Preparazione

```
In [ ]: # importo tutti i pacchetti necessari al progetto
        import numpy as np
        import seaborn as sns
        import matplotlib.pyplot as plt
        from matplotlib.colors import ListedColormap
        import pandas as pd
        from tqdm import tqdm
        import copy
        from sklearn.model_selection import train_test_split, RandomizedSearchCV, cross_val
        from sklearn.utils import resample
        from sklearn.metrics import r2 score, mean absolute percentage error, mean squared
        from sklearn.ensemble import RandomForestRegressor
        from sklearn.datasets import load diabetes
        np.random.seed(17)
In []; # ottengo la colormap e i colori per i grafici
        cmap = plt.get_cmap("viridis")
        colors = cmap(np.linspace(0, 1, 11))
In [ ]: # imposto l'opzione display.float format per evitare le annotazioni scientifiche
        pd.set_option('display.float_format', '{:.3f}'.format)
In [ ]: # importo il dataset
        diabetes = load diabetes(as frame=True)["frame"]
```

Analisi esplorativa

Dalla documentazione ho le seguenti informazioni:

Data Set Characteristics:

Number of Instances:

442

Number of Attributes:

First 10 columns are numeric predictive values

Target:

Column 11 is a quantitative measure of disease progression one year after baseline

Attribute Information:

```
age in years,
```

sex,

bmi body mass index,

bp average blood pressure,

s1 tc, total serum cholesterol,

s2 ldl, low-density lipoproteins,

s3 hdl, high-density lipoproteins,

s4 tch, total cholesterol / HDL,s5 ltg, possibly log of serum triglycerides level,s6 glu, blood sugar level.

Quindi si tratta di un dataset contenente dati medici di diversi pazieni.

Il target è una misura numerica di quanto la malattia (diabete) è progredita in un anno.

Faccio una breve analisi dei dati per confermare le informazioni trovate nella documentazione.

In []: # mostro il dataframe
diabetes

Out[]:

	age	sex	bmi	bp	s1	s2	s3	s4	s5	s6	target
0	0.038	0.051	0.062	0.022	-0.044	-0.035	-0.043	-0.003	0.020	-0.018	151.000
1	-0.002	-0.045	-0.051	-0.026	-0.008	-0.019	0.074	-0.039	-0.068	-0.092	75.000
2	0.085	0.051	0.044	-0.006	-0.046	-0.034	-0.032	-0.003	0.003	-0.026	141.000
3	-0.089	-0.045	-0.012	-0.037	0.012	0.025	-0.036	0.034	0.023	-0.009	206.000
4	0.005	-0.045	-0.036	0.022	0.004	0.016	0.008	-0.003	-0.032	-0.047	135.000
•••											
437	0.042	0.051	0.020	0.060	-0.006	-0.003	-0.029	-0.003	0.031	0.007	178.000
438	-0.006	0.051	-0.016	-0.068	0.049	0.079	-0.029	0.034	-0.018	0.044	104.000
439	0.042	0.051	-0.016	0.017	-0.037	-0.014	-0.025	-0.011	-0.047	0.015	132.000
440	-0.045	-0.045	0.039	0.001	0.016	0.015	-0.029	0.027	0.045	-0.026	220.000
441	-0.045	-0.045	-0.073	-0.081	0.084	0.028	0.174	-0.039	-0.004	0.003	57.000

442 rows × 11 columns

Il Dataframe è composto da 442 samples e da 11 colonne (10 features ed un target)

A prima vista tutte le features sembrano numeriche continue a parte sex. Il target sembra essere numerico continuo.

Approfondisco l'analisi:

In []: diabetes.info()

```
<class 'pandas.core.frame.DataFrame'>
         RangeIndex: 442 entries, 0 to 441
         Data columns (total 11 columns):
               Column Non-Null Count Dtype
                        _____
          0
                        442 non-null
                                          float64
               age
          1
                        442 non-null
                                        float64
               sex
          2
                        442 non-null
                                          float64
               bmi
          3
                        442 non-null
                                          float64
              bp
          4
              s1
                        442 non-null
                                          float64
          5
              s2
                        442 non-null
                                          float64
          6
              s3
                        442 non-null
                                          float64
          7
               s4
                        442 non-null
                                          float64
          8
               s5
                        442 non-null
                                          float64
          9
               s6
                        442 non-null
                                          float64
          10
              target 442 non-null
                                          float64
         dtypes: float64(11)
         memory usage: 38.1 KB
In []:
         # verifico presenza di zeri
         diabetes.eq(0).sum()
                     0
         age
Out[]:
                     0
         bmi
                     0
                     0
         bp
         s1
                     0
         s2
                     0
         s3
                     0
         s4
                     0
         s5
                     0
                     0
         s6
         target
                     0
         dtype: int64
In []:
         diabetes.describe()
                                                         s1
                                                                 s2
                                                                          s3
Out[]:
                    age
                             sex
                                     bmi
                                               bp
                                                                                   s4
                                                                                           s5
                                                                                                    s6
         count 442.000
                        442.000
                                 442.000 442.000
                                                   442.000 442.000 442.000
                                                                              442.000 442.000 442.000
                  -0.000
                                   -0.000
                                            -0.000
                                                                               -0.000
                                                                                                  0.000
          mean
                           0.000
                                                     -0.000
                                                              0.000
                                                                      -0.000
                                                                                         0.000
           std
                  0.048
                           0.048
                                    0.048
                                             0.048
                                                     0.048
                                                              0.048
                                                                       0.048
                                                                                0.048
                                                                                         0.048
                                                                                                 0.048
           min
                  -0.107
                          -0.045
                                   -0.090
                                             -0.112
                                                     -0.127
                                                              -0.116
                                                                       -0.102
                                                                               -0.076
                                                                                        -0.126
                                                                                                 -0.138
          25%
                  -0.037
                          -0.045
                                   -0.034
                                            -0.037
                                                     -0.034
                                                              -0.030
                                                                       -0.035
                                                                               -0.039
                                                                                        -0.033
                                                                                                 -0.033
          50%
                  0.005
                          -0.045
                                   -0.007
                                            -0.006
                                                     -0.004
                                                              -0.004
                                                                       -0.007
                                                                               -0.003
                                                                                        -0.002
                                                                                                 -0.001
                                                                                                  0.028
          75%
                  0.038
                            0.051
                                    0.031
                                             0.036
                                                     0.028
                                                              0.030
                                                                       0.029
                                                                                0.034
                                                                                         0.032
                   0.111
                            0.051
                                     0.171
                                             0.132
                                                      0.154
                                                               0.199
                                                                        0.181
                                                                                0.185
                                                                                         0.134
                                                                                                  0.136
           max
```

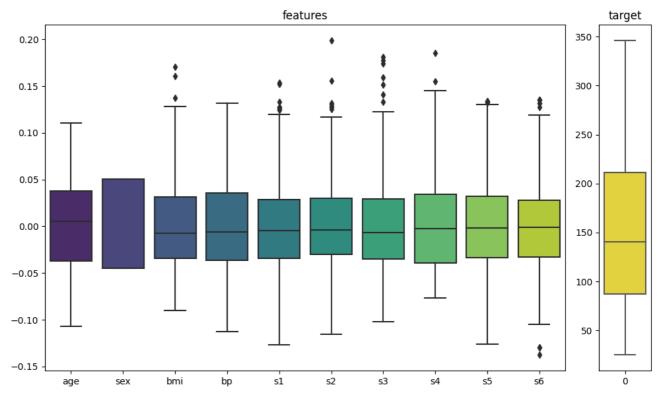
Tutti i dati sono numerici (float64) e non ci sono nè zeri ne valori mancanti.

