

Report del progetto di Machine Learning

Ferrario Tommaso Matr. 869005 (@TommasoFerrario18)

Terzi Telemaco Matr. 865981(@Tezze2001)

Vendramini Simone Matr. 866229(@Svendra4MySelf)

16 febbraio 2024

Indice

1	Introduzione	2
2	Dataset	4
2.1	Struttura del dataset	4
2.2	Analisi descrittiva	5
2.2.1	Analisi delle correlazioni	8
2.3	Riduzione di dimensionalità	9
2.3.1	Riduzione con la correlazione	9
2.3.2	PCA	10
2.4	Preparazione dei dati	10
3	Modelli	14
3.1	Support Vector Machine	14
3.2	Gaussian Naive Bayes	14
3.2.1	Addestramento di Gaussian Naive Bayes	14
3.3	Rete Neurale	15
3.3.1	Struttura della rete neurale	15
3.3.2	Addestramento della rete neurale	17
3.3.3	Rete neurale su dataset con PCA	17
4	Risultati	19
4.1	Metriche di valutazione <code>dataset_corr</code>	19
4.1.1	Curve ROC	20
4.1.2	10 fold stratified cross validation	21
4.2	Metriche di valutazione <code>dataset_pca</code>	22

Capitolo 1

Introduzione

Questo è un progetto per l'esame di Machine Learning del primo anno del corso di laurea magistrale in informatica dell'Università degli Studi di Milano-Bicocca.

L'intero progetto si basa sul riconoscimento della presenza di un tumore al cervello data l'immagine di una risonanza magnetica.

Il dataset scelto per questo progetto è scaricabile dal seguente link ed è composto da un insieme di features estratte dalle immagini ottenute dalle risonanze magnetiche del cervello di diversi pazienti.

Per il riconoscimento del tumore sono stati allenati i seguenti modelli di machine learning:

- **SVM:** è stato scelto questo modello vista la buona capacità teorica nel generalizzare.
- **Gaussian Naive Bayes:** è stato scelto questo modello dal momento che permette di modellare le probabilità esplicitamente.
- **Rete neurale:** è stato scelto questo modello per confrontare i primi due con una soluzione neurale.

L'obiettivo sarà quello di trovare il modello migliore che riduca al minimo i falsi negativi, mantenendo comunque una buona precisione sui veri negativi. Per la ricerca sono state effettuate le seguenti operazioni:

- **Analisi esplorativa dei dati:** studio esplorativo del dataset utile per effettuare le prime osservazioni sui dati
- **Riduzione di dimensionalità e preprocessing del dataset:** applicazione di diverse trasformazioni del dataset, dalla rimozione dei duplicati, fino alla rimozione dei valori costanti. In aggiunta è stata ridotta la dimensionalità utilizzando due metodi, il primo basato sulla rimozione delle features correlate, il secondo basato sull'utilizzo di pca. In questa fase vengono quindi generati i due dataset.
- **Apprendimento dei modelli:** sono stati allenati i tre diversi modelli sull'80% delle istanze dei relativi dataset per confrontare qual è la metodologia migliore per ridurre la dimensionalità. Prima di effettuare l'apprendimento vengono anche effettuate tutte le operazioni di ricerca degli iperparametri migliori per ciascun modello.
- **Valutazione dei modelli:** una volta trovati gli iperparametri migliori ed effettuata l'operazione di apprendimento, sono state effettuate tutte le operazioni di valutazione dei modelli sul 20% di istanze rimanenti di entrambi i dataset.
- **Valutazione della robustezza:** dal momento che il dataset è di medie dimensioni allora è stata effettuata una cross-validation per accertarsi che le osservazioni indotte dalla fase precedente fossero affidabili.
- **Confronto tra i vari modelli:** sono stati confrontati tutti i modelli sia in merito ai criteri di valutazione, sia in merito ai tempi di apprendimento.

In conclusione, la struttura dell'elaborato è delineata dai seguenti capitoli:

- **Introduzione:** descrizione del dominio e presentazione dei modelli che verranno presi in considerazione per questo progetto.
- **Dataset:** descrizione di come è stato costruito il dataset a partire dalle immagini, ovvero come sono state ricavate le features, e analisi esplorativa.

-
- **Rete neurale:** descrizione e analisi delle performance della rete.
 - **SVM:** descrizione e analisi delle performance delle SVM.
 - **Gaussian Naive Bayes:** descrizione e analisi delle performance per Gaussian Naive Bayes.
 - **Analisi dei risultati:** analisi comparata dei risultati tra i tre modelli considerati.
 - **Conclusioni:** conclusioni sull'elaborato.

Capitolo 2

Dataset

2.1 Struttura del dataset

Il dataset è composto da 13 features estratte da un set di 3762 immagini in bianco e nero, ciascuna immagine è stata prodotta dalla risonanza magnetica del cervello di diversi pazienti. Di conseguenza, si hanno un totale di 3762 istanze, ognuna etichettata con un valore categorico che rappresenta la presenza o meno del tumore al cervello. L'etichetta è presente sotto la colonna *Class* e assume i seguenti valori:

- **Presenza del tumore:** $T = 1$
- **Assenza del tumore:** $T = 0$

Le features vengono già date e si assumono che siano corrette rispetto alle risonanze magnetiche del dataset[1]. Più precisamente le features si distinguono in:

1. **First Order Features:** forniscono informazioni legate alle distribuzione dei livelli di grigio dell'immagine. Queste features corrispondono alle statistiche descrittive calcolate sui valori di ciascun pixel dell'immagine e corrispondono a:
 - **Media**
 - **Varianza**
 - **Deviazione standard**
 - **Indice di asimmetria**
 - **Indice di kurtosis**
2. **Second Order Features:** forniscono informazioni a livello di composizione della texture dell'immagine e si dividono in:
 - **Contrast:** misura la differenza tra i livelli di grigio tra diverse parti dell'immagine. Maggiore sarà il valore allora maggiore sarà la deviazione standard dei livelli di grigio nell'immagine.
 - **Energy:** fornisce informazioni sulla texture e sulla complessità. Maggiore sarà il valore di Energy, allora maggiore sarà il contrasto oppure più dettagliata sarà la texture.
 - **ASM:** misura quanto sono distribuiti uniformemente i livelli di grigio nell'immagine. Maggiore sarà il valore allora più uniforme sarà la distribuzione dei livelli di grigio nell'immagine, quindi la variabilità dei livelli di grigio è ridotta.
 - **Entropy:** misura la randomicità dei livelli di grigio, quindi l'entropia sarà massima quando tutti i livelli di grigio sono equalmente probabili (randomness). Più precisamente immagini con un ampio range di valori dei pixel e distribuzioni uniformi di intensità tendono a aumentare il valore dell'entropia.
 - **Homogeneous:** misura quanto sono uniformi i livelli di grigio. Più alto sarà l'indice allora minore sarà il contrasto dell'immagine.
 - **Dissimilarity:** misura quanto differiscono diverse regioni dell'immagine. Un valore alto indica che si hanno molte differenze tra diverse regioni della stessa immagine, quindi più complessa sarà la texture.
 - **Correlation:** misura la correlazione dei livelli di grigio tra diverse regioni della stessa immagine.
 - **Coarseness:** misura il grado di variazione o di irregolarità dei livelli di grigio, quindi misura la finezza o la granularità della texture.

2.2 Analisi descrittiva

Caricato il dataset, è stato eseguito un controllo per verificare che non ci fossero valori nulli. In questo caso non sono stati trovati valori nulli, quindi non è stato necessario eseguire alcuna operazione per la gestione di tali valori. In secondo luogo è stato controllato se il dataset contiene dei duplicati e sono stati trovati un totale di 63 duplicati e di conseguenza sono stati tutti rimossi.

Successivamente, si è proceduto controllando se le classi del dataset sono sbilanciate, per fare ciò è stato creato un istogramma che mostra la frequenza dei valori della colonna *Class* (visibile nella figura 2.1).

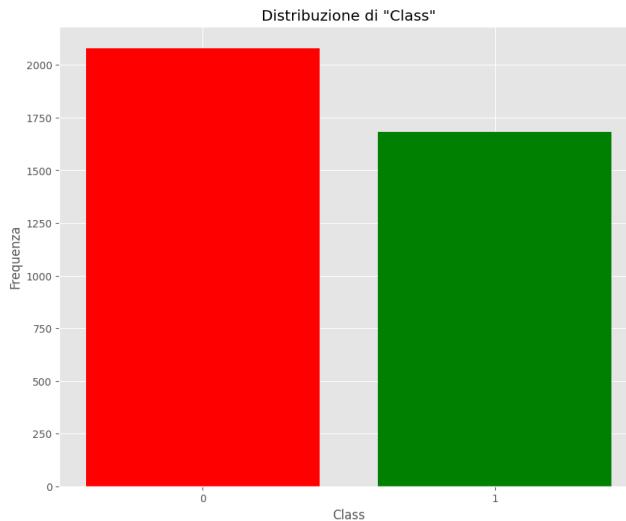


Figura 2.1: Distribuzione delle classi

Dall'istogramma si evidenza che le classi sono abbastanza bilanciate, infatti, il dataset è composto dal 45% di esempi positivi, mentre il 55% è composto da esempi negativi.

Successivamente sono stati costruiti 13 istogrammi, uno per ogni features in modo tale da analizzare visivamente la loro distribuzione (i grafici sono visibili nella figura 2.2).

Da questi grafici si evince che le features *Energy*, *ASM*, *Homogeneity*, *Entropy* e *Coarseness* non seguono una distribuzione normale, a differenza delle altre feature che hanno un andamento simile ad una gaussiana. In ogni caso, anche se non seguono l'ipotesi di normalità, si è deciso di non rimuoverli dal dataset tenendo presente che non si stanno rispettando le assunzioni dei modelli che vogliamo utilizzare. In aggiunta, dal grafico si può notare che le features con una distribuzione simile ad una normale non sono standardizzate, questa affermazione viene anche confermata dal calcolo delle statistiche descrittive mostrate nella tabella 2.1.



