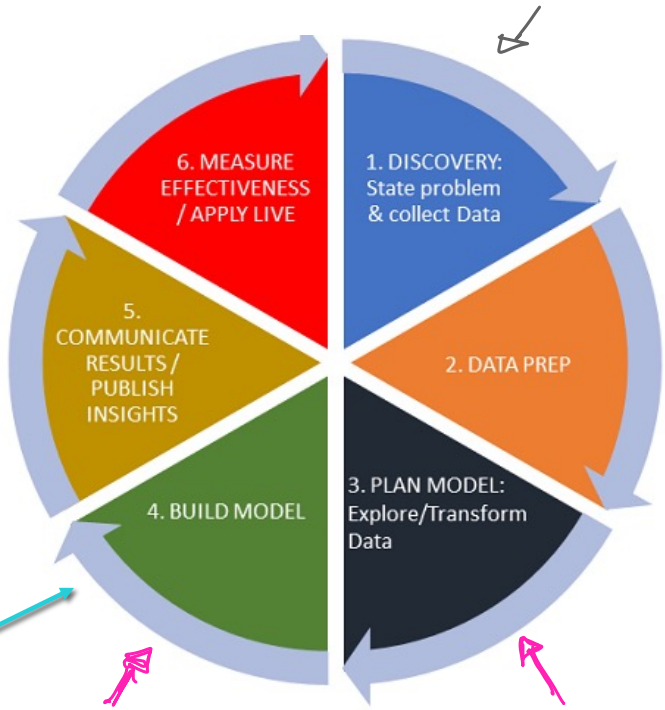
Machine learning: modelli e algoritmi

STATISTICA NUMERICA 2024-25

ELENA LOLI PICCOLOMINI

Data Science



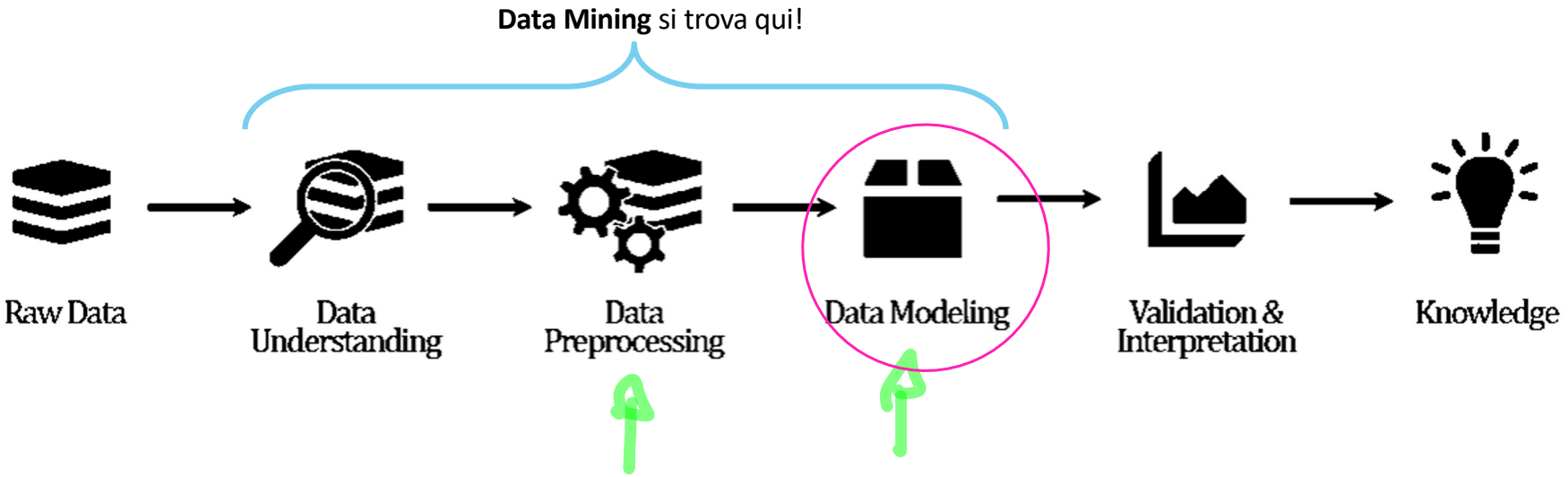
PREDITTIVA

MACHINE LEARNING ALGORITHMS

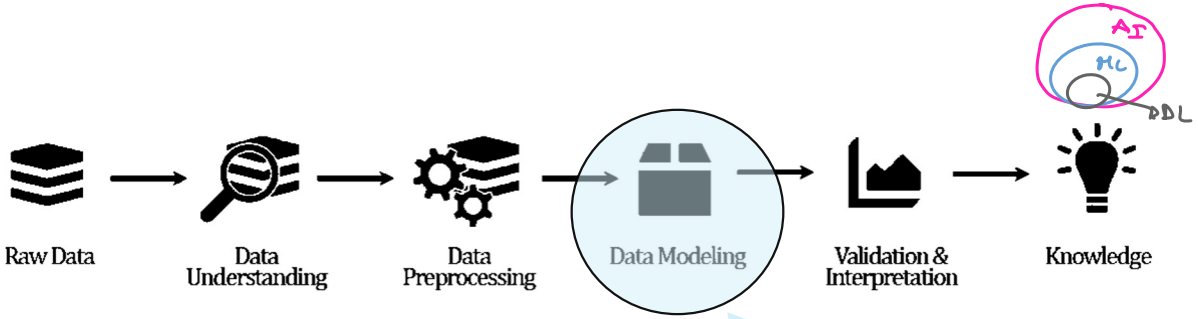
Data Science life cycle

L'AI richiede l'intelligenza umana

Il ciclo di vita della Data Science è lungo e articolato (questo è il *Knowledge Discovery process*, una visione tecnica del ciclo di vita della DS).



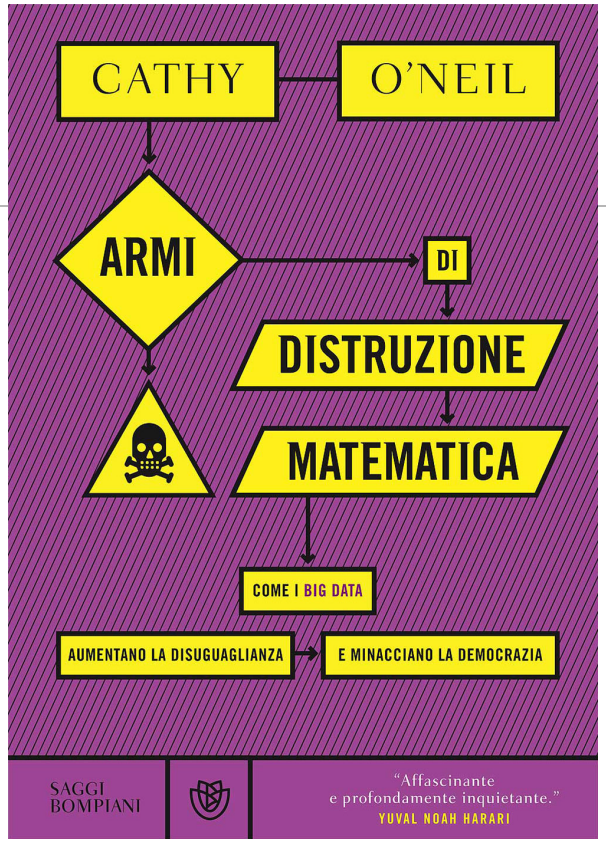
L'AI richiede l'intelligenza umana-bis



L'AI (in quanto ML e DL) si trova qui!

GIGO è il concetto che un'informazione errata, distorta o di scarsa qualità ("spazzatura" come input) produce un risultato di qualità simile ("spazzatura" come output).

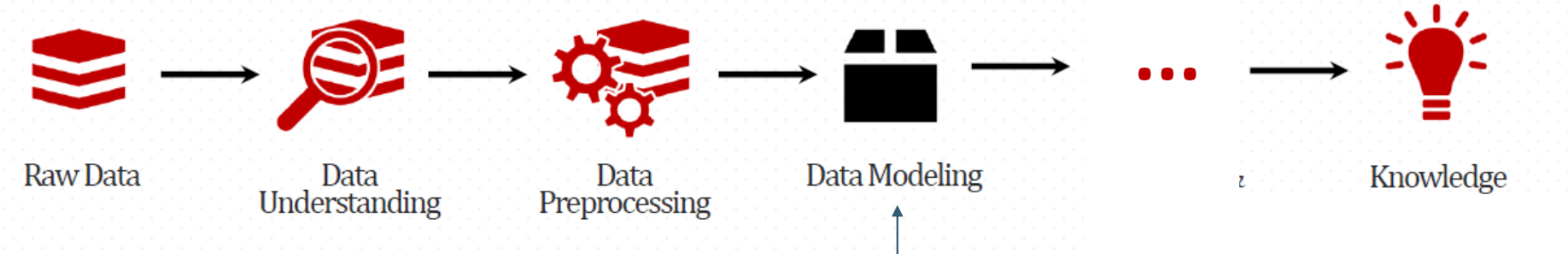
Alcune letture interessanti



"Weapons of Math Destruction: How Big Data Increases Inequality and Threatens Democracy", 2016