Grazie alla documentazione so che i dati sono stati centrati sulla media di ogni colonna e scalati dalla deviazione standard per la radice quadrata di n_campioni (cioè la somma dei quadrati di ogni colonna è uguale a 1).

Il target è composto da valori numerici che vanno da un minimo valore di 25 ad uno massimo di 346.

Outliers

```
In []:
        # imposto il grafico
        fig, axs = plt.subplots(figsize=(10, 6), width_ratios=[10,1], ncols=2)
         # creo il boxplot delle features
        sns.boxplot(
            data=diabetes.drop(columns="target"),
            palette="viridis",
            ax=axs[0])
        axs[0].set_title("features")
        # creo il boxplot del target
        sns.boxplot(
            data=diabetes["target"],
            color=colors[10],
            ax=axs[1]
        axs[1].set title("target")
        plt.tight_layout()
```



Il grafico mostra la presenza di outliers nelle features.

Sono presenti nella maggior parte delle features e quasi tutti superano il limite superiore (terzo quartile $+ 1.5 \times IQR$).

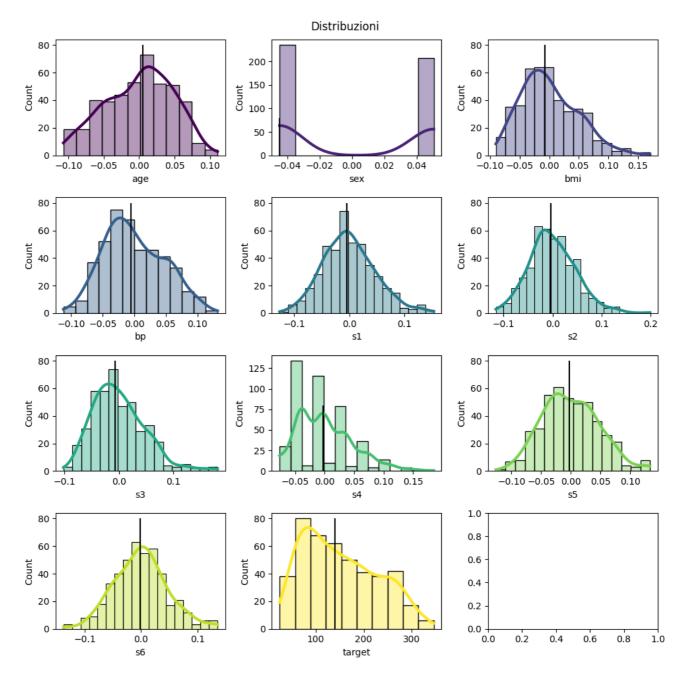
Questo indica una distribuzione dei dati con coda a destra che porta a sovrastimare la media come indice di tendenza centrale. La mediana in questo caso riassume meglio i dati.

Il target non sembra avere outliers.

Distribuzioni

osservo le distribuzioni delle features e del target

```
In [ ]: # grafico boxplot e della distribuzione del target
        fig, axs = plt.subplots(
            figsize=(10, 10),
            nrows=4,
            ncols=3
        axs = axs.ravel()
        # imposto histplot
        for i, col in enumerate(diabetes.columns):
            sns.histplot(
                diabetes,
                x=diabetes[col],
                color=colors[i],
                ax=axs[i],
                kde=True,
                line_kws={"linewidth": 3},
                alpha=0.4
            # traccio mediana
            axs[i].vlines(
                diabetes[col].median(),
                ymin=0,
                ymax=80,
                color="k")
        plt.suptitle("Distribuzioni")
        plt.tight_layout()
```



I grafici delle distribuzioni mostrano che le features bmi, s2, s3 ed s4 hanno una distribuzione con coda a destra abbastanza accentuata.

Il target ha una distribuzione con coda a destra.

Si può notare infine la natura categorica della feature "sex". I dati infatti sono concentrati solamente su due valori (maschio e femmina).

Features Categoriche

Vado ad approfondire l'analisi dei dati sulla colonna "sex" in quanto, essendo questa una variabile binaria categorica, è necessario analizzarla in modo differenti dalle altre features.

Per approfondire l'analisi di questa feature vado a creare un grafico della distribuzione dei due sessi rispetto ai valori di target. Questo mi permette di osservare se ci sono differenze significative tra le due categorie, maschio e femmina, in relazione all'andamento dei valori del target.

Non sapendo quale dato corrisponda a Maschio e Femmina lascio come etichetta sex_neg e sex_pos.

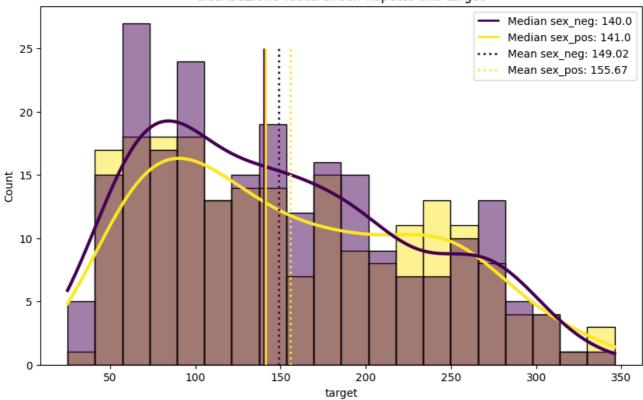
```
In [ ]: # imposto dimensioni grafico
        plt.figure(figsize=(10, 6))
         # creo il grafico della distribuzione del sesso rispetto al target
        sns.histplot(
            diabetes,
            x="target",
            hue="sex",
            bins=20,
            kde=True,
            palette="viridis",
            alpha=0.5,
            legend=False,
            line kws={"linewidth": 3},
         # calcolo mediana e media
        median neg = round(
             diabetes.loc[diabetes["sex"] < 0, "target"].median(),</pre>
        median pos = round(
             diabetes.loc[diabetes["sex"] > 0, "target"].median(),
        mean neg = round(
            diabetes.loc[diabetes["sex"] < 0, "target"].mean(),</pre>
        mean pos = round(
            diabetes.loc[diabetes["sex"] > 0, "target"].mean(),
         )
         # traccio mediana e media sul grafico
        plt.vlines(
            median neg,
            ymin=0,
            ymax=25,
            linestyle="solid",
            color=colors[0],
            linewidth=2,
            label=f"Median sex_neg: {median_neg}",
        plt.vlines(
            median pos,
            ymin=0,
            ymax=25,
            linestyle="solid",
            colors=colors[10],
            linewidth=2,
            label=f"Median sex pos: {median pos}",
        plt.vlines(
            mean neg,
            ymin=0,
            ymax=25,
            linestyle="dotted",
            colors=colors[0],
            linewidth=2,
             label=f"Mean sex neg: {mean neg}",
```

```
plt.vlines(
    mean_pos,
    ymin=0,
    ymax=25,
    linestyle="dotted",
    colors=colors[10],
    linewidth=2,
    label=f"Mean sex_pos: {mean_pos}",
)

plt.legend()
plt.title("distribuzione feature: sex rispetto alla target")

plt.show()
```

distribuzione feature: sex rispetto alla target



Il grafico mostra un andamento della distribuzione simile per entrambi i sessi.

La mediana è molto simile per entrambi i sessi, per sex_neg è 140 e 141 per sex_pos.

