Estimation de l'erreur de prédiction
Les techniques de ré-échantillonnage

Ricco RAKOTOMALALA

Plan

1. Évaluation des performances
2. Erreur en resubstitution
3. Schéma apprentissage test
4. Validation croisée
5. Bootstrap
6. Influence du mode d'échantillonnage

Évaluation des performances en apprentissage supervisé

L'impossibilité de mesurer l'erreur de prédiction sur la population

Point de départ : On dispose d'un échantillon de taille « n » pour construire un modèle de prédiction M(n)

$$\hat{Y} = M(X, n)$$

Erreur de prédiction : Comptabilisée en confrontant « vraie » valeur de Y et valeur prédite par M dans la population

$$\varepsilon = \frac{\sum_{\omega \in \Omega_{pop}} [Y(\omega) \neq \hat{Y}(\omega)]}{card(\Omega_{pop})}$$

Interprétation : Probabilité de mal classer avec le modèle de prédiction

Problème : (1) On ne dispose (presque) jamais de la population

(2) L'accès à tous les individus serait trop coûteux

Comment s'en sortir en ne disposant en tout et pour tout que de l'échantillon « n » pour construire le modèle et en évaluer les performances…

Évaluation des performances en apprentissage supervisé

Illustration avec les « Ondes » de Breiman (1984)

Description :

- Prédire la forme d'onde (3 valeurs possibles) à partir de 21 mesures continues
- Données simulées, donc virtuellement infinies
- n = 500 ind., utilisés pour construire les modèles (dataset)
- n = 500.000 ind., pour mesurer les performances sur la « population » (notre référence)
- 3 modèles avec des caractéristiques différentes (LDA, C4.5 et RNA-Perceptron)

Les « vrais » taux d'erreur : Mesurés sur la « population ».

	Erreur "théorique" (Calculé sur 500000 obs.)
LDA	0.185
C4.5	0.280
RNA (10 CC)	0.172

Comment obtenir (approcher) ces valeurs en disposant uniquement des n=500 observations ?

Erreur en resubstitution

Utiliser le même « dataset » pour construire ET tester le modèle

Démarche :

• Construire le modèle sur le dataset (n= 500)

• Ré appliquer le modèle sur ce même dataset

• Construire la matrice de confusion et en extraire une estimation de l'erreur théorique

→ On parle d'erreur en **resubstitution**

$$e_r = \frac{\sum_{\omega \in \Omega} [Y(\omega) \neq \hat{Y}(\omega)]}{n}$$

Résultats

	Erreur "théorique"	Erreur Resubstitu
LDA	0.185	0.124
C4.5	0.280	0.084
RNA (10 CC)	0.172	0.064

Commentaires :

• L'erreur en resubstitution est (quasiment) toujours optimiste – « Biais d'optimisme »

• L'optimisme dépend des caractéristiques du classifieur c.-à-d. de son aptitude à « coller » aux données

• Plus un point influe sur sa propre affectation, plus le biais d'optimisme sera élevé

→ (1) RNA, 1-ppv : 0% d'erreur en apprentissage, etc.