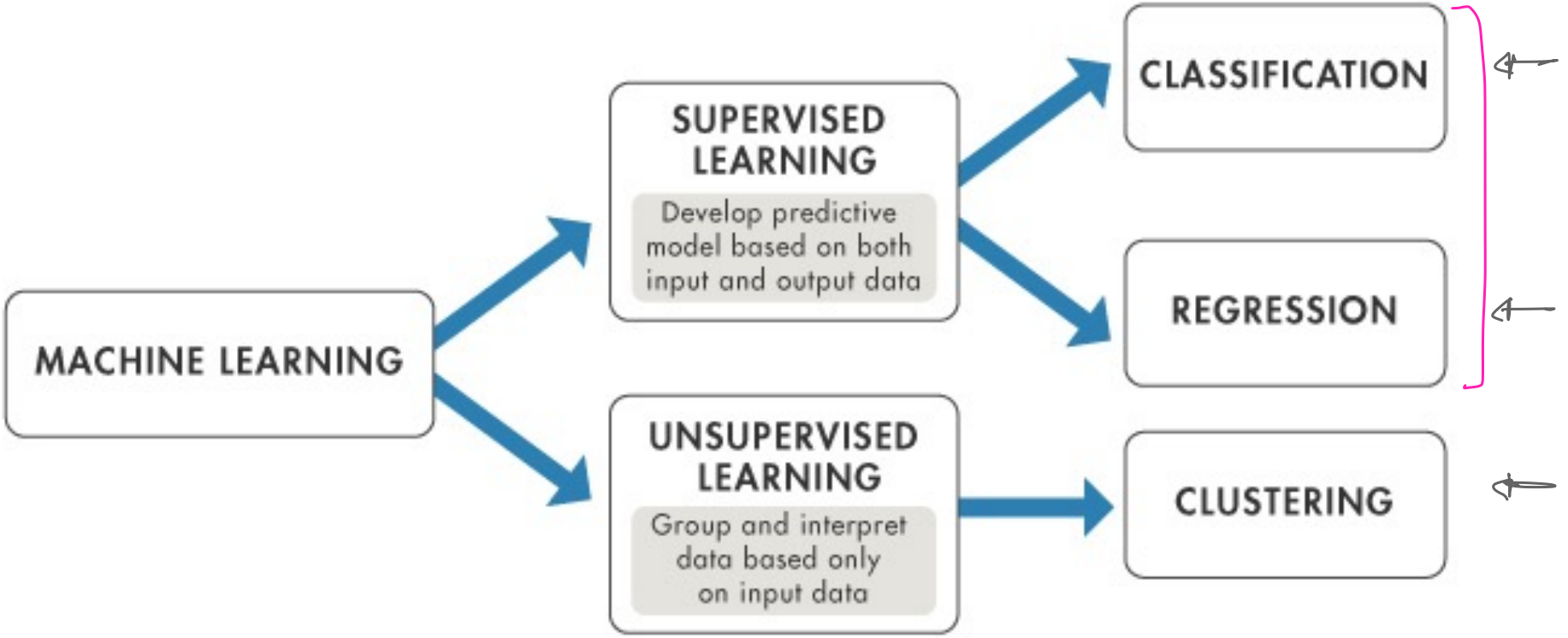
"How to Lie with Statistics", 1954

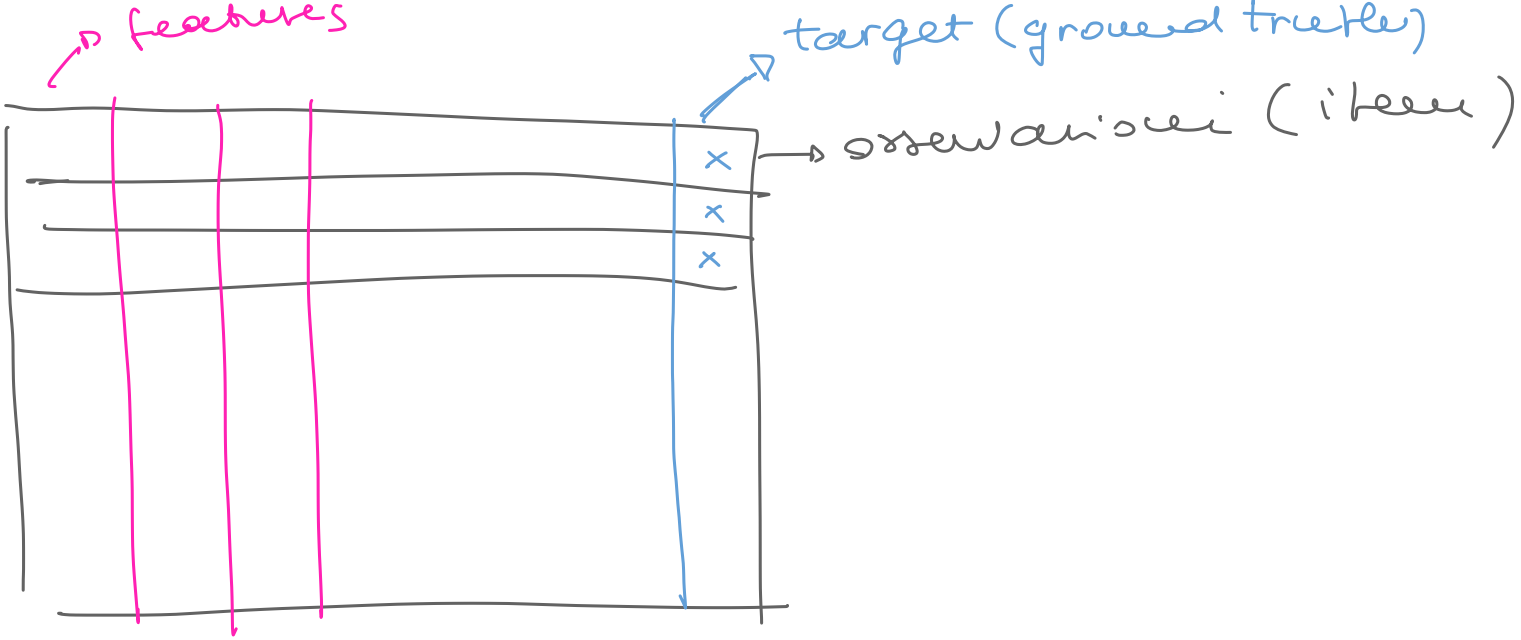
Processo per l'analisi dati



Data Modeling:
1. Classification
2. Clustering
3. Regression

Algoritmi di ML
(ovvero, per imparare dai dati disponibili)



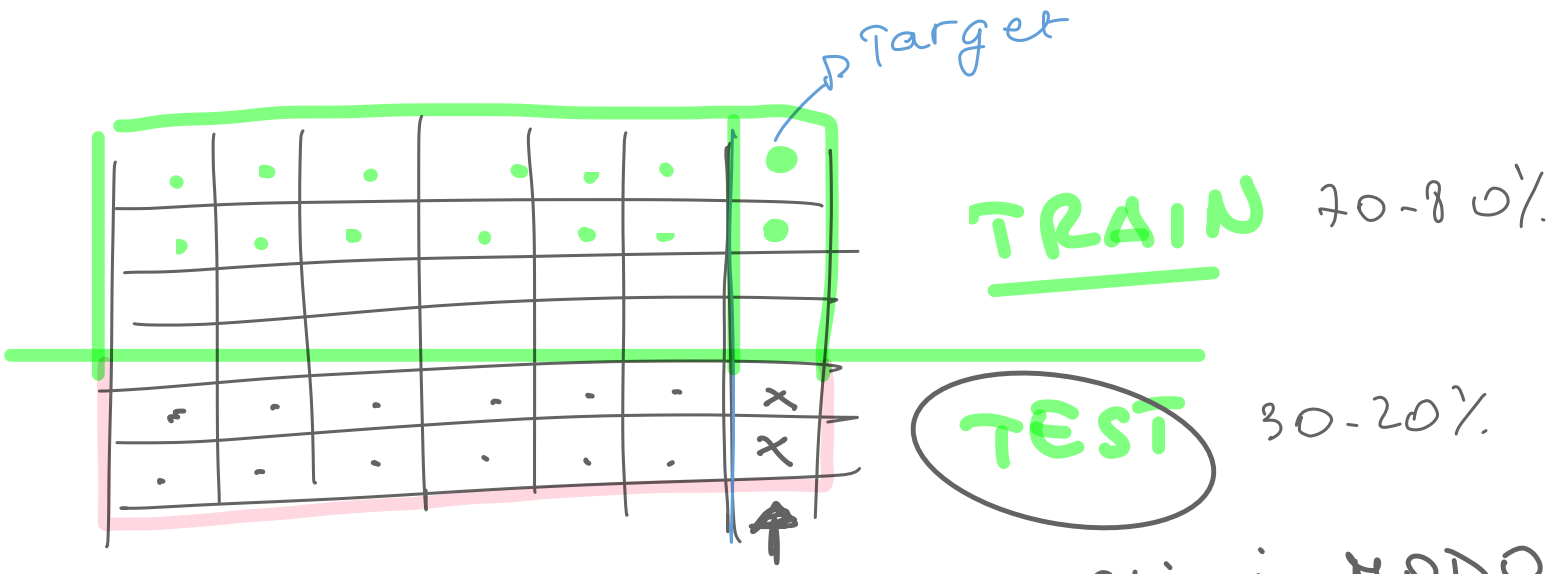


CLASSIFICAZIONE → TARGET
VARIABILE CATEGORICA

REGRESSIONE → TARGET
VARIABILE NUMERICA

Fasi di un algoritmo di Machine Learning supervisionato

1. Suddivisione dei dati in train e test (e validazione come vedremo in seguito)
2. Scelta del modello che dipende da un insieme di parametri θ
3. Identificazione dei parametri durante la fase di training (*imparando dai dati)* utilizzando i dati target (o **ground truth**)
4. Applicazione del modello con i parametri stimati ai dati di test per verificare, tramite misure di errore sempre utilizzando i dati target, l'efficacia del modello ottenuto.
5. Applicazione del modello a dati non apparteneti al data set di cui non ho la ground truth e per i quali quindi non posso stimare errore. GENERALIZZAZIONE