La media vale 149 per sex_neg e 155.67 per sex_pos.

La classe sex_pos sembra meno rappresentata di sex_neg, vado a contare i campioni con sex_pos e quelli con sex_neg.

```
In []: # conto valori sex
diabetes["sex"].value_counts()

Out[]: -0.045     235
     0.051     207
     Name: sex, dtype: int64
```

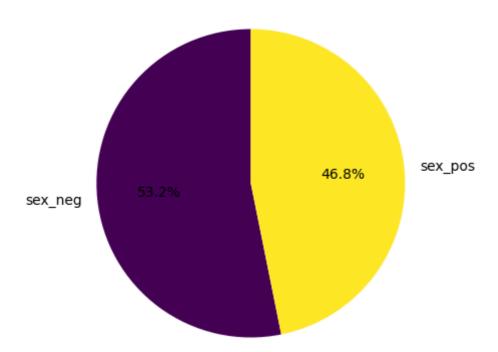
Creo un grafico a torta per visualizzare meglio la differenza tra i due sessi.

```
In []: # dati per il grafico a torta
labels = ["sex_neg", "sex_pos"]
sizes = [
    diabetes["sex"].value_counts().values[0],
    diabetes["sex"].value_counts().values[1],
```

```
# creo il grafico a torta
plt.figure(figsize=(5, 5))
plt.pie(
    sizes,
    labels=labels,
    colors=(colors[0], colors[10]),
    autopct="%1.1f%%",
    startangle=90,
)
plt.title("percentuale feature sex")
```

Out[]: Text(0.5, 1.0, 'percentuale feature sex')

percentuale feature sex



I campioni sex_neg sono 235 mentre quelli sex_pos sono 207. Una differenza di 28 campioni su un totale di 442.

sex_neg sono quindi il 53.2% dei campioni mentre sex_pos sono il restante 46.8%

Correlazioni

Calcolo le correlazioni tra le features per evitare un possibile problema di multicollinearità.

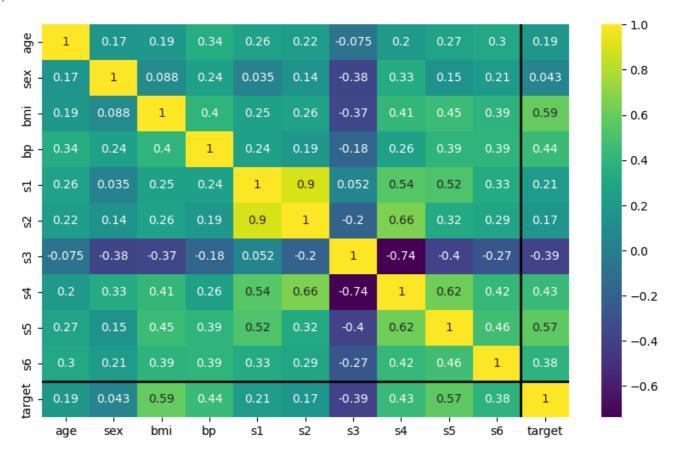
Utilizzo il metodo di Pearson per identificare correlazioni lineari tra le features e quindi la possibilità di multicollinearità.

```
In []: # creo la matrice di correlazione
    matrix = diabetes.corr(method="pearson")

# imposto il grafico
    plt.figure(figsize=(10,6))

# creo il grafico
    sns.heatmap(matrix,
```

Out[]: <matplotlib.lines.Line2D at 0x78704592eb30>



La tabella mostra l'indice di correlazione tra i dati calcolato con il metodo di Pearson.

La matrice di correlazione mostra che alcune features hanno un certo grado di correlazione, in particolare "s1" ed "s2" sono molto correlate positivamente (0.9).

Questo potrebbe portare ad un problema di multicollinearità.

Le features maggiormente correlate con il target sono "bmi" e "s5".

"s3" è l'unica feature correlata negativamente con il target.

I valori di correlazione tra features e target non sono molto alti. Questo può indicare una bassa prevedibilità del dataset oppure una correlazione non lineare.

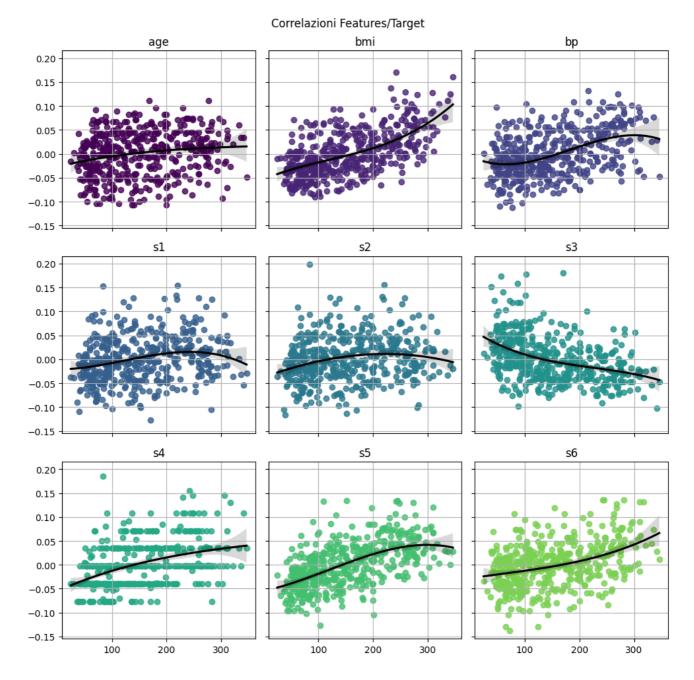
Relazioni Features/Target

Rappresento graficamente le features creando uno scatter plot features/target

Usando sns.regplot() oltre allo scatter plot rappresento una linea di regressione polinomiale con grado a scelta.

In questo caso provo ad usare un grado=3 che sembra rappresentare bene i dati.

```
In [ ]: # imposto il grafico
        fig, axs = plt.subplots(
            nrows=3,
            ncols=3,
            figsize=(10, 10),
            sharex=True,
            sharey=True
        axs = axs.ravel()
        # itero attraverso le colonne del DataFrame per creare i diversi assi
        for idx, column in enumerate(
            diabetes.columns[[0, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9]]
         ): # prendo solo le colonne di mio interesse
            sns.regplot(
                data=diabetes,
                x="target",
                y=column,
                color=colors[idx],
                line_kws={"color": "k"},
                order=3,
                ax=axs[idx],
             )
            axs[idx].set_title(column)
            axs[idx].set xlabel("")
            axs[idx].set_ylabel("")
            axs[idx].grid()
        # imposto titolo e layout
        plt.suptitle(
             "Correlazioni Features/Target",
            horizontalalignment="center"
        plt.tight layout()
```



I regplot permettono di osservare meglio le possibili correlazioni tra le feature e il target. Si possono notare possibili correlazioni positive per le features "bmi", "s5", "bp" ed "s6", ed una possibile correlazione negativa per "s3".

Conclusioni analisi esplorativa

L'analisi esplorativa mostra 3 possibili problematiche che potrebbero andare ad inficiare l'efficienza dell'addestramento del modello:

- sono presenti outliers nelle features
- la feature "sex" è leggermente sbilanciata a favore di "sex_neg"
- le features "s1" ed "s2" sono molto correlate tra loro. Rischio di multicollinearità.