Figura 2.2: Barplot delle features

Di conseguenza sarà opportuno standardizzare le features per rispettare le assunzioni di SVM e della rete neurale. Per quanto riguarda Gaussian Naive Bayes non è necessario effettuare l'operazione sopracitata, dal momento che nel calcolo della probabilità si sfrutta la formula della Gaussiana che standardizza implicitamente.

Dal calcolo delle statistiche descrittive si può osservare che la feature *Coarseness* assume un valore quasi insignificativo tendente a 0, quindi è stato pensato di convertire questa feature ad una scala logaritmica, permettendo di aumentare la significatività dei valori. Nonostante questa trasformazione, la feature presenta una deviazione standard nulla quindi questo suggerisce la sua esclusione perché sicuramente non sarà la feature discriminante.

Per la fase di analisi risulta cruciale effettuare uno studio sulla potenzialità di discriminazione dei dati. Per fare ciò sono stati prodotti un totale di 13 grafici, uno per ogni feature, ciascuno composto da due boxplot rappresentanti i percentili delle feature separati per le classi 0 e 1. I grafici sono visibili nella figura 2.3.

	Mean	Variance	Standard Deviation	Entropy	Skewness	Kurtosis
count	3699	3699	3699	3699	3699	3699
mean	9.473354	710.895793	25.174138	0.072940	4.108362	24.422551
std	5.732700	468.154274	8.785183	0.069914	2.559163	56.292660
min	0.078659	3.145628	1.773592	0.000882	1.886014	3.942402
25%	4.965988	362.568474	19.041231	0.006662	2.621447	7.265711
50%	8.468414	624.708056	24.994160	0.065681	3.422625	12.370334
75%	13.184586	967.036275	31.097207	0.112694	4.662941	22.760735
max	33.239975	2910.581879	53.949809	0.394539	36.931294	1371.640060

(a) Statistiche descrittive delle feature *Mean*, *Variance*, *Standard Deviation*, *Entropy*, *Skewness* e *Kurtosis*.

	Contrast	Energy	ASM	Homogeneity	Dissimilarity	Correlation	Coarseness
count	3699	3699	3699	3699	3699	3699	3699
mean	128.119746	0.203546	0.058080	0.478442	4.702774	0.955697	7.458341e-155
std	110.168137	0.129047	0.057973	0.127971	1.856688	0.026061	0.000000e+00
min	3.194733	0.024731	0.000612	0.105490	0.681121	0.549426	7.458341e-155
25%	72.057782	0.068793	0.004732	0.364279	3.413266	0.946879	7.458341e-155
50%	107.075103	0.223482	0.049944	0.511894	4.486111	0.961567	7.458341e-155
75%	161.199093	0.298110	0.088870	0.575239	5.725644	0.971315	7.458341e-155
max	3382.574163	0.589682	0.347725	0.810921	27.827751	0.989972	7.458341e-155

(b) Statistiche descrittive delle feature *Contrast*, *Energy*, *ASM*, *Homogeneity*, *Dissimilarity*, *Correlation* e *Coarseness*.

Tabella 2.1: Statistiche descrittive degli attributi

Dai boxplot si può esservare che nel dataset sono presenti notevoli outliers, in aggiunta le distribuzioni delle features separate per classi si sovrappongono quasi tutte, eccetto per *Entropy*, *Energy*, *ASM* e *Homogeneity*. Questo implica il fatto che potenzialmente sono le più discriminanti rispetto alle altre features. In aggiunta, i grafici confermano che la *Coarseness* è costante, quindi dal momento che non può essere un attributo discriminante si può rimuovere dal dataset.

Infine, è stato effettuato un confronto tra features estratte 2 a 2 per poter analizzare se le classi sono separabili linearmente considerando gruppi di due feature. In questo modo sono state calcolate tutte le combinazioni di feature, per ogni combinazione è stato prodotto un grafico cartesiano e un'istanza sarà disegnata nel grafico mediante un punto. Il punto esprime 2 informazioni:

- il colore del punto specifica la classe dell'istanza
- le coordinate saranno i valori delle due features considerate

In aggiunta, sono stati costruiti due grafici per ogni combinazione, per identificare quante istanze di classi diverse si sovrappongono. Tutti grafici vengono mostrati nella figura 2.4

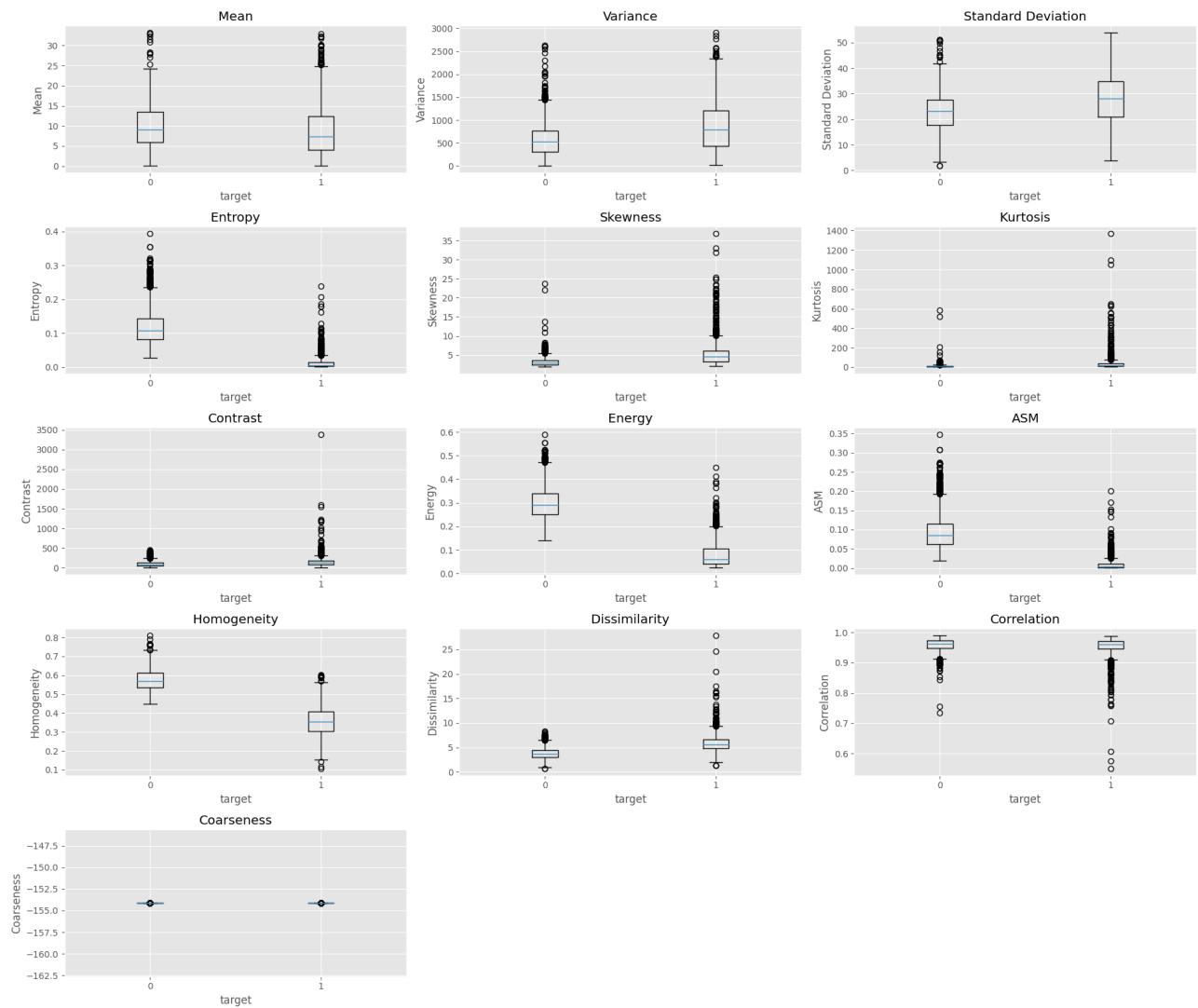


Figura 2.3: Barplot delle features

I grafici evidenziano il fatto che per ogni coppia di features si ha almeno una lieve sovrapposizione delle nuvole di punti rappresentanti le due classi, questo significa che in due dimensioni le classi non sono linearmente separabili a meno di accettare notevoli errori. In ogni caso, si possono osservare le coppie con meno sovrapposizioni tra classi, ovvero:

- *Entropy e Mean*
- *Skewness e Mean*
- *Skewness e Entropy*
- *Contrast e Entropy*
- *Correlation e Entropy*

Queste coppie hanno un numero di istanze sovrapposte ridotto, allora si può affermare che le SVM con un buon kernel potrebbero ottenere degli ottimi risultati nella classificazione. Inoltre, questi grafici anticipano dei primi studi sulla correlazione come la presenza di una correlazione logaritmica tra *Skewness* e *Mean*.

2.2.1 Analisi delle correlazioni

Il passaggio successivo è stato quello di analizzare le correlazioni tra le feature, dal momento che un primo modo per ridurre la dimensionalità del dataset è attraverso il mantenimento di solo una feature tra tutte quelle correlate.

Perciò per prima cosa è stata prodotta una matrice di correlazione, riportata in figura 2.5, attraverso la quale è stato possibile osservare le correlazioni tra le feature.