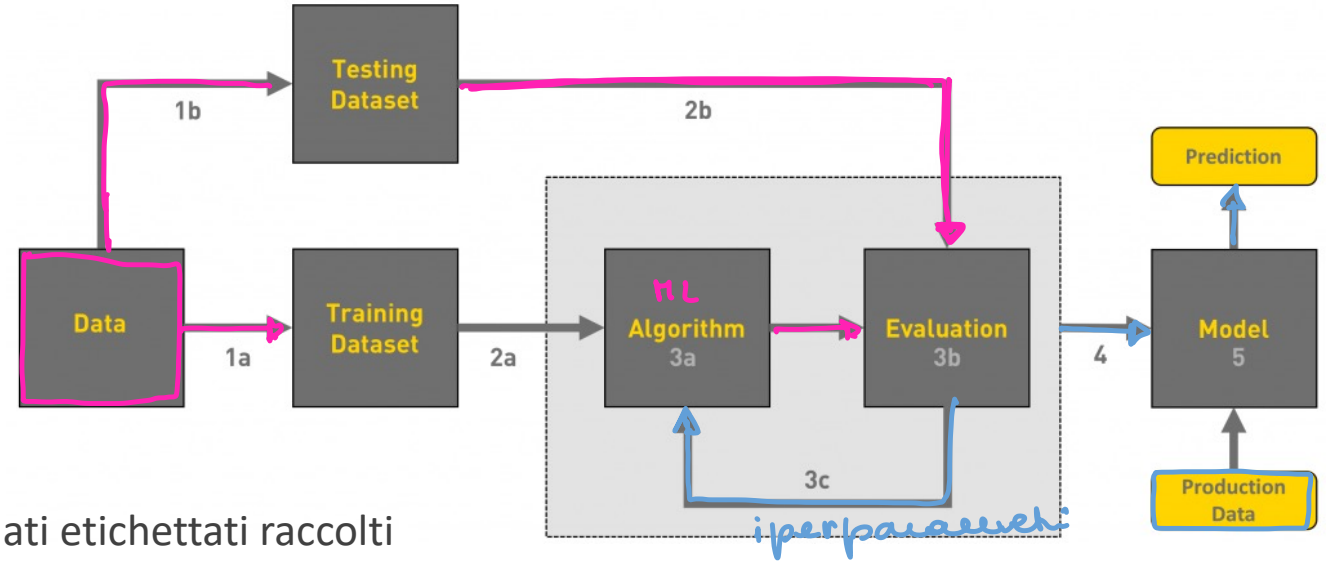


TRAIN e TEST sono scelti in modo

RANDOM

Divisione in «Train and Test»

Parte dei dati disponibili si usano per valutare le capacità predittive del classificatore.



Nei progetti di ML:

1) Si dividono i dati etichettati raccolti
2) Si addestra il classificatore sul sottoinsieme di *training*
3) Si usa il sottoinsieme di *testing* per il calcolo delle metriche di qualità

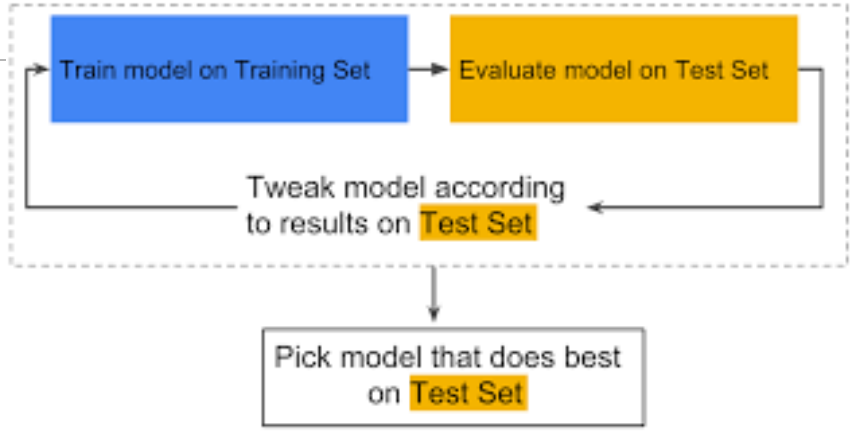
Divisione dei dati

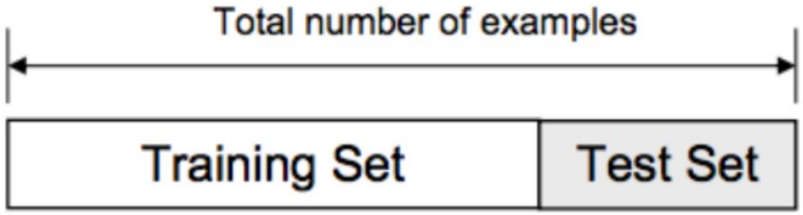
- **Training Set:**
  è il sottoinsieme di dati utilizzato per addestrare il modello di ML. Il modello osserva e apprende da questi dati e ottimizza i suoi parametri.

- **Test set:**
  è il campione di dati utilizzato per fornire una valutazione imparziale dell'adattamento del modello finale al set di dati di addestramento. Generalmente è utilizzato per valutare diversi modelli nelle competizioni.
  La fase di testing replica il tipo di situazione che si incontrerà una volta che il modello sarà distribuito per l'uso in tempo reale.

Tipicamente si divide con rapporto di training/testing dato da:

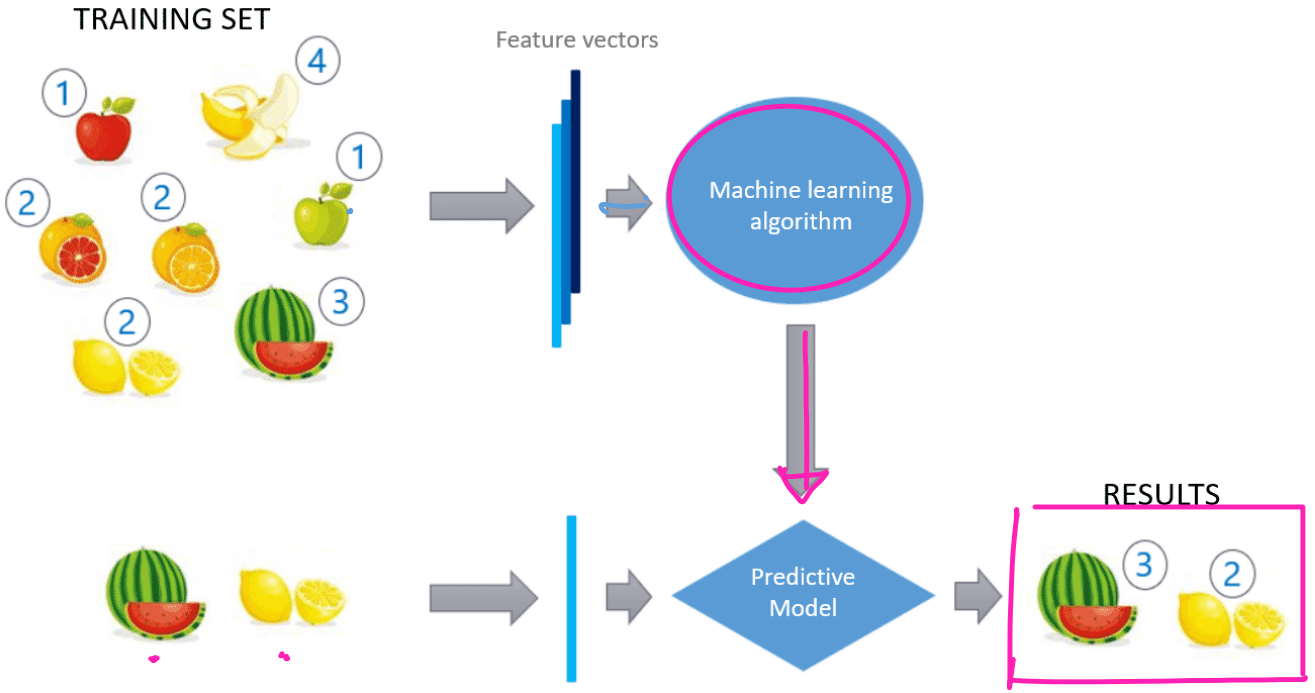
- 70/30 o 80/20 per dataset piccoli;
- 50/50 o 95/5 per dataset grandi.