Scelta del modello

Le caratteristiche principali del dataset sono le seguenti:

dimensioni ridotte (meno di 500 samples)

- target numerico e continuo --> REGRESSIONE
- features principalmente numeriche continue ed una categorica binaria ("sex")
- · sono presenti outliers nelle features
- alcune features sono molto correlate tra loro --> rischio multicollinearità
- le features hanno basso indice di correlazione con il target --> correlazioni non lineari o dati poco prevedibili

In base a queste considerazioni penso che il modello migliore da utilizzare sia **Random Forest** in quanto:

- la sua natura di ensamble lo rende versatile ed accurato
- può gestire sia variabili continue che categoriche
- poco sensibile agli outliers e a dati rumorosi
- risente poco della multicollinearità
- riesce a identificare correlazioni non lineari
- incorpora tecniche per la riduzione dell'overfitting (bootstrap)
- è di facile interpretazione grazie ad esempio alla possibilità di analizzare l'importanza delle features

Set split

Il dataset è composto da 442 campioni (righe) e da 10 features (colonne).

Divido il dataset in training set e test set in modo da poter analizzare ed addestrare il modello su una porzione di dati e poter successivamente testare le predizioni del modello sul test set.

Vista la bassa dimensionalità del dataset e che il caso potrebbe incidere notevolmente sull'addestramento del modello, verifico che lo split casuale abbia generato un training set rappresentativo dell'intero dataset.

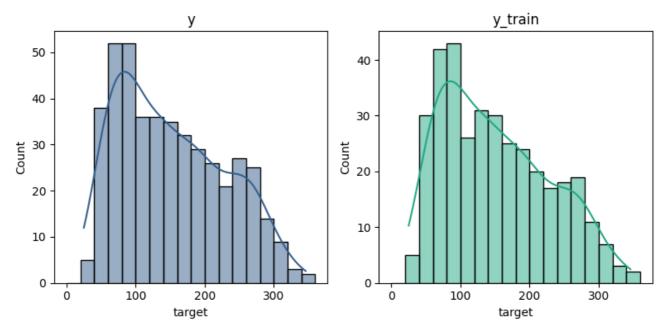
Per fare ciò confronto le distribuzioni di y e di y_train.

```
In []: # imposto il grafico
    fig, axs = plt.subplots(
        figsize=(8,4),
        ncols=2
)

# dataset intero
sns.histplot(
        Y,
        kde=True,
```

```
ax=axs[0],
  color=colors[3],
  binwidth=20,
  binrange=(0, 350)
)
axs[0].set_title("y")

# dataset addestramento
sns.histplot(
  y_train,
  kde=True,
  ax=axs[1],
  color=colors[6],
  binwidth=20,
  binrange=(0, 350)
)
axs[1].set_title("y_train")
plt.tight_layout()
```



```
In []: X_train.shape
Out[]: (353, 10)
In []: X_test.shape
Out[]: (89, 10)
```

I nuovi dataset creati sono formati rispettivamente da 353 campioni (train) e da 89 campioni (test).

y_train sembra avere una distribuzione simile ad y.

y_train quindi dovrebbe riuscire a rappresentare bene l'intero dataset, permettendo al modello di addestrarsi correttamente.

Baseline model

Definisco un baseline model con iperparametri di default in modo da avere una prima idea di come si addestra il modello e di conseguenza come modificare gli iperparametri per migliorare il

L'unico iperparametro che modifico rispetto all'impostazione standard è oob_score che imposto su True. Oob_score permette di calcolare il punteggio sui dati esclusi dal bootstrap (out of bag) e non incide sull'andamento dell'addestramento.

```
In [ ]: # defiisco il modello RF
        baseline_model = RandomForestRegressor(
                        n estimators=100,
                        criterion="squared_error",
                        max depth=None,
                        min samples split=2,
                        min_samples_leaf=1,
                        min weight fraction leaf=0.0,
                        max features=1.0,
                        max leaf nodes=None,
                        min_impurity_decrease=0.0,
                        bootstrap=True,
                        oob score=True,
                        n jobs=None,
                        random state=17,
                        verbose=0,
                        warm start=False,
                        ccp alpha=0.0,
                        max samples=None,
In [ ]: # addestro il baseline model -> (Fitted Base Line model)
        baseline_model.fit(X_train, y_train)
Out[]: •
                           RandomForestRegressor
        RandomForestRegressor(oob_score=True, random_state=17)
In [ ]: # predico test e train
        y_pred_bl = baseline_model.predict(X_test) # predizione test
```

```
Utilizzo due metriche per valutare l'errore: R2 e mean absolute percentage errore (MAPE) in
```

y pred train bl = baseline model.predict(X train) # predizione train

R2 rappresenta la percentuale di varianza del target che può essere spiegata dalle variabili indipendenti del modello. Valori di R2 vicini ad 1 indicano che la varianza è poca e quindi che il modello riesce a generalizzare bene sull'andamento dei dati.

quanto sono misure relative e permettono facilmente di osservare l'esito dell'addestramento.

Mean Absolute Percentage Error (MAPE) fornisce una stima dell'errore medio del modello, misurato in percentuale della variabile dipendente. Valori di MAPE vicino a 0 indicano che l'errore assoluto medio è poco, quindi il modello riesce a prevedere bene l'andamento del target.

Inoltre calcolo il oob_score (Out of Bag score), usando come metrica R2, in modo da avere un riferimento per l'ottimizzazione degli iperparametri che effettuerò successivamente.

Utilizzo oob_score perchè mi permette di avere un punteggio su dati su cui il modello non si è addestrato direttamente con il fitting (simile al punteggio su un validation set ma senza dover splittare il dataset).

Per calcolare l'oob_score vengono presi i campioni scartati durante il bootstrapping della Random Forest. Vengono quindi utilizzati dati non presi per l'addestramento.

Tuttavia, le previsioni sui dati oob potrebbero risultare leggermente ottimistiche rispetto a quelle effettuate su un validation set o un test set ma saranno comunque utili per paragonare i vari risultati ottenuti.

```
In [ ]: # calcolo punteggi
        R2_score = round(
            r2_score(y_test, y_pred_bl),
        MAPE score = round(
            mean_absolute_percentage_error(y_test, y_pred_bl),
        R2 train score = round(
            r2_score(y_train, y_pred_train_bl),
        MAPE train score = round(
            mean_absolute_percentage_error(y_train, y_pred_train_bl),
        R2_00B_score = round(
            baseline_model.oob_score_,
        )
        # stampo risultati
        print(f"R2 train: {R2_train_score}")
print(f"R2 test: {R2_score}")
        print("")
        print(f"MAPE train: {MAPE_train_score}")
        print(f"MAPE test: {MAPE_score}")
        print("")
        print(f"R2 OOB: {R2 OOB score}")
        R2 train: 0.92
        R2 test: 0.437
        MAPE train: 0.149
        MAPE test: 0.389
```

Gli iperparametri predefiniti non permettono al modello di prevedere correttamente l'anadmento dei dati.

I punteggi di R2 e MAPE ottenuti indicano un relativamente basso bias ma una alta varianza --> OVERFITTING

Processing dati

0.424

R2 OOB:

vado a "pulire" i dati andando a risolvere le problematiche evidenziate nella fase di analisi esplorativa.

Eseguo tutte le operazioni di pulizia dei dati solamente sul train set in modo da non corrompere in test set.

Outliers imputation

Vado a sostituire gli outliers in modo da lavorare con dati più puliti.

Vista la scarsa dimensionalità del dataset non rimuovo i campioni con outliers ma vado a sostituire i singoli dati con la mediana della colonna.