Dall'analisi di questa matrice, si possono osservare diverse correlazioni tra le feature. Innanzitutto, si può notare una forte correlazione positiva tra le feature *Mean*, *Variance* e *Standard deviation*. Questa correlazione è facilmente spiegabile analizzando le immagini prodotte dalle risonanze magnetiche. Infatti, essendo in bianco e nero, se la media tende a 1 (colore bianco) allora la varianza e la deviazione standard aumentano, perché si passa da pixel neri a pixel bianchi. Questo comporta che le transizioni dal nero assoluto al bianco assoluto necessitano di regioni di pixel maggiore rispetto ad una transizione tra nero assoluto e grigio (0.5).

Invece, la correlazione tra varianza e deviazione standard è facilmente spiegabile, perché la deviazione standard è la radice quadrata della varianza, quindi sono misure dipendenti.

Una seconda forte correlazione positiva si può osservare tra le feature che misurano l'**uniformità dei livelli di grigio** dei pixel, più precisamente tra le feature *Entropy*, *ASM*, *Homogeneity* ed *Energy*. Queste feature quantificano delle informazioni legate alla texture dell'immagine, quindi la forte correlazione positiva può essere spiegata analizzando le texture delle immagini su cui vengono calcolate. Più precisamente se si ha un valore molto alto della feature *Entropy*, significa che la texture non è uniforme, ovvero si hanno strutture complesse e irregolari, quindi più uniforme sarà la distribuzione dei livelli di grigio, aumentando l'indice di *ASM*, comportando di conseguenza un aumento delle variazioni di intensità dei livelli di grigio, aumentando di conseguenza anche gli indici di *Energy* e *Homogeneity*.

Al tempo stesso, la matrice di correlazione evidenzia una forte correlazione positiva tra gli indici che misurano la **morfologia della distribuzione dei livelli di grigio**, ovvero le feature di *Skewness* e *Kurtosis*. Questa dipendenza implica il fatto che più la distribuzione è leptokurtica (Kurtosis grande), ovvero la frequenza dei livelli di grigio dei pixel si concentrano interamente vicino alla media/mediana/moda, allora più grande sarà la Skewness, ovvero maggiore sarà la tendenza ad avere frequenze di livelli di grigio più vicino al bianco (coda di destra più alta rispetto alla coda di sinistra).

La matrice della correlazione evidenzia anche una correlazione positiva tra le feature di *Contrast* e *Dissimilarity*, ovvero maggiore sarà il contrasto e maggiore sarà la complessità della texture e quindi la metrica *Dissimilarity*.

In aggiunta, dalla matrice si evidenza che le features di *Dissimilarity* e *Homogeneity* sono correlate negativamente, dal momento che la prima misura la dissimilarità tra i livelli di grigio delle regioni e l'altra misura la loro l'omogeneità.

2.3 Riduzione di dimensionalità

Dal momento che il dataset è composto da un totale di 13 features, allora è importante trovare il modo di ridurre la sua dimensionalità con lo scopo di velocizzare l'apprendimento dei modelli e semplificare il task di classificazione. Per ridurre la dimensionalità del dataset sono stati utilizzati due diversi metodi:

- riduzione utilizzando la correlazione
- riduzione utilizzando PCA

2.3.1 Riduzione con la correlazione

Questo metodo si basa sulla correlazione delle features, ovvero se due features sono correlate allora significa che a livello discriminante una delle due è superflua, di conseguenza si può rimuovere.

Alla luce dello studio sulla correlazione effettuato nella sezione 2.2.1, è possibile ridurre la dimensionalità del dataset considerando solo una delle features correlate, di conseguenza sono state considerate solo queste:

- **Mean**
- **Entropy**
- **Skewness**
- **Contrast**
- **Correlation**

Il nuovo dataset così composto verrà chiamato `dataset_corr` e dal momento che **Entropy** è l'unico attributo che non segue una distribuzione standard, allora si sottolinea che non verranno rispettate le assunzioni di normalità dei 3 modelli scelti. In aggiunta, dal momento che per le SVM e NN assumono di lavorare su dati

con distribuzione normale standard, allora per essere più compatibili possibili con le assunzioni, è stata creata una versione del dataset normalizzata, chiamata `dataset_corr_std`.

2.3.2 PCA

In seguito, è stato pensato di provare ad utilizzare un metodo di trasformazione delle feature per ridurre la loro dimensionalità e successivamente analizzare i risultati ottenuti. La scelta sul metodo da utilizzare è ricaduta su PCA.

Prima di applicare la PCA, è stato necessario standardizzare le feature del dataset originario senza i duplicati, ma con l'attributo **Coarseness**, dal momento che se ne occuperà PCA della sua rimozione. In aggiunta, l'operazione di standardizzazione è necessaria per evitare che le feature con varianza maggiore abbiano un peso maggiore rispetto alle altre. Senza standardizzare le feature, la PCA potrebbe non essere in grado di trovare le direzioni di massima varianza.

La prima parte dell'analisi è stata quella di trovare il corretto numero di componenti da utilizzare per la PCA. Questo è stato fatto attraverso l'osservazione della percentuale di varianza spiegata per ogni componente. Per svolgere questa operazione sono state utilizzate solamente le feature numeriche del dataset, quindi sono state escluse le colonne *Image* e *Class*.

Rimosse le colonne non necessarie, è stato possibile computare la PCA utilizzando la libreria *sklearn* e successivamente è stato possibile osservare la percentuale di varianza spiegata per ogni componente, riportata in figura 2.6.

Dall'analisi della percentuale di varianza spiegata per ogni componente, si può osservare che le prime 3 componenti spiegano circa l'85% della varianza dei dati. Questo ci ha permesso di ridurre la dimensionalità del dataset a soli 3 attributi, permettendo di rappresentare i dati in uno spazio a 3 dimensioni.

Dalla figura 2.7 si può osservare che i dati ottenuti dalla PCA sembrano essere separabili con un iperpiano. Il nuovo dataset ridotto verrà denominato `dataset_pca` e dal momento che SVM e NN hanno bisogno di dati standardizzati, allora è stato prodotto anche la sua versione standardizzata, chiamata `dataset_pca_std`.

2.4 Preparazione dei dati

Dal momento che sono stati creati diverse versioni del dataset, allora è stata prodotta la tabella 2.2 contenente il resoconto di tutte le versioni con le operazioni applicate.

Successivamente, sono state definite 2 versioni per ogni modello, una per ogni metodo di riduzione del dataset, in questo modo è possibile effettuare un confronto tra i vari modelli allenati sulle diverse versioni del dataset per identificare il più adatto al dominio in questione.

La strategia di valutazione dei modelli si è basata sull'esecuzione sequenziale dei seguenti passi:

- **valutazione classica:** apprendimento del modello su 80% del dataset e valutazione sul 20% del dataset rimanente
- **cross-validation:** validazione del modello utilizzando 10 fold stratified cross-validation

Perciò a causa della prima valutazione è stata applicata una suddivisione stratificata 80 – 20 di tutti i dataset ridotti, ovvero su `dataset_corr`, `dataset_corr_std`, `dataset_pca` e `dataset_pca_std`. La suddivisione è stata effettuata in modo stratificato per mantenere bilanciate le classi sia nell'insieme di train, sia nell'insieme di test. Inoltre, per l'apprendimento dei modelli è stato necessario effettuare una ricerca degli iperparametri migliori, quindi è stata effettuata una *cross-validation* sul training set ottenuto precedentemente, più precisamente si è scelto di utilizzare una k-fold cross-validation con k=5.

La standardizzazione dei dati è stata effettuata in quanto la rete neurale e la SVM sono modelli che possono essere influenzati dalla distribuzione dei dati.

Nella tabella 2.2 è presentare un breve riassunto di come sono stati preparati i dati per l'addestramento dei modelli e quale dataset è stato utilizzato per ciascun modello.

Nome del dataset	Operazioni applicate	Utilizzato per i seguenti modelli
dataset_corr	Riduzione della dimensionalità utilizzando l'analisi della correlazione	GNB
dateset_corr_std	dataset_corr con la standardizzazione dei dati	SVM e NN
dateset_pca	dataset_corr_std applicando l'algoritmo PCA	GNB
dateset_pca_std	dataset_pca con la standardizzazione dei dati	SVM e NN

Tabella 2.2: Riassunto delle operazioni effettuate sui dataset e utilizzo dei dataset per i modelli.