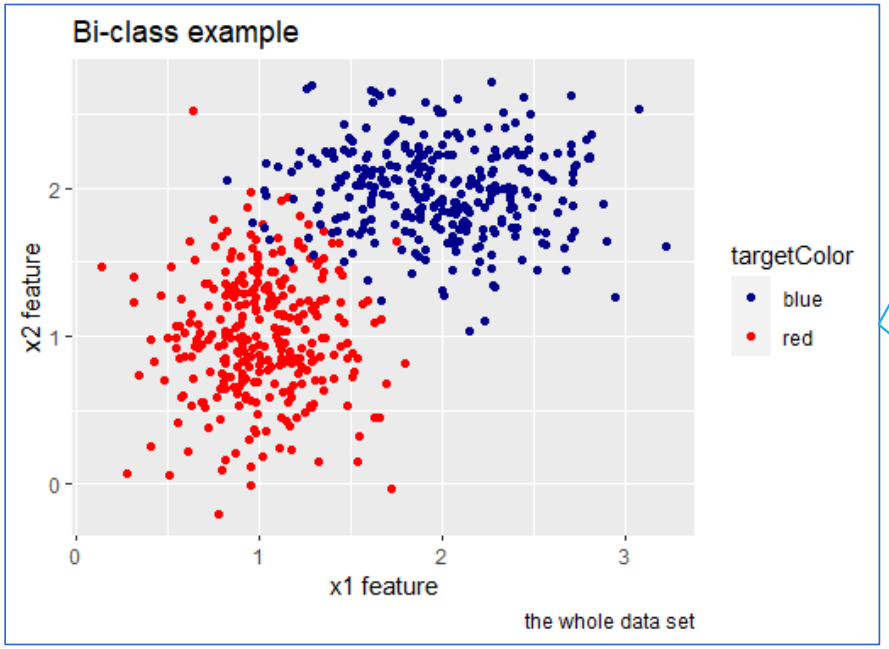


Classificazione

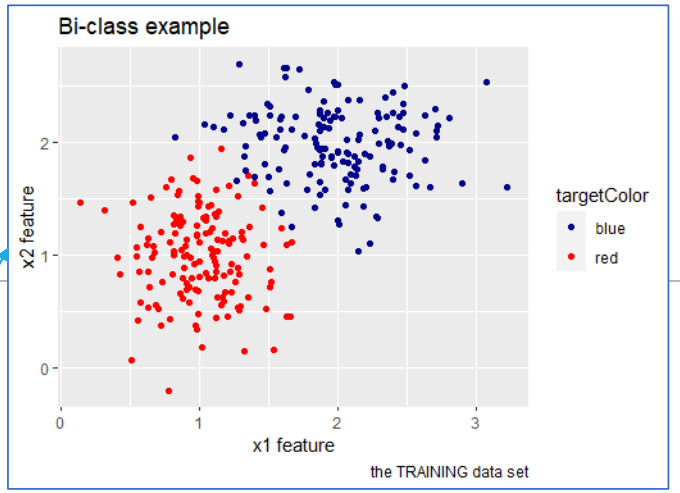
Con «classificazione» intendiamo un insieme di metodologie utilizzate per prevedere una variabile *categorica* di risposta da una o più variabili predittive



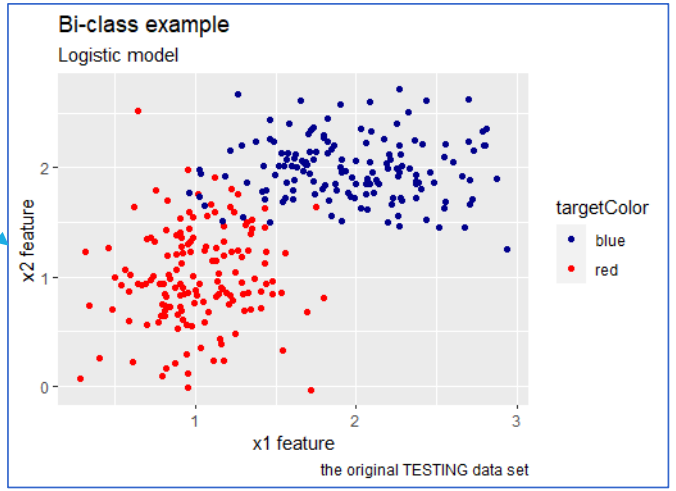
Occorre divider i sottoinsiemi mantenendo la rappresentatività delle classi da predire!




```
blue red
300 300
```



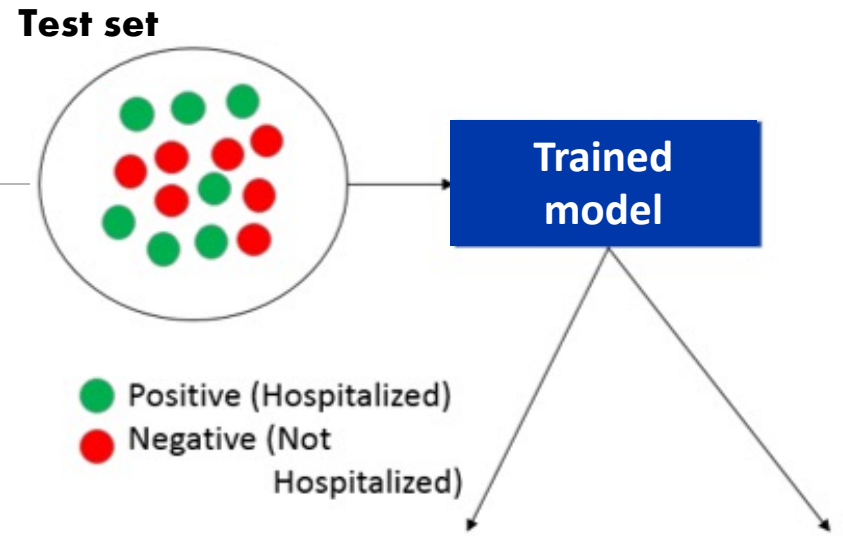

```
blue red
154 146
```




```
blue red
146 154
```

Esempio

	Actual POSITIVE (verde)	Actual NEGATIVE (rosso)	tot
Predicted POSITIVE (verde)	4	2	6
Predicted NEGATIVE (rosso)	3	5	8
tot	7	7	14



Abbiamo:

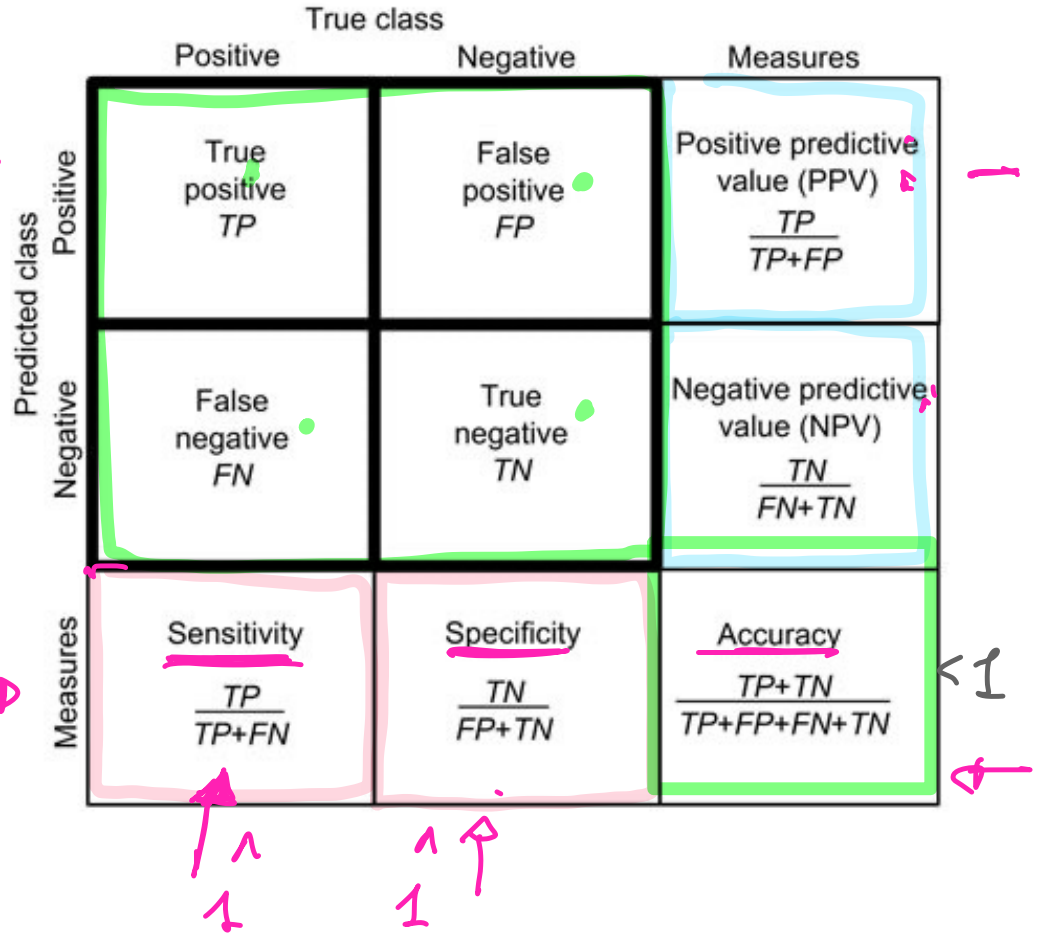
- 4 True Positive
- 5 True Negative
- 2 False Positive
- 3 False Negative

Terminologia derivata dalla matrice di confusione

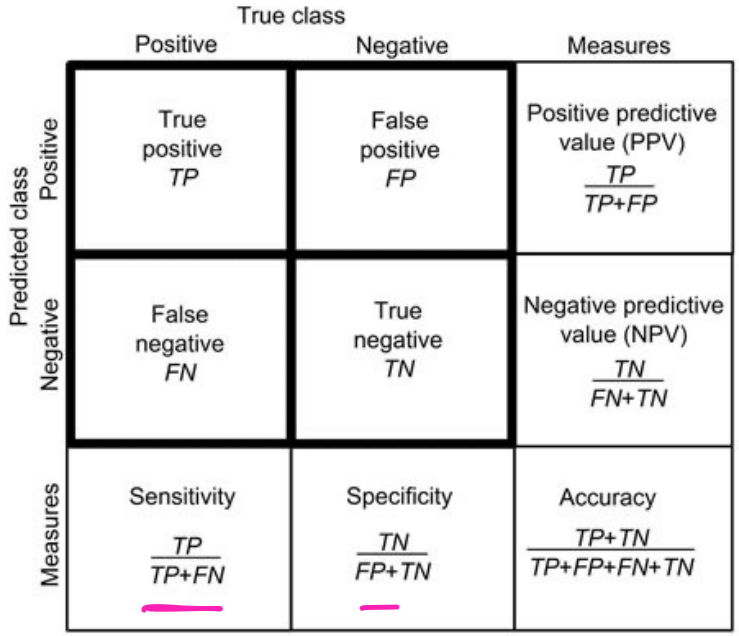
- **Accuratezza (ACC)**
  percentuale di predizioni corrette (positive e negative che siano), sul totale;
- **errore di misclassificazione**
  percentuale di errori, sul totale.