Vado ad eseguire la sostituzione degli outliers solo nel set di addestramento per non corrompere il set di test.

```
In []: # creo una series di appoggio
        index series = pd.Series(
            [],
            dtype="float64"
        )
        # creo una copia del dataset
        X train 2 = X train.copy()
        # itero sia sulle colonne che sulle righe per accedere ai dati
        for column in X train.columns:
            for i, n in enumerate(X train[column]):
                # identifico i margini in cui accettare i dati
                q1 = X_train[column].quantile(0.25) # primo quartile
                q3 = X_train[column].quantile(0.75) # terzo quartile
                iqr = q3 - q1
                lower tail = q1 - 1.5 * iqr # limite inferiore
                upper tail = q3 + 1.5 * iqr # limite superiore
                # se identifico un outlier
                if n > upper tail or n < lower tail:</pre>
                    # aggiungo l'indice alla serie
                    index_series = pd.concat([index_series, pd.Series(i)])
                    # sostituisco il valore con la mediana
                    X train 2[column] = X train 2[column].replace(
                        np.median(X train 2[column])
                    )
```

Ricreo un boxplot delle features per verificare che la modifica sia andata a buon fine

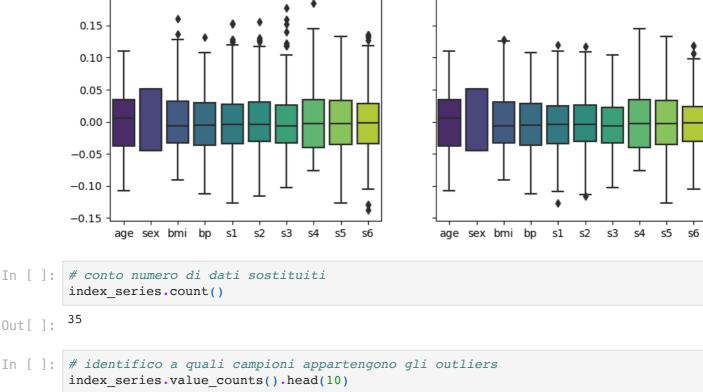
```
In []:
        # imposto il grafico
        fig, axs = plt.subplots(
            ncols=2,
            figsize=(10,4),
            sharey=True
        # creo i boxplot delle features
        sns.boxplot(
            data=X train,
            palette="viridis",
            ax = axs[0]
        axs[0].set title("X train")
        sns.boxplot(
            data=X train 2,
            palette="viridis",
            ax = axs[1]
        axs[1].set title("X train 2")
```

```
Text(0.5, 1.0, 'X_train_2')
Out[]:
```

0.20

Out[]:

X train



X train 2

```
174
                  3
Out[]:
          129
                  2
          163
                  2
          209
                  2
          242
                  2
          138
                  1
          161
                  1
          333
          97
                  1
          111
                  1
          dtype: int64
```

In totale sono stati sostituiti 35 valori risultati outliers che, su un totale di 3530 dati (353 samples x 10 features) rappresentano lo 0,99% dei dati totali.

I dati sostituiti raramente appartengono allo stesso campione. Solo un campione ha 3 dati sostituiti. Non è quindi necessario rimuovere campioni in quanto rimangono dati a sufficienza per rendere i campioni consistenti.

Addestramento modello

```
In [ ]: # creo una copia del modello da riaddestrare
        bl model 2 = copy.deepcopy(baseline model)
        # addestro il baseline model sul training set
        bl model 2.fit(X train 2, y train)
Out[]:
                          RandomForestRegressor
        RandomForestRegressor(oob_score=True, random_state=17)
In []:
       # predico test e train
```

y_pred_bl_2 = bl_model_2.predict(X_test) # predizione test

```
y_pred_train_bl_2 = bl_model_2.predict(X_train_2) # predizione train
```

```
In [ ]: # calcolo punteggi
        R2 score 2 = round(
            r2_score(y_test, y_pred_bl_2),
        MAPE_score_2 = round(
            mean_absolute_percentage_error(y_test, y_pred_bl_2),
        R2 train score 2 = round(
            r2 score(y train, y pred train bl 2),
        MAPE_train_score_2 = round(
            mean_absolute_percentage_error(y_train, y_pred_train_bl_2),
        R2_{OOB}_{score_2} = round(
            bl model 2.oob score,
         )
        # stampo risultati
        print(f"R2 train: {R2_train_score_2}")
print(f"R2 test: {R2_score_2}")
        print("")
        print(f"MAPE train: {MAPE_train_score_2}")
        print(f"MAPE test: {MAPE score 2}")
        print("")
        print(f"R2 OOB:
                             {R2 00B score 2}")
        R2 train: 0.919
        R2 test:
                     0.408
        MAPE train: 0.148
        MAPE test: 0.405
```

I punteggi sono leggermente peggiori rispetto a prima.

Probabilmente in questo caso gli outliers portano informazioni utili alla previsione del target.

Mantengo per ora il dataset originale "X_train"

Data Augmentation

0.42

R2 OOB:

Aumento artificialmente i campioni con valore di "sex" positivo (sex_pos) in modo da bilanciare le classi.

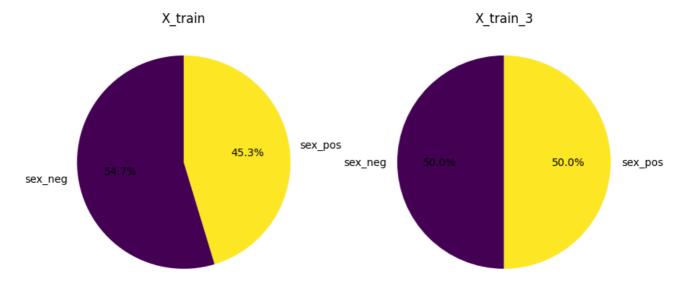
Uso la funzione resample di sklearn per bilanciare la classe "sex". La funzione mi permette di eseguire il bootstrap del dataset, ovvero di ottenere n campioni casuali presi con sostituzione. Prendo i campioni della classe meno rappresentata (sex_pos) in modo da poter pareggiare il numero di campioni appertenete alle due classi.

Prima di tutto unisco X_train e y_train in un unico dataset in modo da aumentare i campioni sia in X che in y in una volta sola

```
diabetes_train = pd.concat(
             [X_train, y_train],
             axis=1
        diabetes_train.sample()
Out[]:
                    sex
                          bmi
                                  bp
                                         s1
                                               s2
                                                     s3
                                                            s4
                                                                   s5
                                                                         s6 target
             age
        1 -0.002 -0.045 -0.051 -0.026 -0.008 -0.019 0.074 -0.039 -0.068 -0.092 75.000
        Conto i campioni con sex_neg e sex_pos nel dataset diabetes_train
In []: # conto campioni sex pos
        new_sex_pos = diabetes_train.loc[
             diabetes_train["sex"] > 0,
             "sex"
         ].count()
        print("campioni sex_pos: ", new_sex_pos)
        campioni sex pos: 160
In [ ]: # conto campioni sex_neg
        new_sex_neg = diabetes_train.loc[
             diabetes_train["sex"] < 0,</pre>
         ].count()
        print("campioni sex_neg: ", new_sex_neg)
        campioni sex neg: 193
In [ ]: # calcolo di quanto aumentare la classe sex_pos
        n_samples = abs(
             diabetes_train["sex"].value_counts().values[0] -
             diabetes_train["sex"].value_counts().values[1]
         # aggiungo i campioni mancanti
        X train boot = resample(
            diabetes_train.loc[diabetes_train["sex"] > 0],
            n samples=n samples,
            replace=True,
            random_state=17
         # unisco i campioni al dataset e resetto gli indici
        diabetes_train_aug = pd.concat([diabetes_train, X_train_boot]
                                    ).reset index(drop=True)
        Riconto i campioni con sex_neg e con sex_pos dopo la ricampionatura
In [ ]: # conto campioni sex_pos
        new_sex_pos = diabetes_train_aug.loc[
            diabetes train aug["sex"] > 0,
             "sex"
         ].count()
        print("campioni sex_pos: ", new_sex_pos)
        campioni sex pos: 193
In []: # conto campioni sex neg
        new_sex_neg = diabetes_train_aug.loc[
             diabetes_train_aug["sex"] < 0,</pre>
             "sex"
```