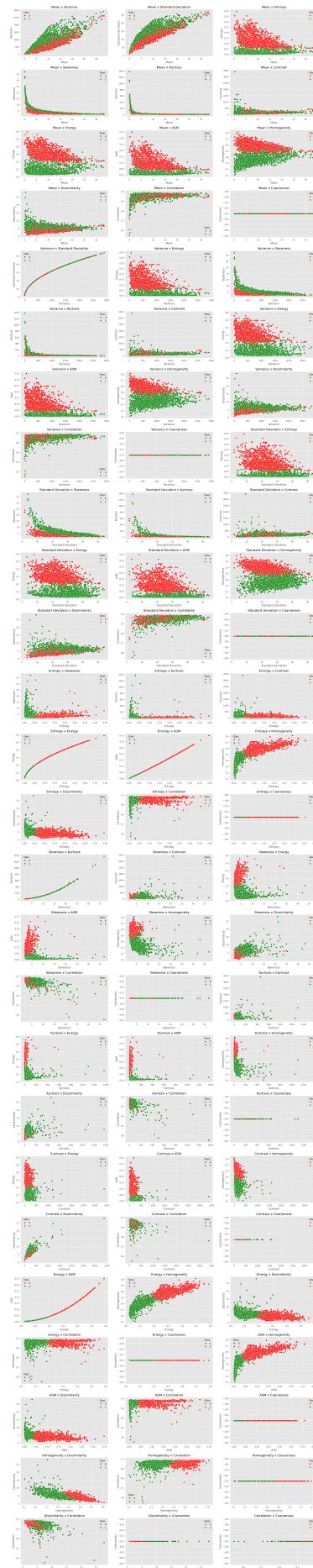


Figura 2.4: Scatterplot di tutte le combinazioni di features

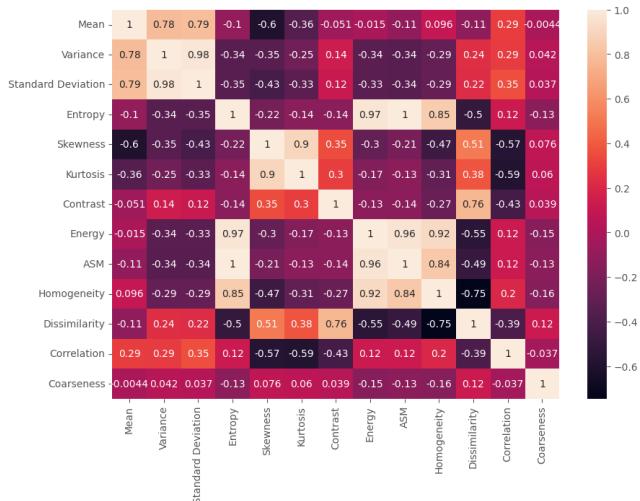


Figura 2.5: Matrice di correlazione

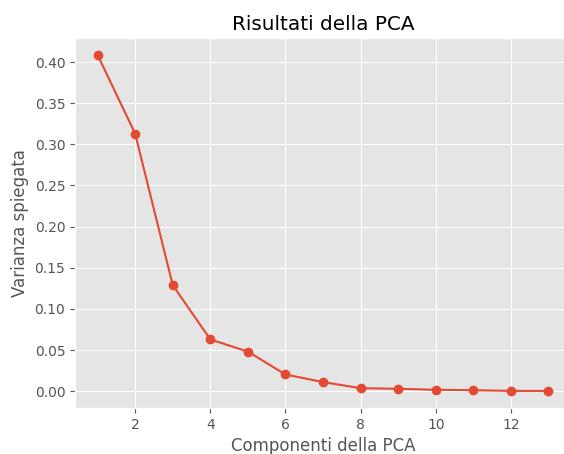


Figura 2.6: Percentuale di varianza spiegata per ogni componente

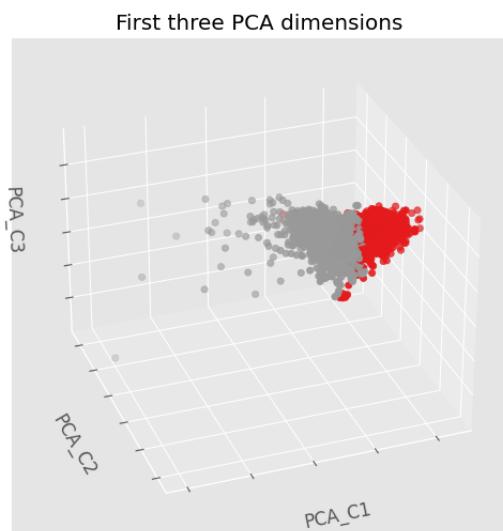


Figura 2.7: Scatter plot a 3 dimensioni

Capitolo 3

Modelli

In questo capitolo verranno presentati i modelli che si è deciso di addestrare per svolgere il compito di classificazione. I modelli sono stati scelti in base ai risultati ottenuti nella fase di analisi esplorativa e in base alle caratteristiche del dataset. In particolare, si è deciso di addestrare:

- **Support Vector Machine**
- **Gaussian Naive Bayes**
- **Rete Neurale**

Per ognuno di essi verrà presentata una breve descrizione sulla loro struttura e sulle operazioni che sono state svolte per la loro definizione. In un secondo momento verranno presentati i risultati ottenuti e verrà fatta una valutazione sui modelli addestrati.

La strategia di valutazione dei modelli si è basata sull'esecuzione sequenziale dei seguenti passi:

- **valutazione classica:** apprendimento del modello su 80% del dataset e valutazione sul 20% del dataset rimanente
- **cross-validation:** validazione del modello utilizzando 10 fold stratified cross-validation

La scelta di effettuare due valutazioni si è basata sul fatto che il numero degli esempi nel dataset non sono molti, più precisamente il dataset è di medie dimensioni, quindi la valutazione classica potrebbe non essere affidabile. Perciò si sfrutta la prima valutazione per effettuare lo studio degli iperparametri, allenare la rete e successivamente effettuare la valutazione. La seconda valutazione sfrutta gli iperparametri precedenti per validare la robustezza dei modelli.

3.1 Support Vector Machine

3.2 Gaussian Naive Bayes

Di seguito verrà presentato il processo di addestramento del modello **Gaussian Naive Bayes**. È importante precisare che la scelta di utilizzare questo modello è stata fatta con la consapevolezza che non tutte le features derivano da una distribuzione normale, andando contro le ipotesi del modello. Tuttavia, abbiamo deciso di utilizzarlo in quanto volevamo distaccarci da un approccio geometrico e sfruttare un modello probabilistico.

3.2.1 Addestramento di Gaussian Naive Bayes

Come per gli altri approcci, abbiamo deciso di addestrare due modelli, uno su `dataset_corr` e l'altro su `dataset_pca`.

La libreria utilizzata per l'implementazione di Gaussian Naive Bayes non presenta degli iperparametri da stimare, quindi non è stato necessario effettuare un processo di ricerca della combinazione migliore.

3.3 Rete Neurale

In questa sezione verrà presentata la **rete neurale**. Nello specifico, si andranno a presentare i passaggi che sono stati effettuati per la realizzazione di questo modello, prestando particolare attenzione alla fase di definizione della struttura della rete neurale e alla fase di addestramento della stessa.

In questo capitolo tutte le operazioni effettuate sono state realizzate utilizzando i dataset standardizzati (`dataset_corr_std` e `dataset_pca_std`) presentati nella fase di preparazione dei dati 2.4.

3.3.1 Struttura della rete neurale

La fase di definizione della struttura della rete neurale è stata effettuata attraverso una serie di passaggi. Inizialmente, è stata effettuata un'analisi dei dati in modo tale da selezionare un sottoinsieme di feature le quali sono state utilizzate come input della rete neurale. Questo sottoinsieme è stato selezionato in modo tale da garantire che la rete neurale fosse in grado di discriminare in modo efficace le due classi.

In seguito, è stata effettuata una fase di grid search per valutare la combinazione migliore di iperparametri per la rete neurale. Questa fase è stata effettuata attraverso una cross validation a 5 fold, prendendo in considerazione solamente i dati del training set.

Dai risultati ottenuti dalla fase di analisi e dal dominio del problema, si è scelto di utilizzare una rete con una struttura di dimensioni ridotte, in modo tale da ridurre le possibilità che la rete neurale soffra di overfitting.

Per svolgere il compito di classificazione si è scelto di utilizzare una rete neurale feedforward, la cui struttura, a meno del layer di input e di output, è stata definita attraverso il processo di grid search.

Ottimizzazione degli iperparametri

Come già accennato in precedenza, la ricerca degli iperparametri della rete neurale è stata effettuata attraverso un processo di grid search. Questo processo ha permesso di valutare le prestazioni della rete neurale al variare della funzione di attivazione, del numero di layer nascosti e del numero di neuroni per ogni layer nascosto.

Visti i risultati ottenuti nella fase di analisi e la volontà di mantenere i tempi di addestramento bassi, si è scelto di mantenere una struttura di dimensioni ridotte per la rete neurale. Per questo motivo, l'operazione di grid search è stata effettuata prendendo in considerazione un numero di neuroni per layer tra 5, 10 mentre il numero di layer nascosti è stato valutato tra 1 e 2.

Per quanto riguarda la funzione di attivazione, sono state valutate le seguenti funzioni di attivazione:

- *ReLU*
- *Leaky ReLU*
- *sigmoid*

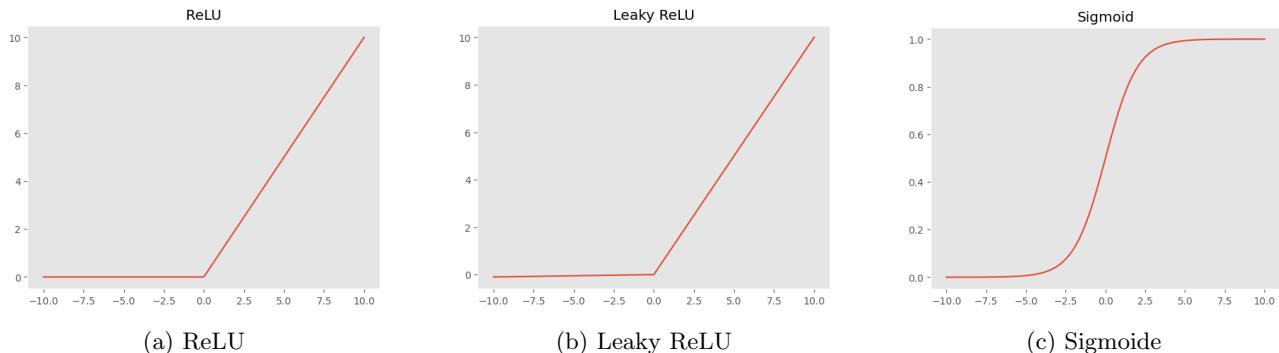


Figura 3.1: Funzioni di attivazione utilizzate nella fase di grid search

Durante il processo di grid search, per ogni modello che è stato addestrato, sono state raccolte delle informazioni relative all'accuratezza, al tempo di addestramento richiesto. In aggiunta a queste informazioni, dato che ogni modello è stato addestrato attraverso una cross validation a 5 fold, sono stati calcolati gli intervalli di confidenza al 90% per ogni modello addestrato.

