.

Intuitions

Combattre la dépendance à l'ordre des exemples et chercher la compréhensibilité.

Principes de GloBo

1. calculer plusieurs moindre-généralisés en utilisant des exemples différents comme graine et des exemples de la même classe mélangés ;
2. retenir les règles qui permettent une couverture minimale des exemples.

Si chaque exemple sert à un moment de graine, alors au final tout exemple est couvert par au moins une hypothèse.

Algorithme GloBo [Torre, 1999] (1)

Entrées : A un ensemble de n exemples (x_i, y_i).
Sortie : H un ensemble de règles.

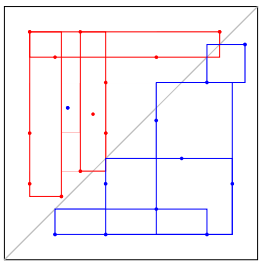
1: $H' = \emptyset$
2: **for** $i = 1$ to n **do**
3: $\quad P = [x_j | y_j = y_i \wedge i \neq j]$
4: $\quad N = [x_j | y_j \neq y_i]$
5: $\quad$ **mélanger P aléatoirement**
6: $\quad h_i = \mathtt{MGC}(x_i :: P, N)$
7: $\quad$ ajouter h_i à H'
8: **end for**

Algorithme GloBo (2)

1: $H = \emptyset$
2: **while** $(\exists x_i, \forall h_j \in H, h_j \not\succeq x_i)$ **do**
3: $\quad h = \mathrm{ArgMax}_{h_i \in H'} |[x_j : h_i \succeq x_j \wedge \nexists h_k \in H : h_k \succeq x_j]|$
4: $\quad$ ajouter h à H
5: **end while**
6: **return** H

Couverture minimale : problème NP-complet, heuristique quadratique. Justifiée ici ?

Déroulement



Bilan GloBo

Avantages

- compréhensible ;
- meilleures prédictions que DLG.

Inconvénients

- nombre quadratique de calculs de MG ;
- nombre cubique de tests de subsomption ;
- peut être battu en prédiction par des systèmes moins compréhensibles.

Protocole

- Algorithmes en présence : C4.5, DLG, GloBo ;
- 20 problèmes du *repository UCI* [Blake and Merz, 1998] ;
- validations croisées 10 fois ;
- chaque apprentissage de GloBo est répété 10 fois ;
- nombre d'erreurs moyen ;
- visualisation des performances.

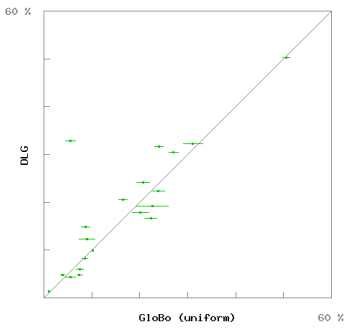
Tableau de résultats I

Problème	C4.5	DLG	GloBo
audiology	**18.20**	24.16	20.76
breast-cancer	4.87	4.87	**3.89**
car	**7.69**	9.95	10.17
cmc	**48.07**	50.31	50.60
crx	**14.79**	20.57	16.50
dermatology	**6.23**	8.18	8.51
ecoli	**15.89**	22.35	23.88
glass	28.72	32.91	**5.57**
hepatitis	20.70	**17.88**	20.09
horse-colic	**13.63**	16.63	22.29
house-votes-84	**3.22**	4.83	7.39
ionosphere	**7.96**	14.84	8.74

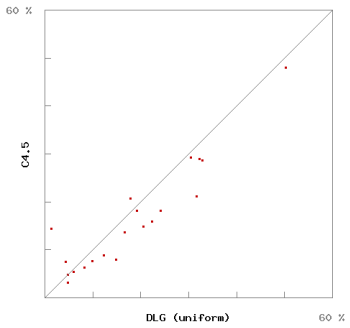
Tableau de résultats II

iris	**5.33**	6.00	7.47
pima	29.29	30.47	**27.04**
promoters	**18.17**	19.17	22.60
sonar	**28.97**	32.18	31.09
tic-tac-toe	14.40	1.35	**1.11**
vowel	**21.21**	31.72	23.99
wine	**8.83**	12.33	8.94
zoo	7.51	**4.38**	5.55
Moyennes	**16.18**	*18.25*	*16.31*
	C4.5	DLG	GloBo

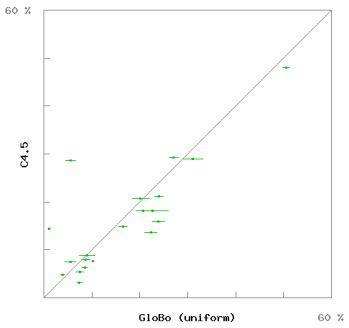
GloBo vs DLG



DLG vs C4.5



GloBo vs C4.5



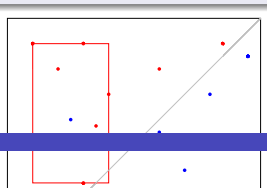
Bruit et précision de Laplace [Clark and Niblett, 1989]

Idée

Autoriser la couverture d'exemples d'autres classes : trouver un compromis entre le nombre total d'exemples couverts par une règle (t) et le nombre d'exemples bien classés par cette règle (b).