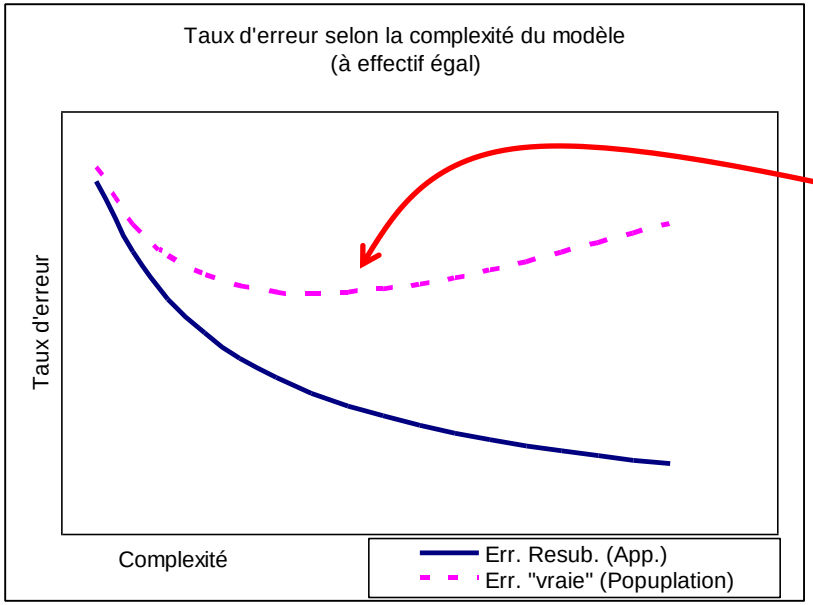
→ (2) Modèles à forte complexité

→ (3) Cas des faibles effectifs (n petit)

→ (4) Dimensionnalité élevée (surtout par rapport aux effectifs) et variables bruitées

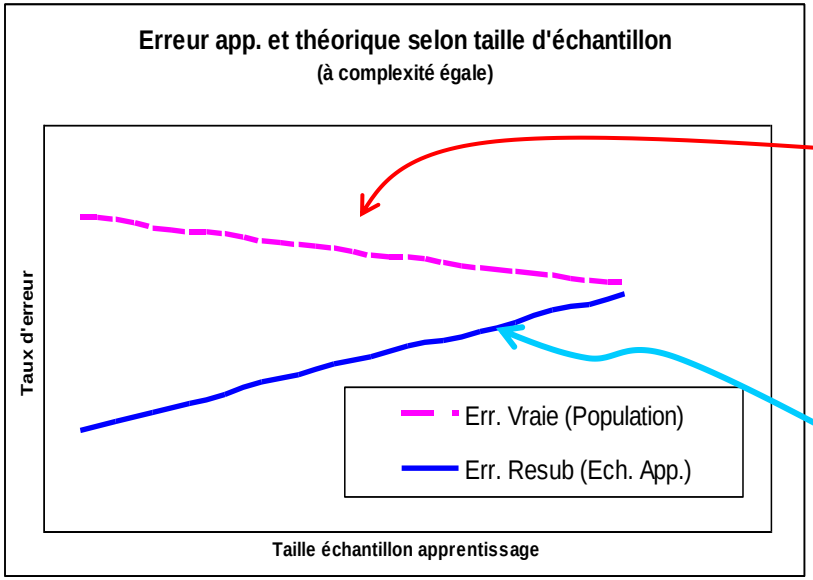
Erreur en resubstitution et « vraie » erreur

Selon la complexité du modèle et selon les effectifs



On commence à « apprendre » les informations spécifiques (les scories) au fichier qui ne sont pas transposable à la population

(ex. trop de variables ; trop de neurones dans la c.c. ; arbre de décision trop profond…)



Plus la taille d'échantillon augmente, plus on apprend efficacement la « relation sous-jacente » entre Y et les X dans la population

Plus la taille d'échantillon augmente, moins on « sur apprend » les spécificités c.-à-d. (souvent) les probabilités conditionnelles P(Y/X) sont mieux estimées

Schéma Apprentissage – Test

Dissocier les données pour construire et pour évaluer le modèle

Apprentissage, learning set

Ω_a

$n_a \approx 60\% \sim 70\%$

Ω

n

Dataset

Ω_t

$n_t \approx 30\% \sim 40\%$

Test, test set

$M(X, n_a)$

$$e_t = \frac{\sum_{\omega \in \Omega_t} [Y(\omega) \neq \hat{Y}(\omega)]}{n_t}$$

Erreur en **test**

Estimateur sans biais de l'erreur de $M(X,n_a)$!!!

Modèle : LDA(X,300) → $\varepsilon = 0.2099$ Calculé sur les 500.000 obs.