Ottenuti i risultati, si è proceduto con l'analisi di questi, in modo tale da definire la struttura della rete neurale. Per effettuare questa valutazione sono state utilizzate le misure precedentemente citate.

Il modello selezionato è stato scelto in base al seguente criterio:

$$\text{Modello} = 2 * \text{Accuratezza} + 2 * \text{Tempo di addestramento} + 1 * \text{Intervalli di confidenza}$$

Le misure di accuratezza e tempo di addestramento si riferiscono alla media calcolata attraverso la cross validation.

Nello specifico, sono stati utilizzati i seguenti pesi: 2 per l'accuratezza media, 2 per il tempo di addestramento medio e 1 per gli intervalli di confidenza. Questi pesi sono stati scelti in modo tale da dare più importanza all'accuratezza media e al tempo di addestramento medio, in quanto sono le due misure che permettono di valutare le prestazioni della rete neurale, mentre gli intervalli di confidenza sono stati utilizzati per valutare la variabilità delle prestazioni.

Per verificare la validità del modello scelto si è proceduto con il confronto di esso con la rete che ha ottenuto la migliore accuratezza e quella che ha ottenuto il tempo di addestramento minore, ottenendo i risultati riportati in tabella 3.1.

Modello	Accuratezza	Tempo di addestramento
Tempo di addestramento minore	97.9%	1.05s
Accuratezza maggiore	99.0%	14.43s
Modello scelto	98.6%	2.59s

Tabella 3.1: Risultati ottenuti dalla fase di grid search

Dai valori riportati nella tabella 3.1 si può notare che il notare che il modello che è stato selezionato fornisce un compromesso tra accuratezza e tempo di addestramento. Nello specifico, perdendo lo 0.4% di accuratezza si è ottenuto un tempo di addestramento minore di circa 12 secondi.

Definizione della struttura della rete neurale

Dalla fase di analisi è stato selezionato un sottoinsieme di feature le quali sono state utilizzate come input della rete neurale. Questo sottoinsieme è composto da 5 elementi, il che ha permesso di definire la struttura del layer di input della rete neurale, questo primo strato è composto da 5 neuroni, uno per ogni feature selezionata.

I risultati ottenuti dalla fase di grid search hanno permesso di definire la struttura della rete neurale. In particolare, la rete neurale è composta da 1 layer di input, 2 layer nascosti e 1 layer di output.

I layer nascosti sono composti nel seguente modo:

- Il primo layer nascosto è composto da 10 neuroni, in cui la funzione di attivazione è la funzione ReLU 3.1a.
- Il secondo layer nascosto è composto da 5 neuroni, in cui la funzione di attivazione è la funzione ReLU 3.1a.

Per concludere la descrizione della struttura della rete neurale, è necessario specificare come è composto l'ultimo layer, ovvero quello di output. Vista la natura del problema di classificazione, il layer di output è composto da un solo neurone, in cui la funzione di attivazione è la funzione sigmoide 3.1c.

$$\sigma(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (3.1)$$

Questa scelta è dovuta al fatto che tale funzione restituisce un valore compreso tra 0 e 1, il che permette di interpretare l'output della rete neurale come la probabilità che l'input appartenga alla classe positiva.

La struttura della rete neurale è riassunta nella figura 3.2.

Altri iperparametri

Oltre alla ricerca della struttura della rete neurale, la fase di grid search è stata utilizzata per valutare l'algoritmo di ottimizzazione, il numero di epoche e la dimensione del batch.

Per quanto riguarda l'algoritmo di ottimizzazione, il confronto è stato eseguito tra *Adam* e *SGD*, mentre per il numero di epoche e la dimensione del batch sono stati valutati i valori 100, 300 per il numero di epoche e 50, 100, 300 per la dimensione del batch.

I risultati ottenuti dalla fase di grid search hanno permesso di definire i valori degli iperparametri che hanno permesso di ottenere i migliori risultati. In particolare, l'algoritmo di ottimizzazione scelto è *Adam*, mentre il numero di epoche e la dimensione del batch sono stati impostati a 100 e 100 rispettivamente.

In questa fase è stato necessario definire la funzione di perdita. Si è scelta la *binary crossentropy* in quanto adatta a problemi di classificazione binaria. La scelta di questa loss è dovuta alla natura del problema di classificazione che si vuole risolvere.

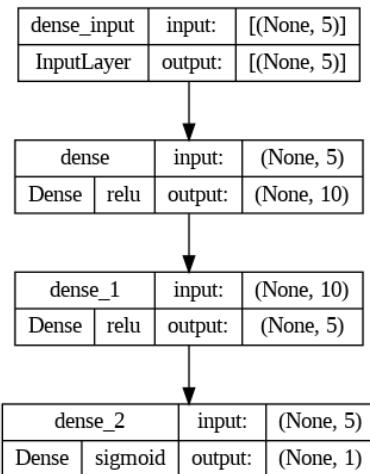


Figura 3.2: Struttura della rete neurale

3.3.2 Addestramento della rete neurale

La fase di addestramento della rete neurale è stata effettuata utilizzando il training set precedentemente definito. L'addestramento della rete neurale è stato effettuato utilizzando la libreria *Keras* in quanto permette di definire e addestrare reti neurali in modo intuitivo.

3.3.3 Rete neurale su dataset con PCA

Per verificare se i risultati ottenuti dal modello addestrato sulle feature da noi selezionate siano effettivamente dovuti alla struttura delle feature e non a una fortunata selezione, si è deciso di addestrare un modello con le feature ottenute attraverso la PCA.

Il dataset ottenuto attraverso la PCA, descritto nella sezione 2.3.2, è stato diviso in training set e test set in modo tale da mantenere la stessa percentuale di dati positivi e negativi in entrambi i set. Oltre a questa operazione, i dati sono stati standardizzati. Come per il modello addestrato con le feature selezionate manualmente, anche per questo modello è stata effettuata una fase di grid search per valutare la combinazione migliore di iperparametri per la rete neurale.

Il processo utilizzato in questa fase è analogo a quello utilizzato per il modello precedente, sia a livello di iperparametri che di valutazione del modello.

Come fatto in precedenza, il modello selezionato è stato confrontato con il modello che ha ottenuto la migliore accuratezza e quello che ha ottenuto il tempo di addestramento minore. I risultati ottenuti sono riportati in tabella 3.2.

Modello	Accuratezza	Tempo di addestramento
Tempo di addestramento minore	96.9%	1.06s
Accuratezza maggiore	98.0%	22.20s
Modello scelto	97.9%	1.16s

Tabella 3.2: Risultati ottenuti dalla fase di grid search

Anche in questo caso, come per il precedente, il modello che è stato selezionato rappresenta un compromesso tra accuratezza e tempo di addestramento. In particolare, perdendo lo 0.1% di accuratezza si è ottenuto un tempo di addestramento minore di circa 21 secondi.

I risultati ottenuti dalla fase di grid search hanno permesso di definire la struttura della rete neurale. In particolare, la rete neurale è composta da 1 layer di input, 1 layer nascosto e 1 layer di output.

Il layer di input è composto da 3 neuroni, uno per ogni componente principale ottenuta attraverso la PCA. Questo primo strato è stato definito in questo modo in quanto il dataset ottenuto attraverso la PCA è composto da 3 feature.

Il layer nascosto è composto da 10 neuroni, in cui la funzione di attivazione è la funzione ReLU 3.1a.

Il layer di output è lo stesso utilizzato per il modello addestrato con le feature selezionate manualmente, ovvero è composto da un solo neurone, in cui la funzione di attivazione è la funzione sigmoide 3.1c.

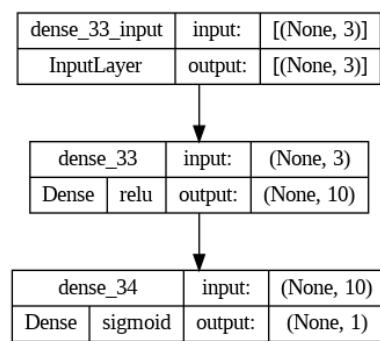


Figura 3.3: Struttura della rete neurale addestrata con PCA

Capitolo 4

Risultati

Prima di esporre i risultati ottenuti, è opportuno enunciare la seguente premessa. Considerando la natura del contesto, mirante alla classificazione di dati medici, si è convenuto di regolare manualmente il valore della soglia per la predizione del tumore. Tale decisione è stata presa al fine di minimizzare il numero di falsi negativi, ossia i casi in cui il modello erroneamente predice l'assenza di tumore quando invece è presente.

Per effettuare questa operazione, è stato selezionato il valore di soglia pari a 0.3, al fine di ridurre il numero di falsi negativi. Questa determinazione è stata adottata per conferire maggior rilevanza al valore di richiamo, che valuta l'efficacia del modello nell'individuare i veri positivi.

I classificatori addestrati sono stati valutati mediante l'utilizzo della porzione di test del dataset. Su questo insieme di dati sono state calcolate le seguenti metriche di valutazione:

- **Accuracy:** misura la frazione di esempi classificati correttamente.
- **Precision:** misura la frazione di esempi classificati come positivi che sono effettivamente positivi.
- **Recall:** misura la frazione di esempi positivi che sono stati classificati correttamente.
- **F1-score:** media armonica tra precisione e recall.

Oltre a tali metriche, sono state calcolate le matrici di confusione per ciascun modello e le rispettive curve ROC.

Inoltre, considerando le dimensioni moderate del dataset in esame (≤ 10000 esempi), è stato deciso di condurre una valutazione dei modelli utilizzando la tecnica della 10-fold stratified cross validation, al fine di ottenere i valori delle metriche mediante la media dei risultati e i relativi intervalli di confidenza.