Mesures

$$\begin{aligned} \text{Précision} &= \frac{b}{t} = \frac{1}{1} = 100\% = \frac{2}{2} = 100\% = \frac{7}{8} = 87.5\% = \frac{8}{9} = 88.89\% = \frac{10}{14} \\ \text{Précision de Laplace} &= \frac{b+1}{t+k} = \frac{1+1}{1+2} = 66.67\% = \frac{2+1}{2+2} = 75\% = \frac{7+1}{8+2} = 80\% = \frac{8+1}{9+2} = 81. \end{aligned}$$



Données bruitées (2)

Solution pour le bruit

- on réclamait un maintien absolu de la correction ;
- on veut maintenant que la précision de Laplace aille croissante.

$$\text{Précision de Laplace} = \frac{b+1}{t+k}$$

Le critère de validation d'une généralisation dans MGC devient :

1: **if** (PrecisionLaplace(h') $\geq$ PrecisionLaplace(h)) **then**
2: $\quad h = h'$
3: **end if**

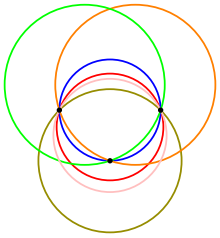
Des hypothèses-cercles

- $\mathcal{E} = \mathbb{R}^2$;
- $d(A, B) = \sqrt{(x_A - x_B)^2 + (y_A - y_B)^2}$;
- $\mathcal{H} = \{(c, r) | (c \in \mathbb{R}^2) \text{ et } (r \in \mathbb{R})\}$;
- $h \succeq e \Leftrightarrow d(c_h, e) \leq r_h$.

Unicité et calcul du moindre généralisé ?

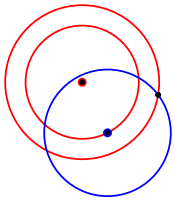
Cercles multiples

Pour un ensemble de points de $\mathbb{R}^2$, il y a une infinité de cercles qui enveloppent ces points...



Cercles : unicité algorithmique (idée 1)

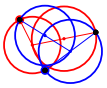
Idée : la graine sert de centre et on augmente le rayon...



Pourquoi est-ce une mauvaise idée ?

Cercles : unicité algorithmique (idée 2)

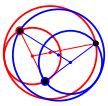
Idée : on prend le nouveau centre entre le précédent centre et le nouveau point.



Bonne ou mauvaise idée ?

Cercles : unicité algorithmique (idée 3)

Idée : on calcule le rayon minimal pour capturer le cercle courant et le nouveau point, on en déduit le nouveau centre.



À tester !
Exercice : définir précisément cet algorithme.

Pour poursuivre

- D'autres idées pour un calcul de cercle ?
- et si nous changions de norme ?

$$d(A, B) = |x_A - x_B| + |y_A - y_B|$$

- et si nous prenions des ellipses ?

Résumé de l'architecture

Trois niveaux :

- le premier niveau fournit l'opération MG permettant de calculer l'hypothèse moindre généralisée d'un ensemble d'exemples quelconque, découle de $\mathcal{H}$ et $\succeq$;
- le deuxième prend en compte les classes des exemples pour produire des hypothèses correctes, ou quasi-correctes si du bruit de classe est présent (MGC) ;
- le dernier niveau permet l'apprentissage d'un classifieur complet, par combinaison de règles élémentaires apprises par le niveau précédent (DLG, GloBo, etc.).

Seul le premier dépend des langages de représentation $\mathcal{E}$ et $\mathcal{H}$.

Bilan

- Constat des difficultés des arbres de décision, choix d'un apprentissage ascendant, guidé par les exemples ; cheminement défendu par [Fürnkranz, 2002] ;
- ascendant guidé : on part des exemples et on les généralise pour construire des hypothèses ;
- plusieurs algorithmes à disposition, valables pour un nombre quelconque de classes, il suffit de définir le test de subsomption et le calcul de moindre généralisé ;
- « fiche signalétique » enrichie :
  - préciser les choix de $\mathcal{E}$ et de $\mathcal{H}$;
  - évaluer la VCdim de $\mathcal{H}$;
  - expliciter le test de subsomption $\succeq$;
  - déterminer si $(\mathcal{H}, \succeq)$ implique l'unicité du moindre généralisé ;
  - proposer un algorithme $\texttt{MG}(h \in \mathcal{H}, e \in \mathcal{X})$.

Un exercice de réflexion pour finir

- Décrire ce qu'il advient des méthodes d'apprentissage vues aujourd'hui :
  1. si le MG colle de très près aux exemples ;
  2. si le MG au contraire décolle très vite ;
- rapprocher votre constat de résultats théoriques vus précédemment.

Bibliographie I

Blake, C. and Merz, C. (1998).
UCI repository of machine learning databases [http ://archive.ics.uci.edu/ml/].

Clark, P. and Niblett, T. (1989).
The cn2 induction algorithm.
Machine Learning, 3(4) :261–283.

Fürnkranz, J. (2002).
A pathology of bottom-up hill-climbing in inductive rule learning.
In *Proceedings of the 13th European Conference on Algorithmic Learning Theory (ALT-02*, pages 263–277. Springer-Verlag.

Bibliographie II

Torre, F. (1999).
GloBo : un algorithme stochastique pour l'apprentissage supervisé et non-supervisé.
In Sebag, M., editor, *Actes de la Première Conférence d'Apprentissage*, pages 161–168.

Webb, G. I. and Agar, J. W. M. (1992).
Inducing diagnostic rules for glomerular disease with the DLG machine learning algorithm.
Artificial Intelligence in Medicine, 4 :419–430.