In []: # unisco X_train e y_train

```
].count()
        print("campioni sex_neg: ", new_sex_neg)
        campioni sex neg: 193
In [ ]: # numero dei campioni totali
        diabetes_train.shape
Out[]: (353, 11)
        divido nuovamente il dataset in X e y
In [ ]: X train 3 = diabetes train aug.drop(columns="target")
        y_train_3 = diabetes_train_aug["target"]
        Rappresento graficamente con un grafico a torta
In []:
        # dati per il grafico a torta
        labels = ["sex_neg", "sex_pos"]
         sizes old = [
            X_train["sex"].value_counts().values[0],
            X train["sex"].value counts().values[1],
        sizes_new = [new_sex_neg, new_sex_pos]
        # impostografico a torta
        fig, axs = plt.subplots(
            ncols=2,
            figsize=(10, 5)
        # titolo
        plt.suptitle("percentuale feature sex")
         # imposto grafico X_train_2
        axs[0].pie(
            sizes old,
            labels=labels,
            colors=(colors[0], colors[10]),
            autopct="%1.1f%%",
            startangle=90,
        axs[0].set_title("X_train")
         # imposto grafico X train 3
        axs[1].pie(
            sizes_new,
            labels=labels,
            colors=(colors[0], colors[10]),
            autopct="%1.1f%%",
            startangle=90,
        axs[1].set title("X train 3")
        Text(0.5, 1.0, 'X train 3')
```



Il numero dei campioni totali è aumentato da 353 a 386.

Nel nuovo dataset "X_train_3" i sessi sono rapresentati ugualmente (193 campioni per ogni sesso)

Addestramento modello

```
# stampo risultati
print(f"R2 train: {R2_train_score_3}")
print(f"R2 test: {R2_score_3}")
print("")
print(f"MAPE train: {MAPE_train_score_3}")
print(f"MAPE test: {MAPE_score_3}")
print("")
print(f"R2 OOB: {R2_OOB_score_3}")
R2 train: 0.931
R2 test: 0.426
MAPE train: 0.135
```

MAPE test: 0.387

1.2 0021

I punteggi sono leggermente peggiorati rispetto al primo addestramento.

(L'oob_score è migliorato ma in questo caso ha molta meno rilevanza rispetto ai punteggi ottenuti sul set di test.)

Probabilmente visto il basso numero di campioni aggiunti ed il poco sbilanciamento della features "sex" il peggioramento delle prestazioni del modello è dovuto al caso. Potrebbe inoltre esserche che la data augmentation modifichi leggermente la distribuzione del dataset e di conseguenza la capacità del modello di addestrarsi correttamente.

Mantengo il dataset originale "X_train" e "y_train"

Gestione Multicollinearità

Dalla tabella delle correlazioni creata durante l'analisi esplorativa si nota che le features "s1" ed "s2" sono molto correlata tra loro.

Provo ad eliminarne una delle due per evitare il rischio di multicollinearità e provare ad aumentare l'efficienza del modello.

```
In []: # ottengo l'importanza delle features
    for i, col in enumerate(X_train.columns):
        print(col, round(baseline_model.feature_importances_[i], 3))

age 0.057
    sex 0.02
    bmi 0.23
    bp 0.099
    s1 0.043
    s2 0.05
    s3 0.047
    s4 0.02
    s5 0.371
    s6 0.062
```

s1 sembra leggermente meno rilevante per il modello rispetto ad s2.

Provo ad eliminare s1 e osservo se ci sono miglioramenti nell'addestramento.

Elimino s1 anche dal set test.

```
X_train_4.sample()
                                                     s4
                                         s2
                                               s3
Out[]:
                                  bp
                                                            s5
                                                                  s6
              age
                     sex
                           bmi
        297 0.002 -0.045 -0.008 -0.064 -0.024 0.004 -0.039 -0.065 -0.055
In [ ]: X test 4 = X test.drop(columns="s1")
        X_test_4.sample()
                          bmi
                                        s2
                                               s3
                                                      s4
                                                            s5
                                                                  s6
Out[]:
               age
                                  bp
                    sex
        133 -0.042 0.051 -0.054 -0.040 -0.072 -0.003 -0.039 -0.072 -0.030
        Addestramento modello
In []: # creo una copia del modello baseline model
        bl model 4 = copy.deepcopy(baseline model)
        # addestro il baseline model sul training set
        bl_model_4.fit(X_train_4, y_train)
Out[]: ▼
                          RandomForestRegressor
        RandomForestRegressor(oob_score=True, random_state=17)
In [ ]:
       # predico test e train
        y pred bl 4 = bl model 4.predict(X test 4) # predizione test
        y_pred_train_bl_4 = bl_model_4.predict(X_train_4) # predizione train
In [ ]: # calcolo punteggi
        R2 score 4 = round(
            r2_score(y_test, y_pred_bl_4),
        MAPE score 4 = round(
            mean_absolute_percentage_error(y_test, y_pred_bl_4),
        R2 train score 4 = round(
            r2_score(y_train, y_pred_train_bl_4),
            3
        MAPE train score 4 = round(
            mean absolute percentage error(y train, y pred train bl 4),
        R2 OOB score 4 = round(
            bl model 4.oob score,
        )
        # stampo risultati
        print(f"R2 train: {R2_train_score_4}")
        print(f"R2 test:
                            {R2_score_4}")
        print("")
        print(f"MAPE train: {MAPE train score 4}")
        print(f"MAPE test: {MAPE_score_4}")
        print("")
        print(f"R2 OOB:
                            {R2 00B score 4}")
```

In []: X train 4 = X train.drop(columns="s1")

```
R2 train: 0.92
R2 test: 0.434
```

MAPE train: 0.15
MAPE test: 0.386

R2 OOB: 0.423

I risultati, anche se di poco, sono leggermente peggiorati eliminando "s1" dal dataset.

Probabilmente "s1" apporta informazioni utili per l'apprendimento del modello nonostante la forte correlazione con "s2".

Mantengo il dataset originale X_train, y_train, X_test, y_test.

Conclusioni processing dati

I tentativi di pulizia e miglioramento dei dati non hanno portato al miglioramento del modello.

Probabilmente questo è dovuto alla bassa dimensionalità del dataset ed alla qualità dei dati.

La pulizia dei dati va inevitabilmente a modificare, anche se in piccola parte, le informazioni contenenti nel dataset. Informazioni che, con questi dati, sono fondamentali per l'apprendimento ottimale del modello.

Mantengo quindi il dataset originale:

X_train,

X_test,

y_train,

y_test

Ottimizzazione iperparametri

Vado ad ottimizzare gli iperparametri del modello facendo cross validation.

definisco i range di dati per ogni iperparametro in base alle problematiche riscontrate fin'ora.