Nelle successive sezioni verranno esposti i risultati ottenuti per ciascun modello, confrontando i valori delle metriche di valutazione e le curve ROC generate. I risultati saranno suddivisi in due sezioni, una per il confronto sul dataset le cui feature sono state selezionate manualmente, una per il confronto sul dataset le cui feature sono state selezionate con PCA.

4.1 Metriche di valutazione dataset_corr

Nella tabella 4.1 sono riportati i valori delle metriche di valutazione ottenuti per ciascun modello, calcolati sul test set il quale è composto dal 20% del dataset originale.

Modello	Accuratezza	Precisione	Richiamo	F1 score
SVM	0 %	0 %	0 %	0 %
Gaussian Naive Bayes	95 %	90 %	99 %	94 %
Rete neurale	98.93 %	98.52 %	99.10 %	98.81 %

Tabella 4.1: Risultati ottenuti dal modello addestrato

I risultati ottenuti rivelano prestazioni superiori per i modelli basati su una manipolazione geometrica dei dati, come la rete neurale e il Support Vector Machine (SVM), rispetto al modello fondato su una manipolazione probabilistica, come il Gaussian Naive Bayes.

Tale fenomeno può essere razionalizzato considerando che le distribuzioni delle caratteristiche del dataset non rispecchiano una distribuzione gaussiana, come supposto dal modello Gaussian Naive Bayes. Inoltre, la rete neurale e il SVM sono modelli intrinsecamente più complessi rispetto al Gaussian Naive Bayes, consentendo loro di catturare relazioni più intricate tra le caratteristiche e la variabile target.

In aggiunta, l'ottimo risultato osservato suggerisce una distinta separazione tra le due classi del dataset, suggerendo che i modelli sono capaci di generalizzare efficacemente.

Il comportamento osservato dalle metriche può essere visualizzato mediante le matrici di confusione, sulle quali le metriche presentate vengono calcolate, le quali sono riportate in figura 4.1a, 4.1b e 4.1c.

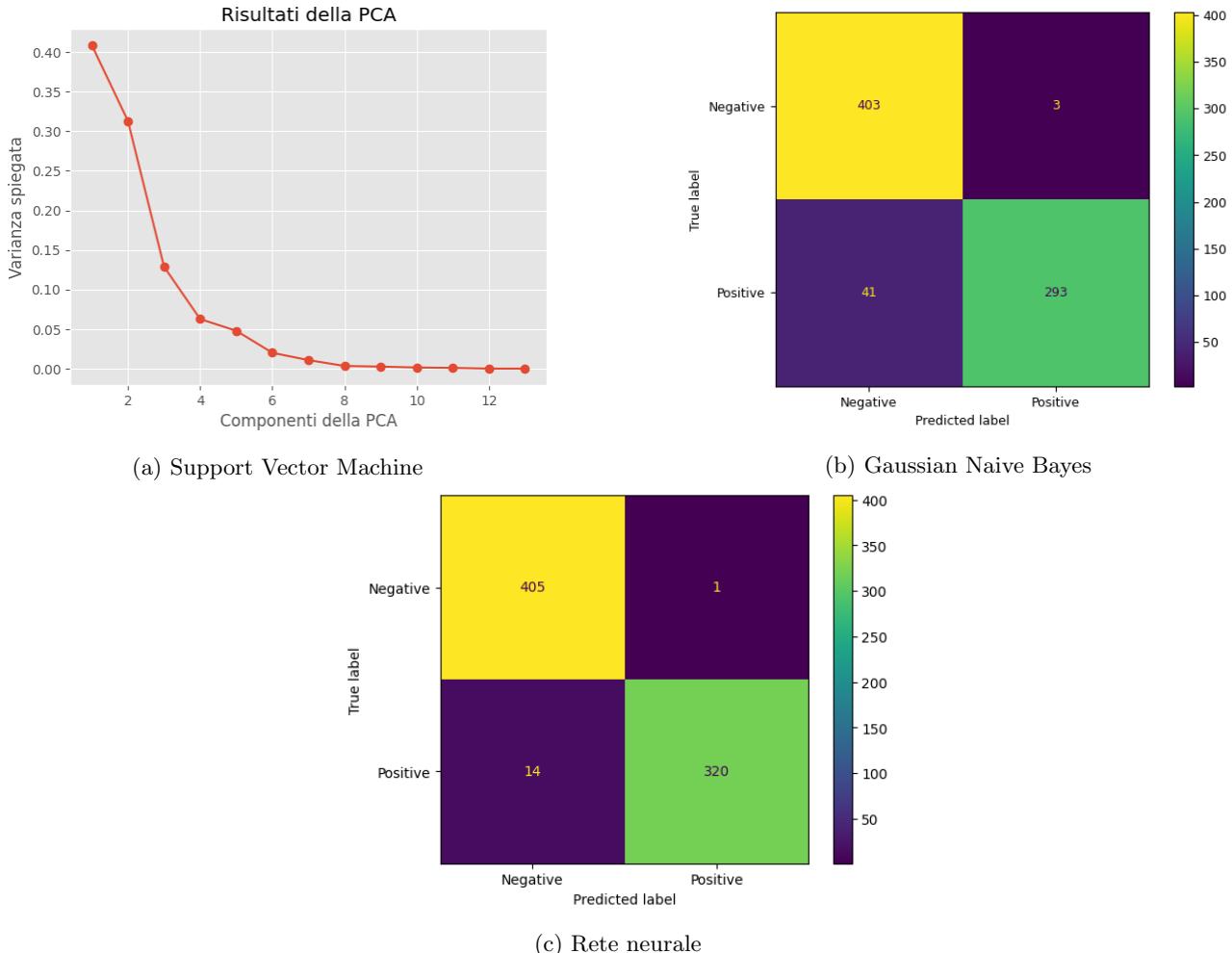


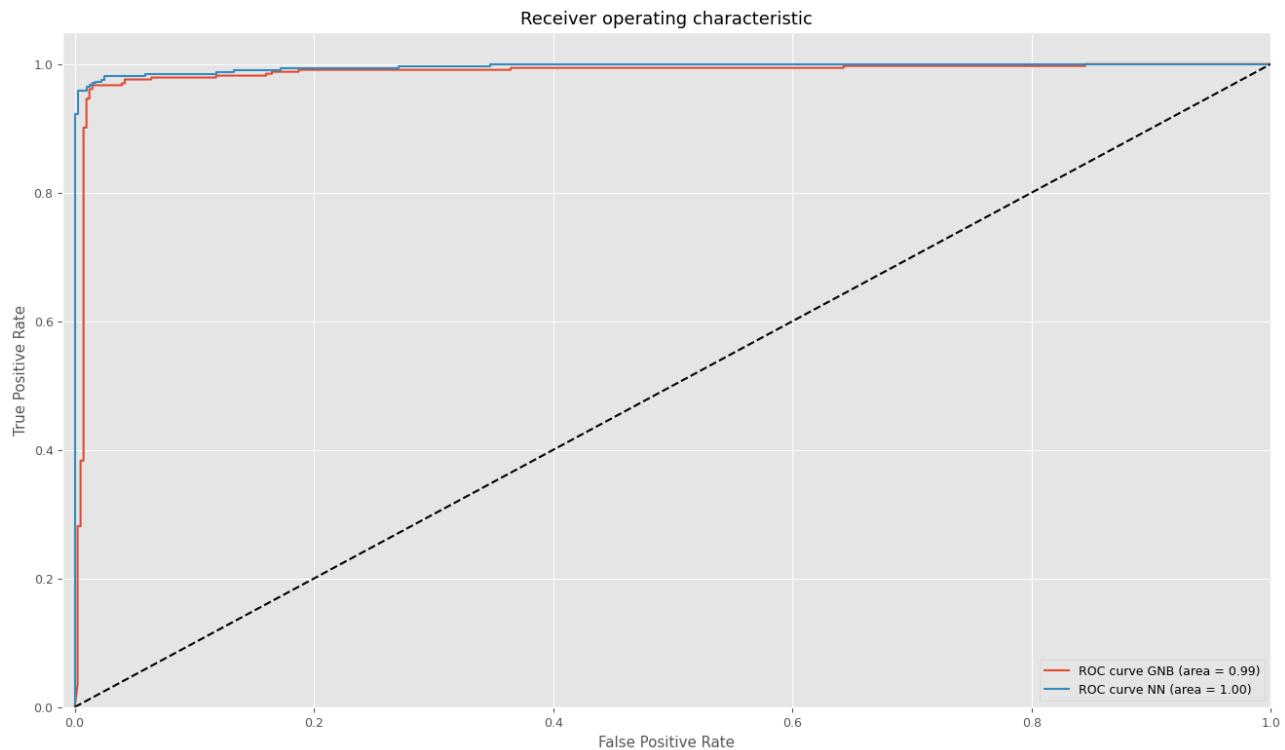
Figura 4.1: Matrici di confusione per i modelli addestrati su `dataset_corr` e `dataset_corr_std`

4.1.1 Curve ROC

In aggiunta alla valutazione delle performance tramite le metriche, si è deciso di confrontare i modelli attraverso le curve ROC, le quali permettono di confrontare i modelli in termini di trade-off tra tasso di veri positivi e tasso di falsi positivi.

Le curve ROC per i modelli addestrati sul dataset le cui feature sono state selezionate manualmente sono riportate in figura 4.2.

Le curve ROC permettono di confrontare i modelli addestrati anche con il classificatore casuale, il quale corrisponde alla retta $y = x$. Il grafico riportato in figura 4.2 mostra che la rete neurale e il Gaussian Naive Bayes hanno delle prestazioni molto simili tra loro, è quindi utile confrontare i due due tramite l'area sotto la curva ROC (AUC). L'area sotto la curva ROC per la rete neurale è pari a 1.00, mentre per il Gaussian Naive Bayes è pari a 0.99. Questi valori suggeriscono che la rete neurale è leggermente superiore al Gaussian Naive Bayes in termini di capacità di discriminazione tra le due classi.