Test set : 200 obs. → $\varepsilon = 0.1950$

Expérimentation

Répéter 100 fois le schéma
300 ind. App., 200 ind. Test →

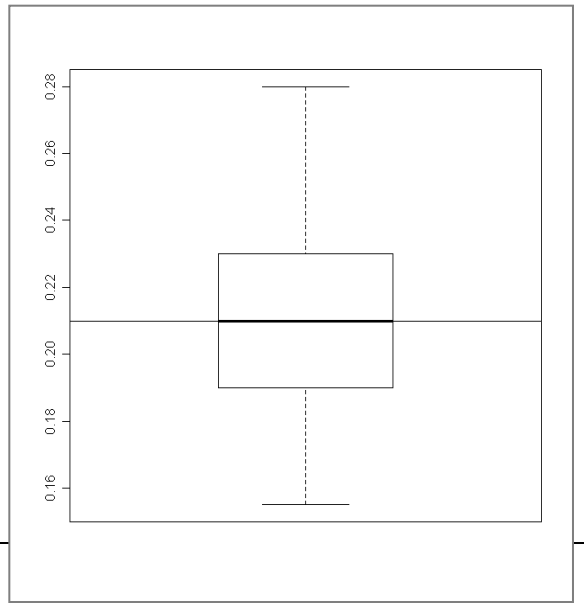


Schéma Apprentissage-test

Biais et variance

e_t Est un estimateur sans biais de l'erreur de $M(X, n_a)$ LDA(X,300)

Mais C'est un estimateur **biaisé** de l'erreur de $M(X, n)$ LDA(X,500)

Une partie des données seulement (300 obs.) sert à construire le modèle → l'apprentissage est de moins bonne qualité (que si on utilise les 500 obs.)

Biais

Pourquoi ? Deux phénomènes s'opposent...

Moins on met d'obs. en apprentissage, plus l'estimation de l'erreur sera biaisée

Plus on met des observations en test, plus l'estimation de l'erreur sera précise

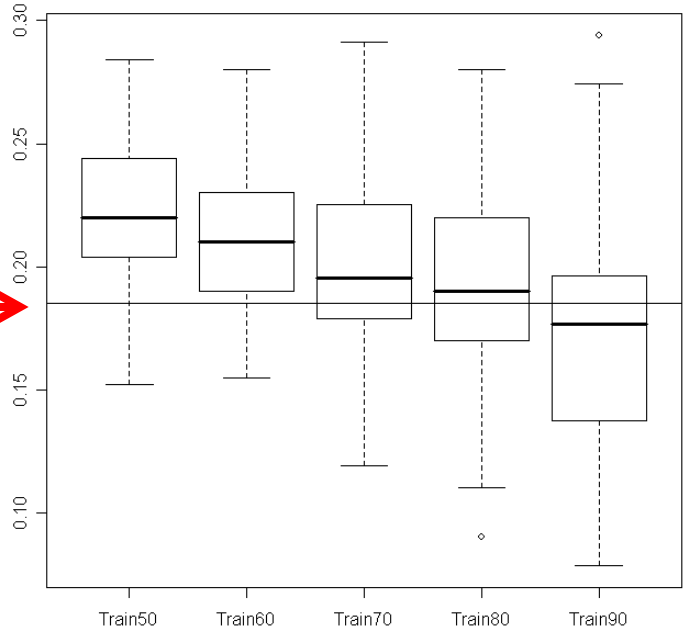
Variance

Schéma apprentissage-test

Biais-variance (expérimentation)

La partie apprentissage augmente

« Vrai » taux d'erreur de
LDA(X,500) = 0.185



Biais fort
Variance faible

Biais faible
Variance forte

Conclusion :

- L'erreur en test est un estimateur non biaisé du modèle construit sur la partie apprentissage
- C'est un mauvais estimateur de l'erreur commis par le modèle construit sur l'ensemble des données

- La subdivision « apprentissage-test » n'est intéressant que sur les bases de taille importante

- Sinon, on est face à un dilemme : pénaliser le modèle pour mieux estimer ses performances, ou favoriser la construction du modèle sans savoir ce qu'il vaut dans la population

Comment estimer l'erreur de M(X,n) ?