Cerco di ridurre l'overfitting e migliorare le prestazioni del modello.

Scelgo i seguenti iperparametri da validare:

- **n_estimator:** il numero di alberi della foresta. Aumentando il numero di alberi potrebbe ridursi anche l'overfitting.
- max_features: il numero di features usate per ogni albero. Riducendo il numero potrebbe diminuire l'overfitting.
- max_depth: la profondità massima dell'albero. Anche in questo caso ridure la profondità potrebbe migliorare il risultato.
- min_sample_split: il numero minimo di campioni richiesti per dividere un nodo dell'albero. In questo caso aumentare il valore potrebbe migliorare il risultato.
- min_samples_leaf: il numero minimo di campioni per ogni foglia. Anche in questo caso, incrementare questo valore potrebbe ridurre l'overfitting.
- max_samples: il numero massimo di campioni utilizzati per addestrare gli alberi. Modificare questo parametro potrebbe migliorare l'efficienza numerica del modello.

Trovo la profondità che ha raggiunto il modello con il primo fit in modo da ridurne la profondità

```
In []: # determino la profondità massima raggiunta
    max_depths = [estimator.tree_.max_depth for estimator in baseline_model.estimators_
    print(max(max_depths))
19
```

Cross Validation

Imposto gli iperparametri scelti in modo da ridurre l'overfitting e migliorare l'apprendimento del modello sui dati di test.

Utilizzo una RandomSearchCV in modo da testare diverse configurazioni di iperparametri.

Utilizzo R2 come metrica per valutare quali parametri ottengono migliori risultati in quanto è un'ottimo indicatore della varianza (varianza troppo alta è il principale problema attualmente).

Calcolo anche il oob_score in modo da poter confrontare i risultati con baseline_model.

Provo 100 iterazioni del modello per i 5 fold della cross validation (500 tentativi totali).

```
In [ ]: # definisco il modello
        cv model 1 = RandomForestRegressor(
            random_state=17,
            n jobs=-1,
            criterion="squared error",
            bootstrap=True,
            oob score=True,
            verbose=0
         )
        # creo lo spazio di validazione degli iperparametri
        random_space_1 = {
             # valore predefinito = 100, cerco valori superiori
            "n estimators": np.arange(
                100.
                1000
            # valore predefinito = 1.0 ovvero tutte le features, considero meno feature per
             "max_features": [
                0.2,
                0.4,
                 0.6,
                 0.8,
                 1.0
             # valore predefinito = None, riduco la profondità
             "max_depth": np.arange(
                5,
             # valore predefinito = 2, cerco valori superiori
             "min samples split": [
                2,
                 4,
                 6,
                 8,
                 10
             # valore predefinito = 1, cerco valori superiori
```

```
"min_samples_leaf": [
        1,
        3,
        5,
        7,
        9
    # valore predefinito = None, cerco valori tra 0 e 1.
    "max_samples":[
        0.2,
        0.4,
        0.6,
        0.8,
        1.0
    ]
}
# definisco la ricerca casuale
search 1 = RandomizedSearchCV(
   estimator=cv model 1,
   param distributions=random space 1,
   n_iter=100, # numero di iterazioni
   n jobs=-1,
   cv=5, # cross validation su 5 fold
   return train score=True,
   random state=17,
   scoring="r2",
   refit=True,
   verbose=1,
   error score='raise'
# addestro
cv_result_1 = search_1.fit(X_train, y_train)
# salvo il miglior modello
cv_model_1 = cv_result_1.best_estimator_
```

Fitting 5 folds for each of 100 candidates, totalling 500 fits ottengo le informazioni utili sul modello che ha ottenuto il miglior punteggio r2

```
In [ ]: # migliori parametri
        params_1 = cv_result_1.best_params_
        # indice del risultato migliore
        index_1 = cv_result_1.best_index_
        # miglior r2 score sui fold di test
        cv_test_r2_1 = round(
            cv result 1.cv results ["mean test score"][index 1],
        # media r2 sui fold di train
        cv train r2 1 = round(
            cv_result_1.cv_results_["mean_train_score"][index_1],
        # r2 sui dati oob
        oob r2 1 = round(
            cv model 1.oob score ,
        )
        # predico sul set di train per confrontare con bl model
        y_pred_train_1 = cv_model_1.predict(X_train)
```

```
# calcolo punteggi
R2_train_score_1 = round(
        r2_score(y_train, y_pred_train_1),
MAPE_train_score_1 = round(
        mean_absolute_percentage_error(y_train, y_pred_train_1),
)
#stampo a schermo
print(f"parametri: {params 1}")
print("")
print(f"miglior indice:
                                         {index 1}")
print(f"media di r2 sui fold di train: {cv_train_r2_1}")
print(f"media di r2 sui fold di test:
                                        {cv test r2 1}")
print(f"r2 sui dati OOB:
                                         {oob r2 1}")
print(f"punteggio R2 sul set di train: {R2 train score 1}")
print(f"punteggio MAPE sul set di train: {MAPE train score 1}")
parametri: {'n estimators': 159, 'min samples split': 6, 'min samples leaf': 7, 'm
ax samples': 0.6, 'max features': 1.0, 'max depth': 10}
miglior indice:
                                 36
media di r2 sui fold di train:
                                 0.643
media di r2 sui fold di test:
                                 0.47
r2 sui dati OOB:
                                 0.459
punteggio R2 sul set di train:
                                 0.648
```

l'apprendimento del modello sembra essere migliorato leggermente rispetto al baseline_model.

I punteggi sul train set sono "migliorati", avvicinandosi ai valori cercati: (migliorati nel senso che si sono avvicinati ai risultati ottenuti nel test set, tecnicamente i punteggi sul train sono peggiorati)

- R2 è passato da 0.92 a 0.648
- MAPE è passato da 0.149 a 0.325

punteggio MAPE sul set di train: 0.325

Il punteggio oob è passato da 0.42 per baseline_model a 0.459 per cv_model_1.

Quindi, il modello, nonostante abbia peggiorato le proprie prestazioni sui dati di train, ha migliorato le prestazioni sui nuovi dati (oob in questo caso). Questo significa che si è ridotta la varianza del modello e si è ridotto l'overfitting.

Faccio un altro ciclo di cross validation modificando lo spazio di valori degli iperparametri in base ai migliori valori trovai.

```
"max_features": [
        0.8,
        0.9,
        1.01,
    "max_depth": [
        8,
        9,
        10,
        11,
        12],
    "min_samples_split": [
        5,
        6,
        7],
    "min_samples_leaf": [
        6,
        7,
        8],
    "max_samples":[
        0.5,
        0.6,
        0.7]
}
# definisco la ricerca casuale
search 2 = RandomizedSearchCV(
   estimator=cv model 2,
   param distributions=random space 2,
   n iter=50, # numero di iterazioni
   n jobs=-1,
    cv=5, # cross validation su 5 fold
   return train score=True,
   random_state=17,
   scoring="r2",
   refit=True,
    verbose=1,
    error_score='raise'
)
# addestro
cv_result_2 = search_2.fit(X_train, y_train)
# salvo il miglior modello
cv model 2 = cv result 2.best estimator
```