- **Sensitività, recall, hit rate, o true positive rate (TPR)**
  percentuale di casi positivi predetti correttamente;
- **Specificità, o true negative rate (TNR)**
  percentuale di casi negativi predetti correttamente.

- **Precisione, o positive predictive value (PPV)**
  percentuale di predizioni positive corrette;
- **Negative predictive value (NPV)**
  percentuale di predizioni negative corrette.



	Actual POSITIVE (verde)	Actual NEGATIVE (rosso)	tot
Predicted POSITIVE (verde)	4	2	6
Predicted NEGATIVE (rosso)	3	5	8
Tot	7	7	14



Aabbiamo:

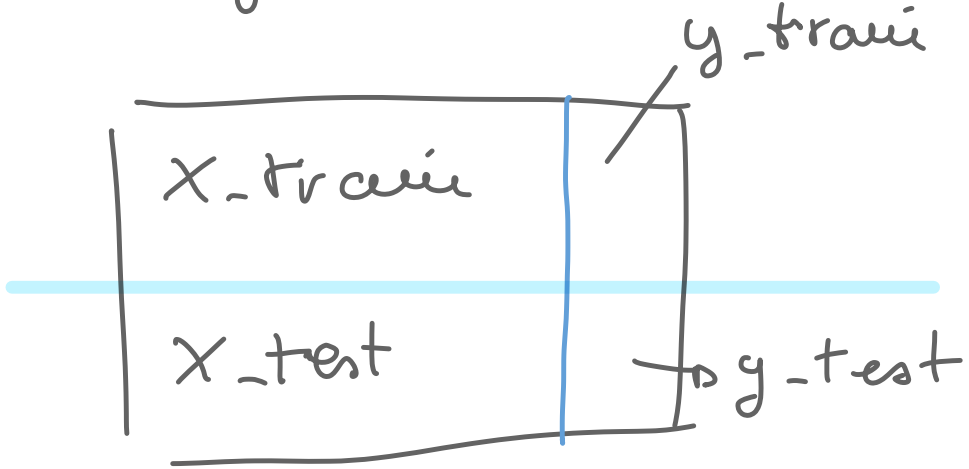
- 4 True Positive
- 5 True Negative
- 2 False Positive
- 3 False Negative

Quindi:

- Accuratezza = 64% (9/14 = 0,64)
- Misclassification Error = 36% (5/14 = 0,36)
- Sensitività = 57% (4/7 = 0,57)
- Specificità = 71% (5/7 = 0,71)
- Precisione = 66% (4/6 = 0,66)

- divido dataset : X (features)
  y (target)

- split
  - X_train (features train) (matrice)
  - y_train (target train) (array)
  - X_test (features test) (matrice)
  - y_test (features test) (array)



- addestramento (training set)

model . fit (X_train, y_train)

- predizione (test set)

y_pred = model . predict (X_test)

y_pred → array

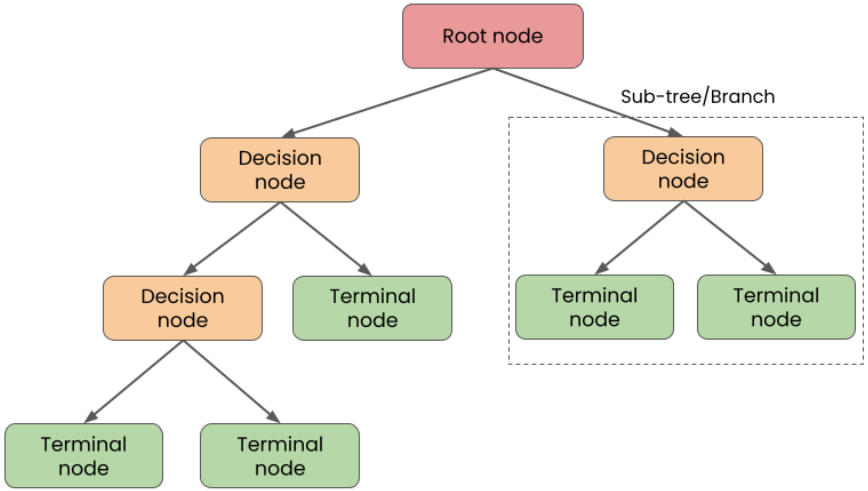
- valutazione con la matrice di confusione

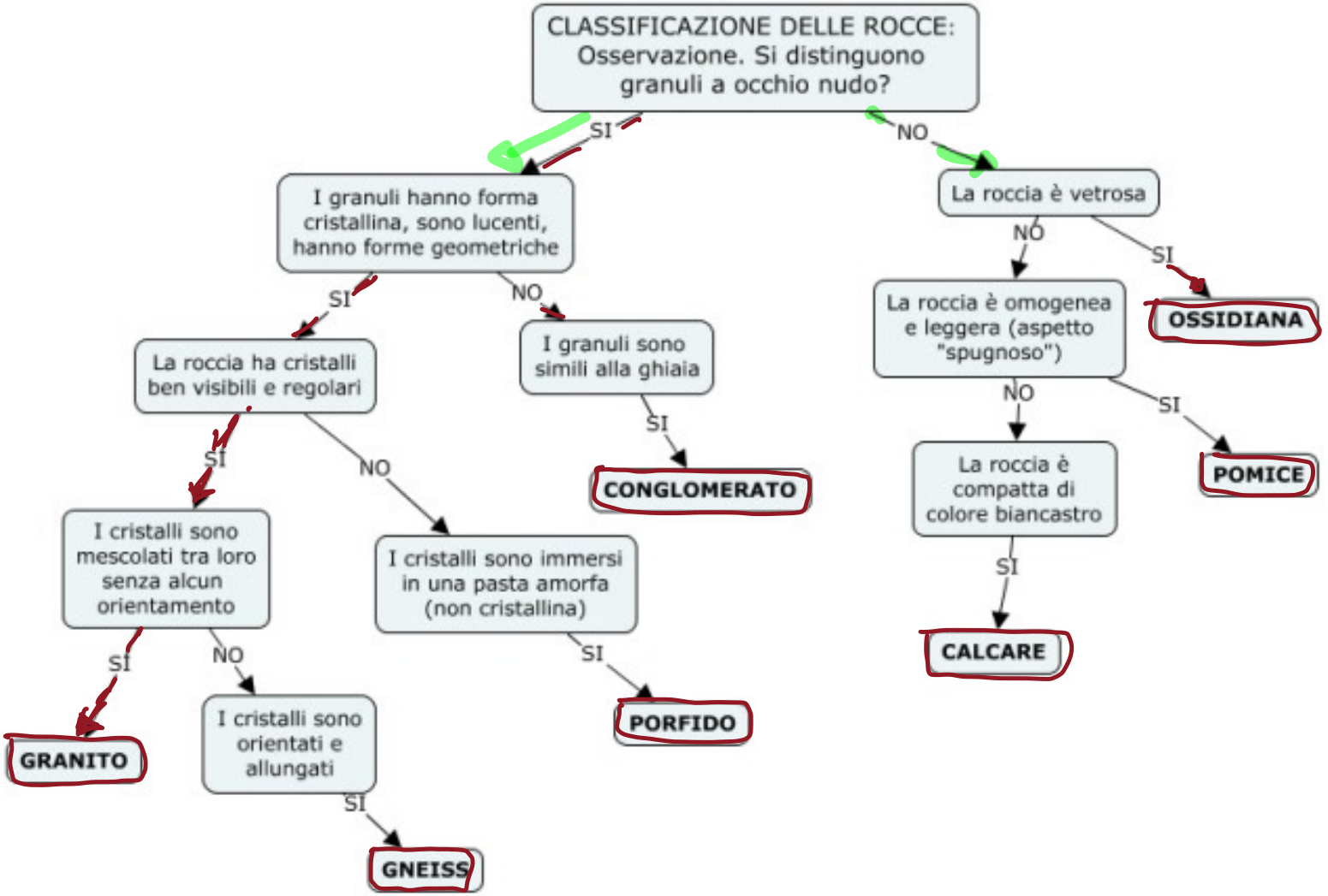
confusion_matrix (y_test, y_pred)

Albero decisionale come classificatore

Suddivide un set di dati in sottoinsiemi sempre più piccoli; allo stesso tempo l'albero cresce incrementalmente.
Il risultato finale è un albero con nodi decisionali e nodi terminali (foglie).

Il nodo più in alto (nodo radice) di un albero corrisponde all'intero set di dati.
Un nodo decisionale ha due o più rami e un nodo foglia rappresenta una classificazione o una decisione.