Les méthodes de ré-échantillonnage

Validation croisée
Leave-one-out
Bootstrap

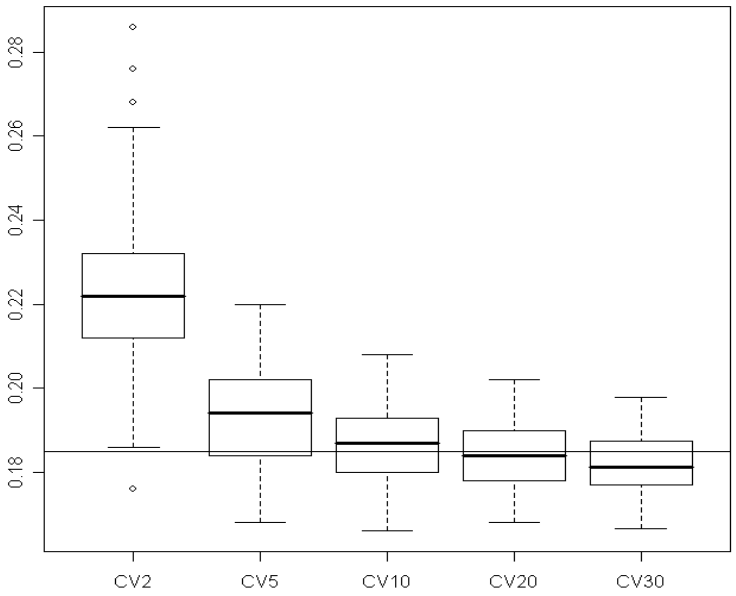
Validation croisée

Principe

Algorithme

- Subdiviser l'échantillon en K blocs
- Pour chaque k :
  - Construire sur le modèle $M(X,n-n_k)$
  - Calculer l'erreur en test sur n_k → e_k
- e_{cv} = la moyenne des erreurs e_k

« Vrai » taux d'erreur de LDA(X,500) = 0.185



- K=10 assure un bon compromis entre « biais » et « variance » pour la majorité des cas (données et méthodes)

- Utiliser la validation répétée (B x K-Fold Cross validation) en améliore les caractéristiques

- Sur les cas de fort sur apprentissage (certaines méthodes mal paramétrées, ratio élevé de variables vs. individus, beaucoup de variables non pertinentes, etc.), la validation croisée (avec K élevé) a tendance à sous-estimer l'erreur !!!

Leave-one-out

Validation croisée où K = n

Algorithme

- Subdiviser l'échantillon en K=n blocs
- Pour chaque individu k :
  - Construire sur le modèle M(X,n-1)
  - Calculer l'erreur en test sur le k-ième ind. → e_k
- Calculer la moyenne e_{loo} des erreurs en test

e_k = 1 (erreur) ou 0 (bon classement)

Proportion des erreurs

- Nettement plus coûteux en calcul que la K validation croisée sans être meilleur

- Sous-estimation (dramatique) de l'erreur en cas de sur apprentissage (ex. un classifieur 1-PPV dans un espace sur dimensionné)

Simulation (sur l'échantillon de taille 500)

	Erreur "théorique" (Calculé sur 500000 obs.)	10-CV	Leave one out
LDA	0.185	0.170	0.174
C4.5	0.280	0.298	0.264
RNA (10 CC)	0.172	0.174	0.198

On peut « stabiliser » en répétant la procédure

Un seul essai possible sur un échantillon de taille n

Algorithme

- Répéter B fois (on parle de réplications)
  - Tirage avec remise d'un échantillon de taille n → Ω_b
  - Distinguer les individus non échantillonnés → $\Omega_{(b)}$
  - Apprentissage du modèle sur Ω_b
  - Erreur en resubstitution sur Ω_b [$e_r(b)$]
  - Erreur en test sur $\Omega_{(b)}$ [$e_t(b)$]
  - Calcul de l'optimisme o_b

Sur l'échantillon complet, calculer l'erreur en resubstitution

(1) $$e_B = e_r + \frac{\sum_b o_b}{B}$$

e_r est l'erreur en resubstitution calculée sur la totalité de l'échantillon
C'est l'optimisme qui est estimé en bootstrap
Il est utilisé pour corriger l'erreur en resubstitution
La correction est souvent un peu exagérée (l'erreur est sous-estimée en bootstrap)