Fitting 5 folds for each of 50 candidates, totalling 250 fits

ottengo le informazioni utili sul modello che ha ottenuto il miglior punteggio r2

```
cv_model_2.oob_score_,
)
# predico sul set di train per confrontare con bl model
y_pred_train_2 = cv_model_2.predict(X_train)
# calcolo punteggi
R2 train score 2 = round(
        r2_score(y_train, y_pred_train_2),
MAPE_train_score_2 = round(
        mean_absolute_percentage_error(y_train, y_pred_train_2),
)
#stampo a schermo
print(f"parametri: {params 2}")
print("")
print(f"miglior indice:
                                         {index 2}")
print(f"media di r2 sui fold di train: {cv_train_r2_2}")
print(f"media di r2 sui fold di test:
                                         {cv test r2 2}")
print(f"r2 sui dati 00B:
                                         {oob r2 2}")
print(f"punteggio R2 sul set di train:
                                         {R2 train score 2}")
print(f"punteggio MAPE sul set di train: {MAPE train score 2}")
parametri: {'n estimators': 174, 'min samples split': 7, 'min samples leaf': 6, 'm
ax samples': 0.5, 'max features': 0.8, 'max depth': 11}
miglior indice:
media di r2 sui fold di train:
                                 0.637
media di r2 sui fold di test:
                                 0.476
r2 sui dati OOB:
                                 0.463
punteggio R2 sul set di train:
                                 0.64
punteggio MAPE sul set di train: 0.331
```

Il modello sembra essere igliorato leggermente:

- la media dei punteggi R2 sui fold di test è passata da 0.470 a 0.476
- la media dei punteggi R2 sui fold di train è passata da 0.643 a 0.637
- il punteggio R2 sul train set è passato da 0.648 a 0.640
- il punteggio MAPE sul train set è passato da 0.325 a 0.331
- il punteggio R2 sui dati oob è passato da 0.459 a 0.463

Sembrano tutti cambiamenti positivi, la varianza sembra essersi ridotta e la capacità del modello di generalizzare su dati non vista sembra essere migliorata.

Vado a verificare sul test set.

Il modello finale è il seguente:

```
oob_score=False,
n_jobs=-1,
random_state=17,
verbose=0,
max_samples=0.5,
)
```

Predizione test

inplace=True

y pred 3 = pd.Series(

```
In [ ]: # addestro il modello sul training set
        model_3.fit(X_train, y_train)
Out[]: ▼
                                     RandomForestRegressor
        RandomForestRegressor(max_depth=11, max_features=0.8, max_samples=0.5,
                                min_samples_leaf=6, min_samples_split=7, n_estimator
        s=174,
                                n_jobs=-1, random_state=17)
In [ ]: # predico test e train
        y pred 3 = model 3.predict(X test) # predizione test
        y pred train 3 = model 3.predict(X train) # predizione train
In [ ]: # calcolo punteggi
        R2 \text{ score } 3 = \text{round}(
            r2_score(y_test, y_pred_3),
        MAPE_score_3 = round(
            mean_absolute_percentage_error(y_test, y_pred_3),
        R2 train score 3 = round(
            r2 score(y train, y pred train 3),
        MAPE train score 3 = round(
            mean_absolute_percentage_error(y_train, y_pred_train_3),
        )
        # stampo risultati
        print(f"R2 train: {R2_train_score_3}")
        print(f"R2 test:
                            {R2_score_3}")
        print("")
        print(f"MAPE train: {MAPE train score 3}")
        print(f"MAPE test: {MAPE_score_3}")
        R2 train: 0.64
        R2 test:
                    0.466
        MAPE train: 0.331
        MAPE test: 0.378
        Analizzo anche graficamente i risultati
In [ ]: # sistemo ed unisco in un unico DF
        y test.reset index(
            drop=True,
```

```
y_pred_3,
    name="target_pred"
)

diabetes_test = pd.concat(
    [y_test, y_pred_3],
    axis=1,
    names=["target, target_pred"]
)

diabetes_test.head(5)
```

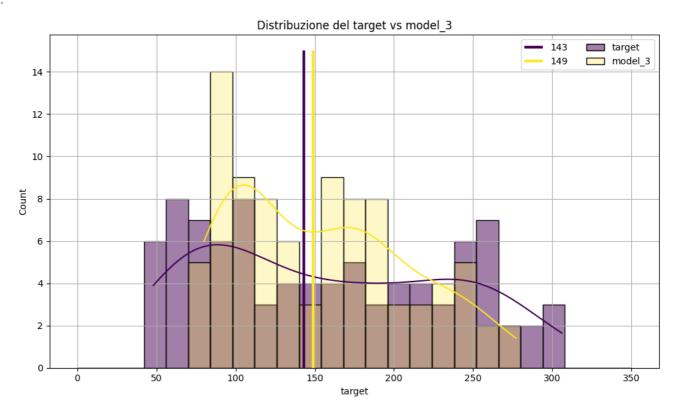
Out[]: target target_pred

```
0 143.000 188.636
1 192.000 215.360
2 108.000 97.236
3 129.000 96.341
4 170.000 118.300
```

```
In [ ]: # imposto il grafico delle distribuzioni
        plt.figure(figsize=(10, 6))
        plt.grid()
        # calcolo mediane
        median target = int(
            diabetes_test["target"].median()
        median target pred = int(
            diabetes_test["target_pred"].median()
        # grafico target
        sns.histplot(
            data=diabetes_test,
            x="target",
            color=colors[0],
            alpha=0.5,
            binwidth=14,
            binrange=(0, 350),
            kde=True,
            label="target",
        # mediana
        plt.vlines(
            x=median target,
            ymin=0,
            ymax=15,
            color=colors[0],
            linewidth=3,
            label=median target
        # grafico model
        sns.histplot(
            data=diabetes_test,
            x="target pred",
            color=colors[10],
            alpha=0.25,
            binwidth=14,
```

```
binrange=(0, 350),
    kde=True,
    label="model 3",
#mediana
plt.vlines(
    x=median_target_pred,
    ymin=0,
    ymax=15,
    color=colors[10],
    linewidth=3,
    label=median_target_pred,
)
# imposto titolo, layout e legenda
plt.title("Distribuzione del target vs model 3")
plt.tight layout()
plt.legend(ncol=2)
```

Out[]: <matplotlib.legend.Legend at 0x78704356ac80>



Conclusioni

I risultati ottenuti sembrano in linea con le aspettative, il punteggio R2 è leggermente peggiorato rispetto a quello ottenuto durante la cross validation (da 0.476 a 0.466) ma comunque non si discosta molto da quel valore. Questo perchè i punteggi ottenuti sui fold di test nella cross validation tendono ad essere leggermente ottimistici.

Il punteggio di R2 è leggermente aumentato rispetto all'addestramento con baseline model, da 0.447 a 0.466.

Il punteggio MAPE è migliorato rispetto all'addestramento con baseline model, da 0.389 a 0.378.

Il vero miglioramento è stata la riduzione del punteggio R2 e l'incremento di MAPE sul train set. R2 è passato da 0.92 a 0.64 e MAPE da 0.149 a 0.33. Questo indica che il modello è migliorato nel generalizzare su dati mai visti.

Si è ridotta la varianza del modello.

Il modello quindi riesce a spiegare circa il 47% della varianza del target ed ha un errore assoluto percentuale di circa il 38%.

Il grafico della distribuzione mostra che le predizioni sono più concentrate attorno al valore centrale rispetto ai dati reali, ma si può notare una certa somiglianza nella forma a "doppia gobba" della linea kde.

La mediana delle predizioni è 149, quella del target è di 143.

Non è una prestazione ottimale. Ipotizzo che la causa principale sia numero limitato di campioni del dataset.