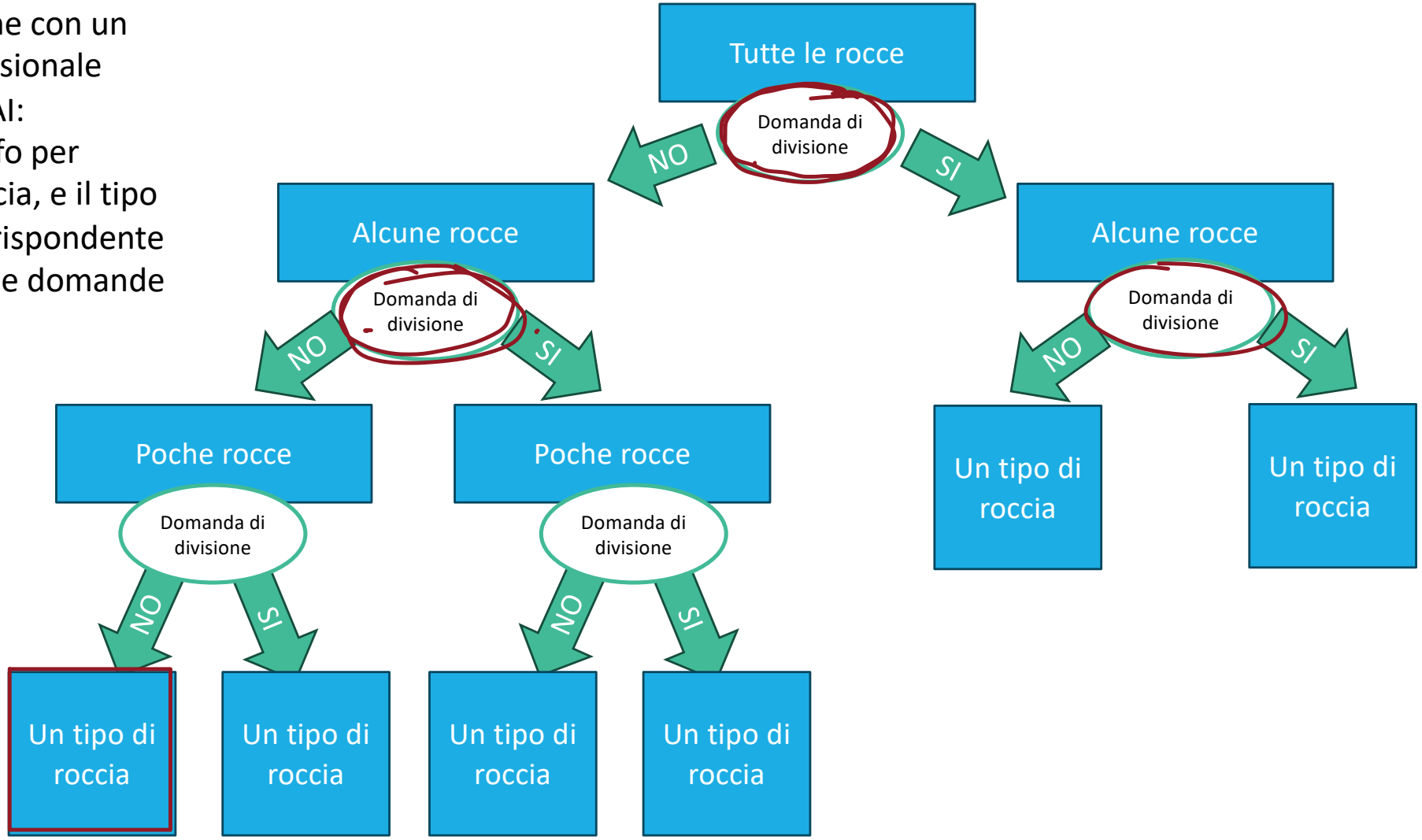


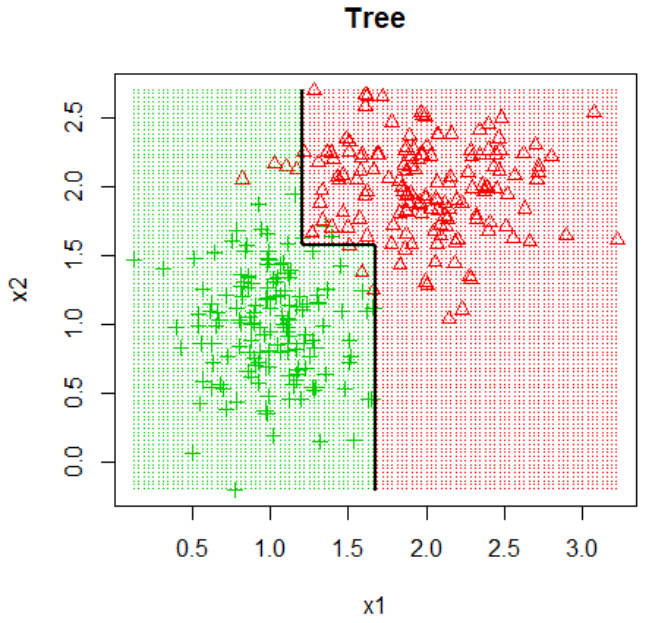


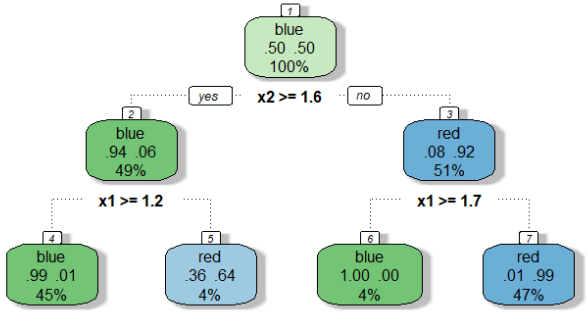
Classificazione con un albero decisionale …anche senza AI!

Classificazione con un albero decisionale per l'AI:

- Ho alcune info per ciascuna roccia, e il tipo di roccia corrispondente
- Devo capire le domande migliori!







Un albero «buono»:

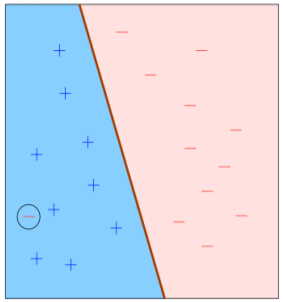
- ho abbastanza dati delle due classi;
- ho abbastanza nodi nell'albero;
- il *confine di decisione* è ragionevole

Over e Under-fitting

L'**overfitting** si verifica quando un modello di ML apprende troppo bene i dettagli presenti nei dati di addestramento, adattandosi in modo eccessivo a questi dati.
Di conseguenza, il modello ottiene prestazioni eccellenti sui dati di training, ma fallisce nel generalizzare su dati nuovi o di test.

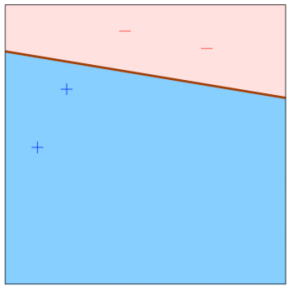
L'**underfitting** avviene quando un modello è troppo semplice o non riesce a cogliere la complessità e le relazioni sottostanti nei dati.
In questo caso, il modello mostra prestazioni scarse sia sui dati di addestramento sia su quelli di test.

Good:

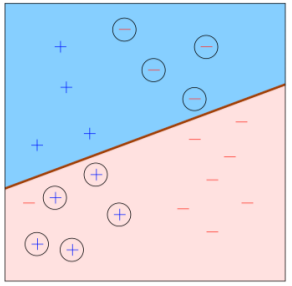


sufficient data
low training error
simple classifier

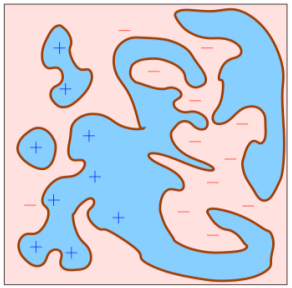
Bad:



insufficient data



training error
too high



classifier
too complex

per controllare overfitting o underfitting:

- predizione sul training set

```
y_pred_tr = model.predict(X_train)
```

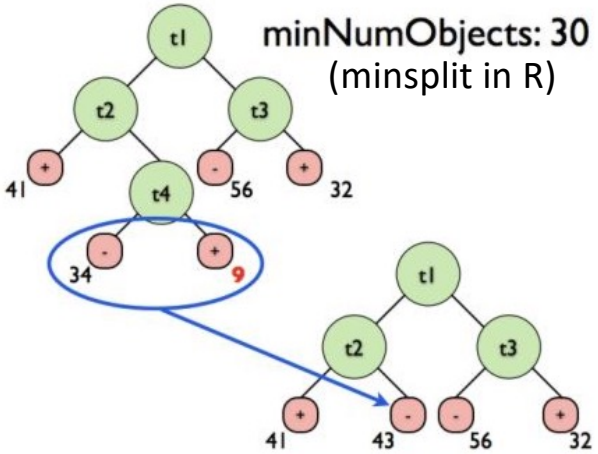
- valutazione

```
confusion_matrix(y_train, y_pred_tr)
```

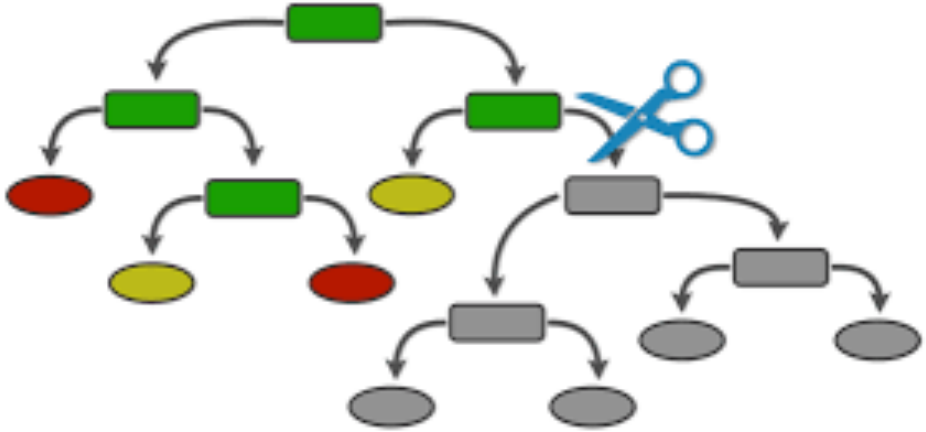
Quando il dataset è ampio e completo, gli alberi possono essere molto profondi e fare overfitting.
Per evitare l'overfitting:

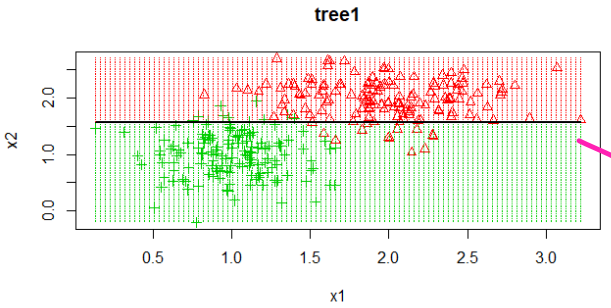
- pre-pruning
  Prima di addestrare, imposto dei limiti «dimensionali» alla struttura dell'albero e alla sua generazione
- post-pruning
  Guardando alla struttura addestrata, poto rami poco significativi.