Figura 4.2: Curve ROC per i modelli addestrati su `dataset_corr` e `dataset_corr_std`

4.1.2 10 fold stratified cross validation

Per valutare la stabilità dei modelli addestrati e date le dimensioni moderate del dataset, si è deciso di condurre una valutazione tramite la tecnica della 10-fold stratified cross validation. Tale tecnica permette di ottenere una stima più accurata delle performance del modello, riducendo l'effetto della variabilità dei dati.

In questo processo ogni modello che è stato addestrato è stato valutato attraverso le metriche di accuratezza, precisione, richiamo e F1 score. I risultati ottenuti dall'esecuzione della cross validation sono stati utilizzati per calcolare gli intervalli di confidenza al 90% delle metriche.

Per svolgere questa operazione è stato utilizzato il dataset completo, ovvero senza alcuna suddivisione in training set e test set.

I risultati ottenuti sono stati riportati sia in forma numerica che grafica per facilitare la comprensione. In particolare, i valori delle metriche ottenuti sono stati riportati in figura 4.3 e nella tabella 4.2.

Modello	Accuratezza	Precisione	Richiamo	F1 score
SVM	0 %	0 %	0 %	0 %
Gaussian Naive Bayes	95 %	90 %	99 %	94 %
Rete neurale	98.27 %	97.99 %	98.15 %	98.06 %

(a) Valore medio delle metriche ottenute dalla cross validation

Modello	Accuratezza	Precisione	Richiamo	F1 score
SVM	[[]]	[[]]	[[]]	[[]]
Gaussian Naive Bayes	[[]]	[[]]	[[]]	[[]]
Rete neurale	[97.98%, 98.55%]	[97.47%, 98.52%]	[97.49%, 98.81%]	[97.75%, 98.38%]

(b) Intervalli di confidenza delle metriche ottenute dalla cross validation

Tabella 4.2: Risultati ottenuti dalla cross validation

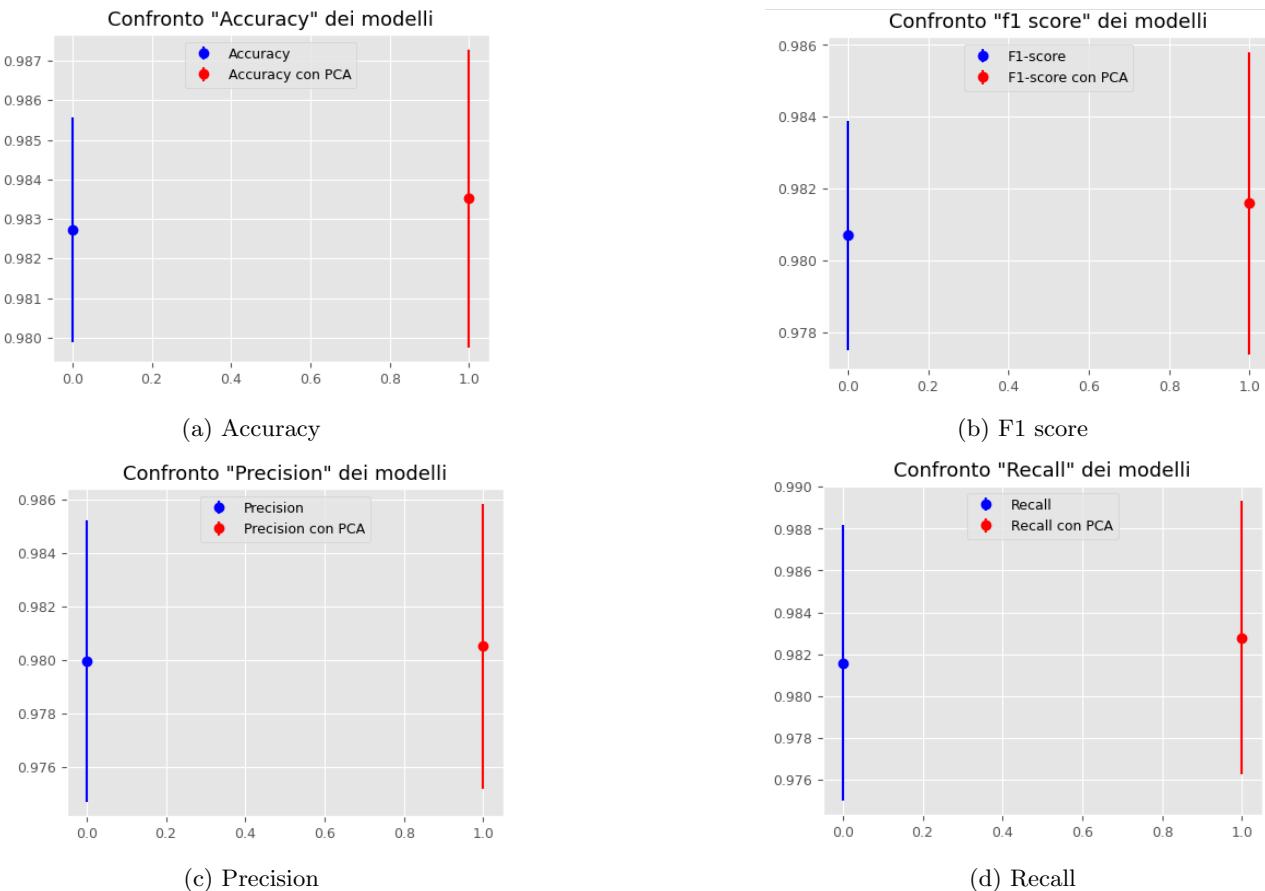


Figura 4.3: Intervalli di confidenza ottenuti dai modelli addestrati con e senza PCA

4.2 Metriche di valutazione dataset_pca

Un ragionamento analogo a quello svolto nella sezione 4.1 può essere applicato ai modelli addestrati sul dataset le cui feature sono state selezionate attraverso Principal Component Analysis (PCA). I risultati ottenuti sono riportati nella tabella 4.3.

Modello	Accuratezza	Precisione	Richiamo	F1 score
SVM	0 %	0 %	0 %	0 %
Gaussian Naive Bayes	96 %	96 %	96 %	96 %
Rete neurale	98.27 %	97.92 %	98.21 %	98.07 %

Tabella 4.3: Risultati ottenuti dal modello addestrato

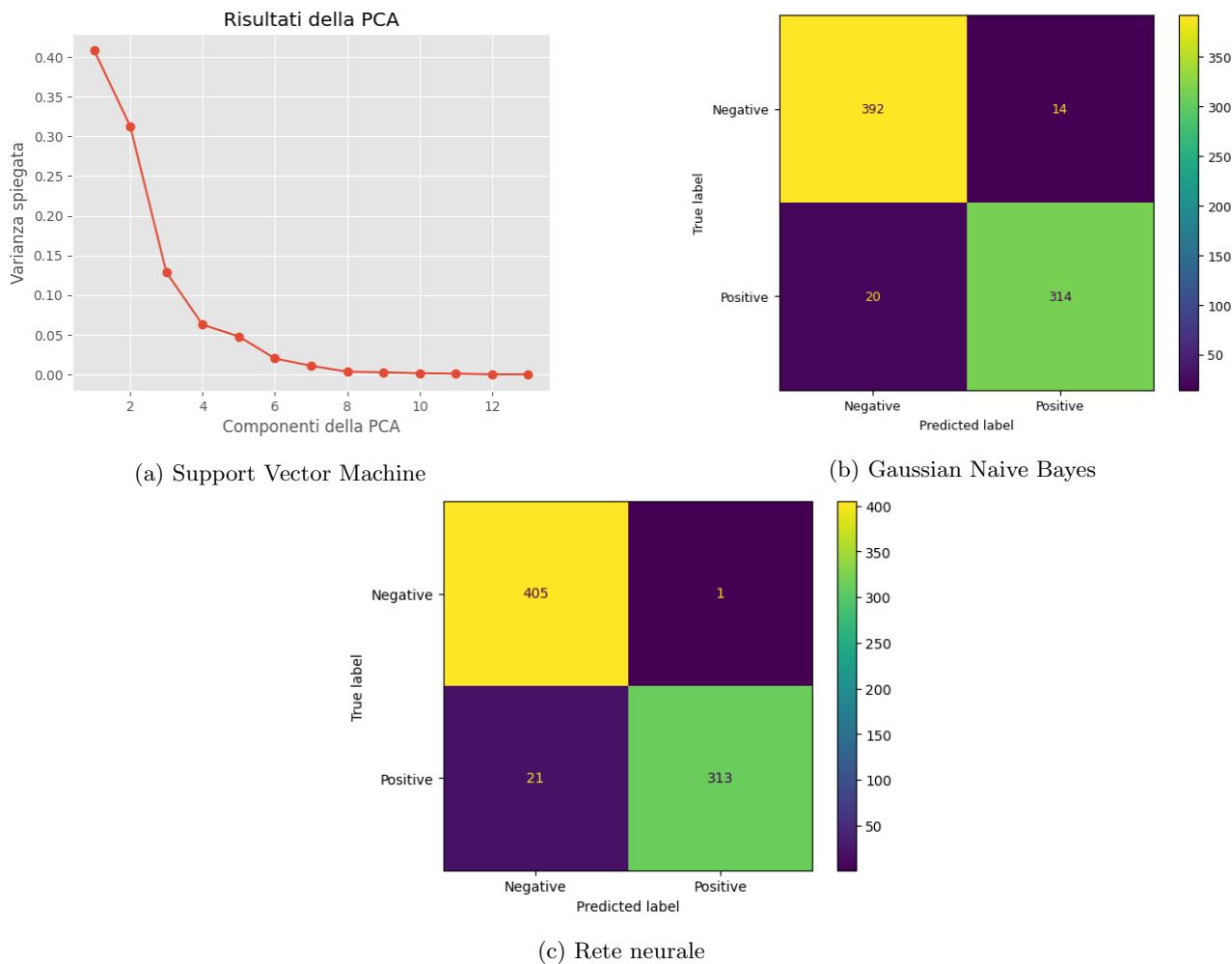
I risultati ottenuti rivelano prestazioni molto simili con quelle ottenute per il dataset le cui feature sono state selezionate manualmente.