(2) $$e_{0.632B} = 0.368 \times e_r + 0.632 \times \frac{\sum_b e_t(b)}{B}$$

0.632 bootstrap
→Pondérer par la probabilité qu'un individu fasse partie de Ω_b sur une réplication (#0.632)
La correction est plus réaliste

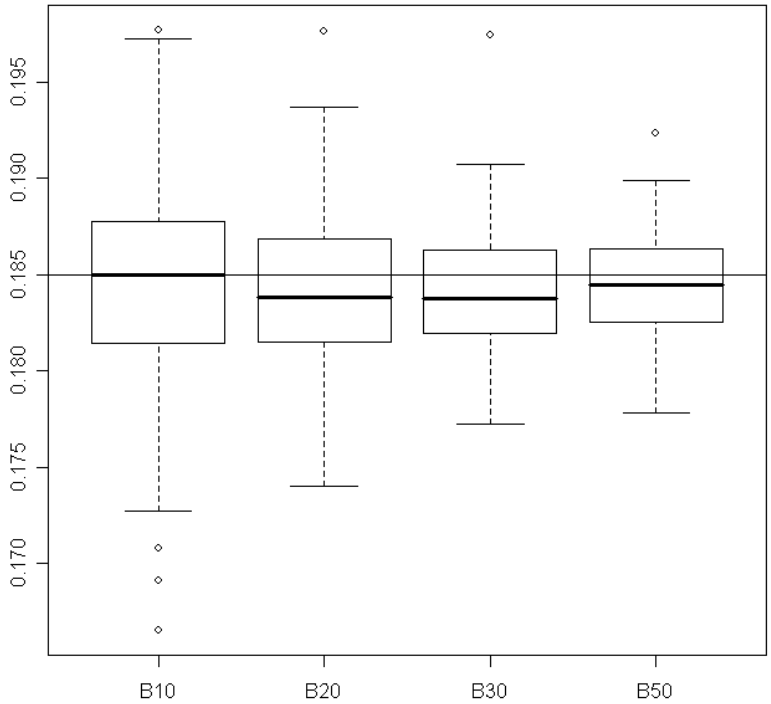
(3) Il existe une troisième formule pour corriger le biais induit par la méthode d'apprentissage : 0.632+ bootstrap

Bootstrap

Simulation -- 0.632 Bootstrap

Augmentation du nombre de réplications

« Vrai » taux d'erreur
LDA = 0.185



Réduction de la variance – B # 25 suffit généralement
Peu d'effet sur le biais

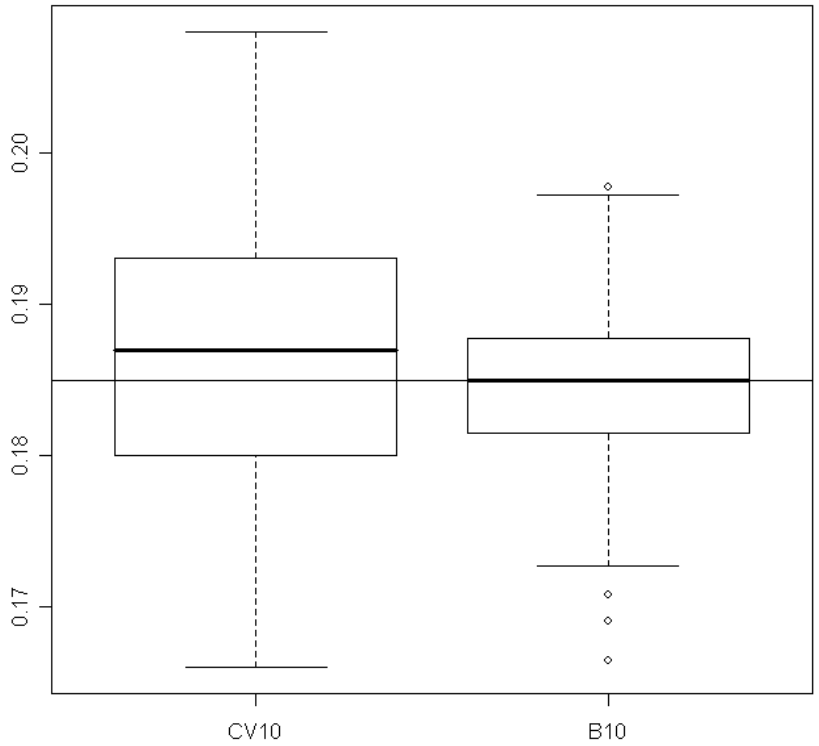
Le **biais** vient du fait qu'à chaque réplication, on utilise bien n obs. pour construire le modèle, mais comme certains individus se répètent, l'information est redondante, la construction du modèle est pénalisée… nous n'avons pas prise dessus…