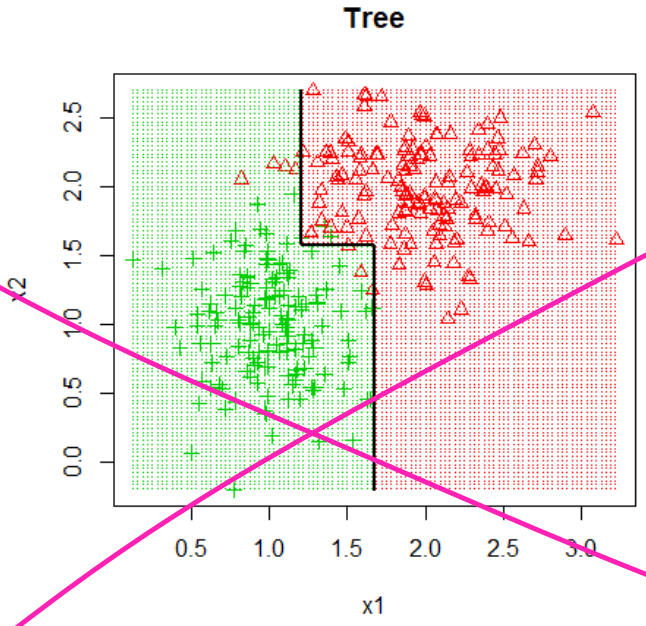
Pre-pruning

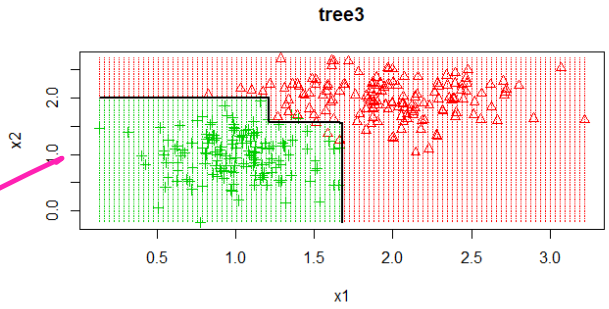


Post-pruning

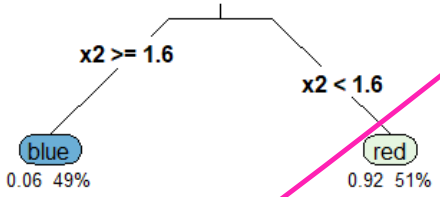


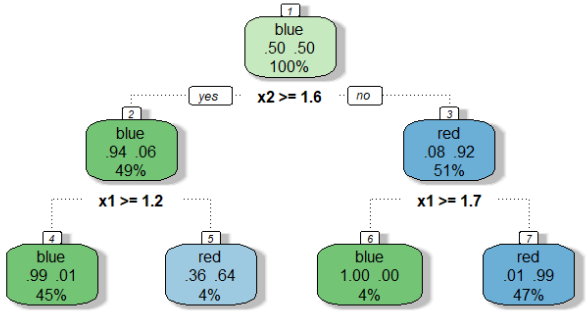




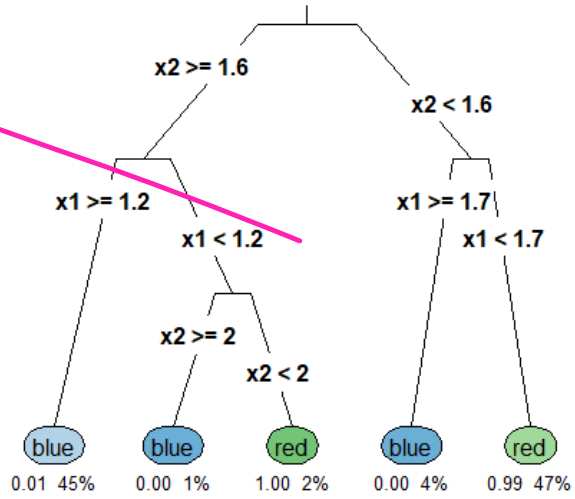


maxdepth = 1





minbucket = 1, minsplit=2

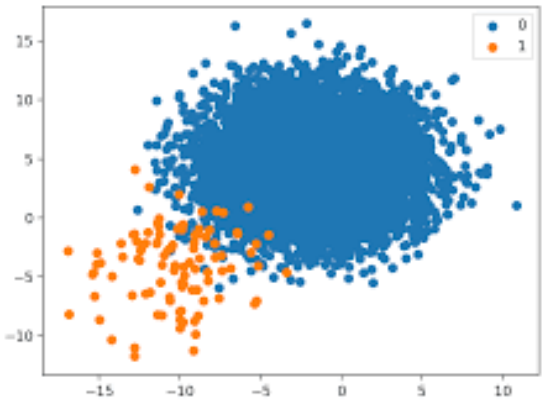


Sbilanciamento delle classi

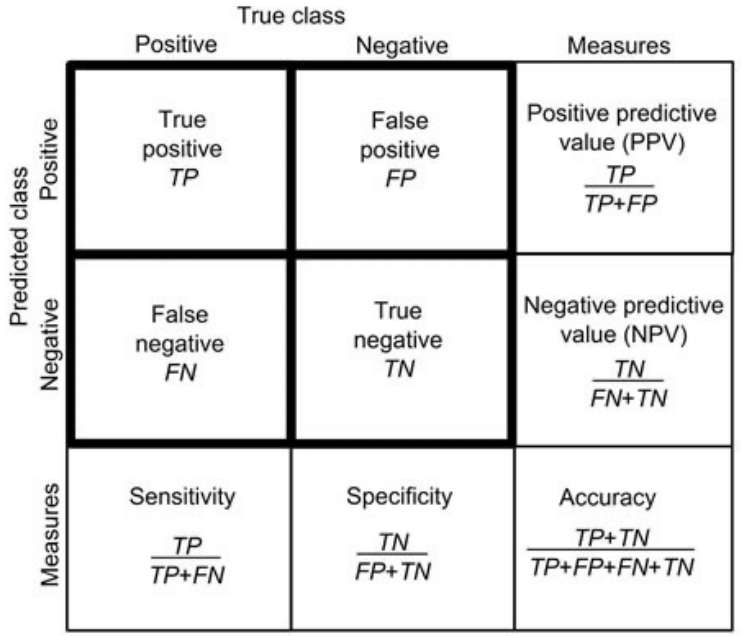
La **class imbalance** (sbilanciamento delle classi) accade quando una delle due classi è significativamente meno rappresentata rispetto all'altra.

In questi casi, attenzione alle metriche!

- un'alta *accuratezza* può essere ingannevole perché un classificatore può ottenere un valore elevato semplicemente predicendo sempre la classe dominante.
- La *sensitività* è particolarmente importante quando la classe minoritaria è quella di interesse (es. diagnosi di malattia). Un classificatore sbilanciato potrebbe avere una sensibilità molto bassa, indicando che non sta rilevando correttamente la classe meno frequente.



	Actual POSITIVE	Actual NEGATIVE	tot
Predicted POSITIVE	1	0	1
Predicted NEGATIVE	2	997	999
tot	3	997	1000



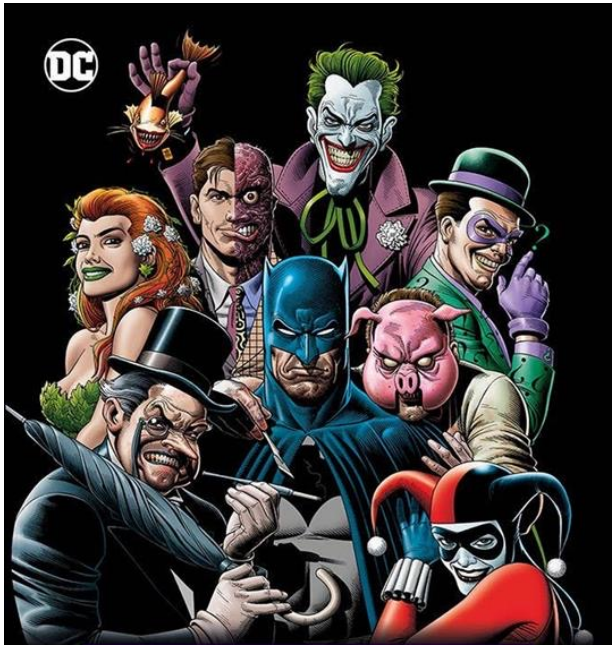
Abbiamo:

- 1 True Positive
- 997 True Negative
- 0 False Positive
- 2 False Negative

Quindi:

- Accuracy = 99,80% (998/1000)
- Misclassification Error = 0,2% (2/1000)
- Sensitivity = 33% (1/3)
- Specificity = 100% (997/997)
- Precision = 100% (1/1)

Esempio di albero decisionale

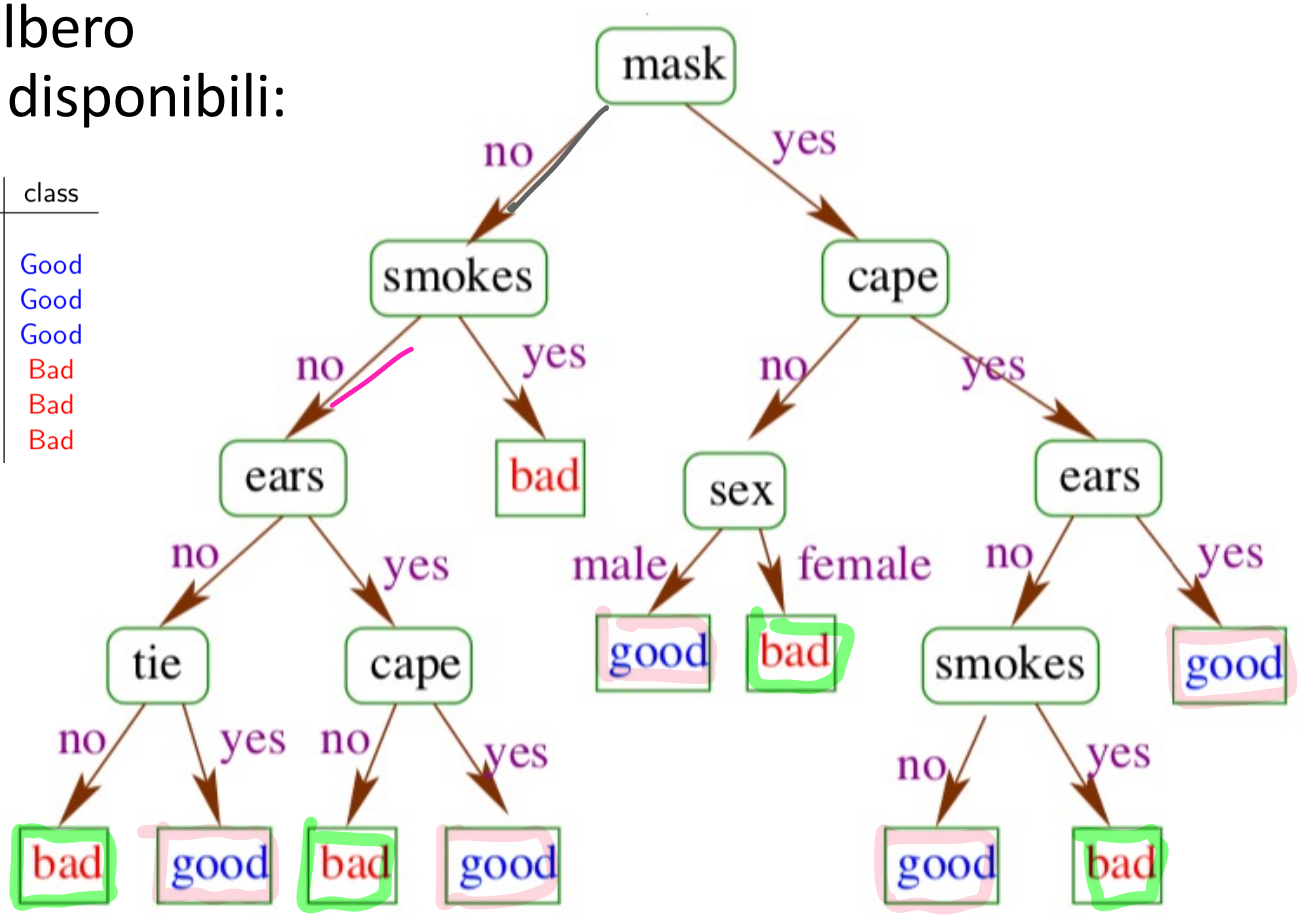


Vogliamo identificare i personaggi come buoni o cattivi dal loro aspetto in base a:

	sex	mask	cape	tie	ears	smokes	class
			training data				
batman	male	yes	yes	no	yes	no	Good
robin	male	yes	yes	no	no	no	Good
alfred	male	no	no	yes	no	no	Good
penguin	male	no	no	yes	no	yes	Bad
catwoman	female	yes	no	no	yes	no	Bad
joker	male	no	no	no	no	no	Bad

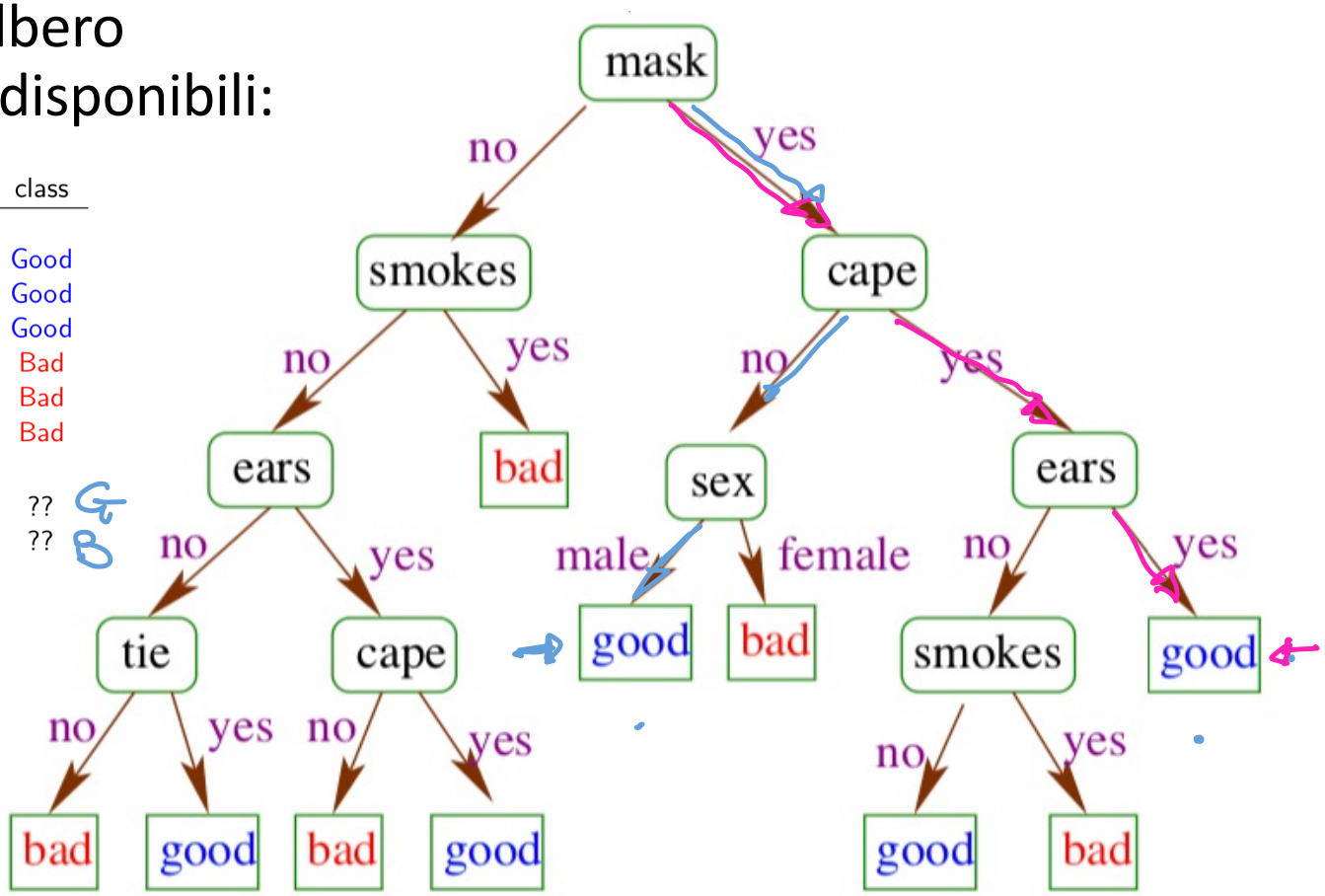
Dopo aver addestrato un albero decisionale sui 6 campioni disponibili:

	sex	mask	cape	tie	ears	smokes	class
			training data				
batman	male	yes	yes	no	yes	no	Good
robin	male	yes	yes	no	no	no	Good
alfred	male	no	no	yes	no	no	Good
penguin	male	no	no	yes	no	yes	Bad
catwoman	female	yes	no	no	yes	no	Bad
joker	male	no	no	no	no	no	Bad



Dopo aver addestrato un albero decisionale sui 6 campioni disponibili:

	sex	mask	cape	tie	ears	smokes	class
			training data				
batman	male	yes	yes	no	yes	no	Good
robin	male	yes	yes	no	no	no	Good
alfred	male	no	no	yes	no	no	Good
penguin	male	no	no	yes	no	yes	Bad
catwoman	female	yes	no	no	yes	no	Bad
joker	male	no	no	no	no	no	Bad
			test data				
batgirl	female	yes	yes	no	yes	no	??
riddler	male	yes	no	no	no	no	??



Test:

- Batgirl:
  good (classificato correttamente)
- Riddler:
  good (classificato non correttamente)