Come fatto in precedenza, è possibile visualizzare il comportamento dei modelli mediante le matrici di confusione, le quali sono riportate in figura 4.4a, 4.4b e 4.4c.

Inoltre, anche in questo caso, è possibile confrontare i modelli attraverso le curve ROC, le quali sono riportate in figura 4.5.

Utilizzando la PCA per la creazione del dataset nelle curve ROC si può notare una maggiore distanza tra la curva ROC della rete neurale e quella del Gaussian Naive Bayes. Inoltre, calcolando l'area sotto la curva ROC (AUC) si può notare come la rete neurale sia leggermente superiore al Gaussian Naive Bayes, con un valore di 0.99 per la rete neurale e di 0.98 per il Gaussian Naive Bayes. Il che suggerisce che questi classificatori sono leggermente peggiori rispetto a quelli addestrati sul dataset le cui feature sono state selezionate manualmente.

Infine, per restare coerenti con quanto fatto in precedenza, è possibile valutare la stabilità dei modelli addestrati tramite la tecnica della 10-fold stratified cross validation. I risultati ottenuti sono riportati in figura 4.6 e nella tabella 4.4.

Figura 4.4: Matrici di confusione per i modelli addestrati su `dataset_pca` e `dataset_pca_std`

Modello	Accuratezza	Precisione	Richiamo	F1 score
SVM	0 %	0 %	0 %	0 %
Gaussian Naive Bayes	96 %	96 %	96 %	96 %
Rete neurale	98.35 %	98.05 %	98.27 %	98.15 %

(a) Valore medio delle metriche ottenute dalla cross validation

Modello	Accuratezza	Precisione	Richiamo	F1 score
SVM	[]	[]	[]	[]
Gaussian Naive Bayes	[]	[]	[]	[]
Rete neurale	[97.97%, 98.72%]	[97.51%, 98.58%]	[97.62%, 98.93%]	[97.73%, 98.58%]

(b) Intervalli di confidenza delle metriche ottenute dalla cross validation

Tabella 4.4: Risultati ottenuti dalla cross validation

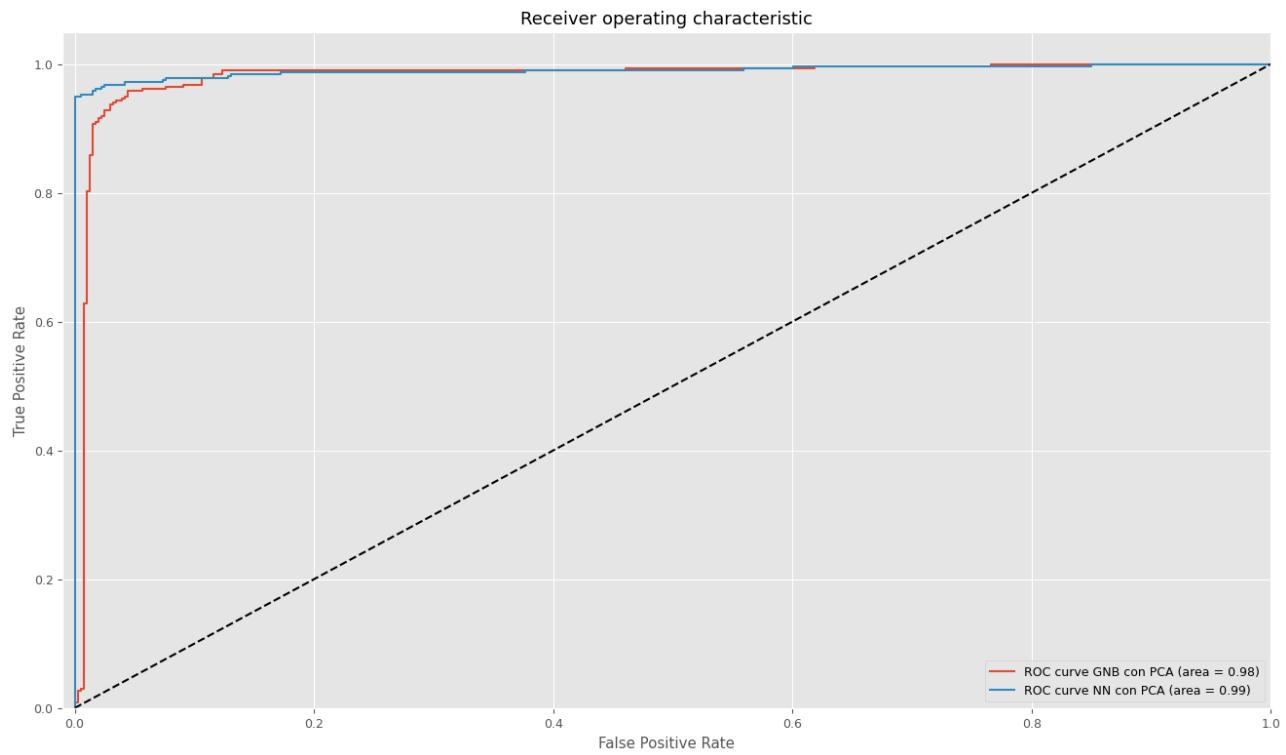


Figura 4.5: Curve ROC per i modelli addestrati su dataset_pca e dataset_pca_std

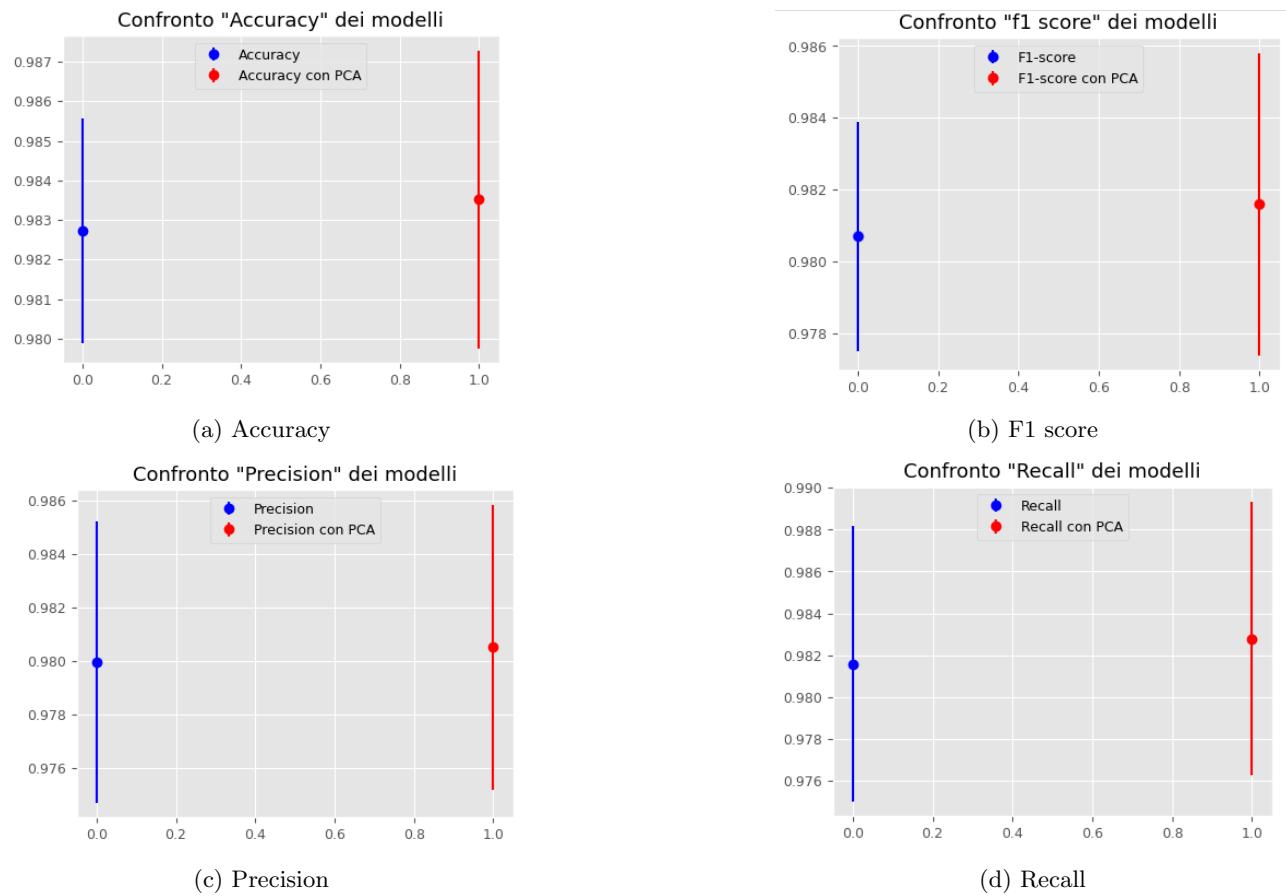


Figura 4.6: Intervalli di confidenza ottenuti dai modelli addestrati con e senza PCA

Bibliografia

- [1] Namita Aggarwal e RK Agrawal. “First and second order statistics features for classification of magnetic resonance brain images”. In: (2012).