Validation croisée ou bootstrap ?

A effort de calcul égal (ici 10 séquences apprentissage – test)

• Bootstrap a une variance plus faible (c'est flagrant ici)

• Mais la validation croisée est moins biaisée (nous avons un contre-exemple ici, ce n'est qu'une simulation à 100 essais)



Dans les publications scientifiques, les chercheurs semblent plutôt privilégier la validation croisée… peut être parce qu'elle est plus simple à implémenter….

Schéma d'échantillonnage

Impact sur l'estimation de l'erreur en la validation croisée

Stratification, effet grappe, etc.

Principe général : le mode de constitution des blocs doit respecter le mode de constitution de l'échantillon de données

→ Si l'échantillon est stratifié, les blocs doivent être stratifiés de la même manière (notamment, on essaie de respecter la distribution de la variable à prédire dans chaque bloc)

Objectif : réduire la variance.
L'amélioration est faible dans la pratique…

→ Si l'échantillon est formé par un tirage par grappes, les blocs doivent être formés à partir de tirages sur les grappes

Attention : Dans le cas contraire, on sous-estime fortement l'erreur, la V.C. est biaisée…

Conclusion

• Erreur en resubstitution est (presque) toujours trop optimiste

• Son optimisme dépend des caractéristiques des données et du classifieur → de l'aptitude de ce dernier à « coller aux données »

• Le découpage apprentissage-test n'est vraiment intéressant que sur les « grandes » bases

• L'erreur en test estime l'erreur du modèle construit sur la partie apprentissage

• Il n'indique « rien » (ou très mal) sur les performances du modèle construit sur la totalité des données

• K-validation croisée et leave-one-out proposent des performances équivalentes en général

• K = 10 semble un bon compromis pour la validation croisée

• La 10-validation croisée répétée améliore la précision

• 0.632 bootstrap a en général une variance plus faible que la validation croisée, mais un biais plus fort (et on ne peut pas réellement agir dessus)

• Bootstrap et validation croisée se valent, surtout lorsque la taille de l'échantillon augmente

• En situation de fort sur apprentissage, validation croisée et bootstrap donnent de mauvaises indications

Références

D. Zighed, R.Rakotomalala, « Graphes d'induction », Hermès, 2000.
Chapitre 11, pages 237-261, « Évaluation empirique des classifieurs »
Ou « Graphes d'Induction », R. Rakotomalala, 1997, Chapitre 2, pages 23-41
http://eric.univ-lyon2.fr/~ricco/doc/Graphes_Induction_These_Rakotomalala_1997.pdf

J-C. Turlot, « Évaluation de la qualité d'une règle de décision et sélection de variables », in G. Celeux, J-P. Nakache, Eds, « Analyse discriminante sur variables qualitatives », Polytechnica, Chapitre 6, pages 147-180, 1994.

A. Molinaro, R. Simon, R. Pfeiffer, « Prediction error estimation: a comparison of resampling methods », in Bioinformatics, 21(15), pages 3301-3307, 2005
http://bioinformatics.oxfordjournals.org/cgi/content/full/21/15/3301