Classificatori

CORSO DI BIG DATA

a.a. 2022/2023

Prof. Roberto Pirrone

LABORATORIO DI INTERAZIONE UOMO-MACCHINA
CHILAB

Sommario

- Generalità
- Selezione delle feature
- Decision Tree
- Random Forests
- Classificatori probabilistici
  - Regressione logistica
  - Naive Bayes
- Support Vector Machine
- Valutazione della bontà della classificazione

Generalità

- Dato un insieme di dati di addestramento, ciascuno associato ad una «etichetta» che individua l'appartenenza del dato ad una classe, *la classificazione consiste nel predire il valore dell'etichetta per dati di test mai visti dall'algoritmo*

- È una classe di algoritmi di apprendimento supervisionati
  - Le etichette provengono da una associazione artificiale (dipendente dall'applicazione) ai dati e non dalla naturale tendenza di questi ultimi a formare cluster
  - È, forse, la tipologia di algoritmo di ML più comune

Generalità

- In generale, dato un insieme di n punti in $\mathbb{R}^d$ appartenenti ad un data set $\mathcal{D}$, questi vengono associati ad un insieme di etichette in $\{1, \ldots, k\}$
  - Spesso la classificazione è binaria: {0, 1} ovvero {-1, 1}
- Due modalità di funzionamento
  - Predizione esplicita dell'etichetta
  - Score numerico (probabilità) di appartenenza del punto ad una certa classe

Selezione delle feature

- Filtri: indicatori numerici della rilevanza delle feature

- Modelli «wrapped»: un algoritmo di classificazione viene usato per valutare la performance su un sotto-insieme di feature e quindi «avvolge» il vero e proprio algoritmo di classificazione in uno schema di ricerca delle feature rilevanti

- Modelli «embedded»: l’algoritmo stesso fornisce indicazioni sulle feature rilevanti e, dopo averle individuate, viene riaddestrato solo su di esse

Selezione delle feature

- Filtri
  - Gini index

$$G(v_i) = 1 - \sum_{j=1}^{k} p_j^2$$

Valore i-esimo dell'attributo categorico a *r* valori

Frazione dei punti che hanno il valore v_i nella classe *j*

$$G = \sum_{i=1}^{r} n_i G(v_i)/n$$

Frazione dei punti che hanno il valore v_i

  - Entropia

$$E(v_i) = -\sum_{j=1}^{k} p_j \log_2(p_j), \quad E = \sum_{i=1}^{r} n_i E(v_i)/n$$

Selezione delle feature

- Filtri
  - Fisher score

$$F = \frac{\sum_{j=1}^{k} p_j \left(\mu_j - \mu\right)^2}{\sum_{j=1}^{k} p_j \sigma_j^2}$$

Per ogni feature:
p_j → frazione dei dati appartenete alla classe *j*
μ_j → media dei dati nella classe *j*
σ_j → dev. standard dei dati nella classe *j*

  - Fisher Linear Discriminant
    - Generalizzazione del Fisher Score per combinazioni lineari di feature
    - Tende a trovare, in forma supervisionata, la direzione di massima variazione delle feature e, per contro, l'iperpiano perpendicolare che separa meglio le classi rispetto alle feature stesse in modo tale che il rapporto *Inter-class/Intra-class* risulti massimizzato

Selezione delle feature

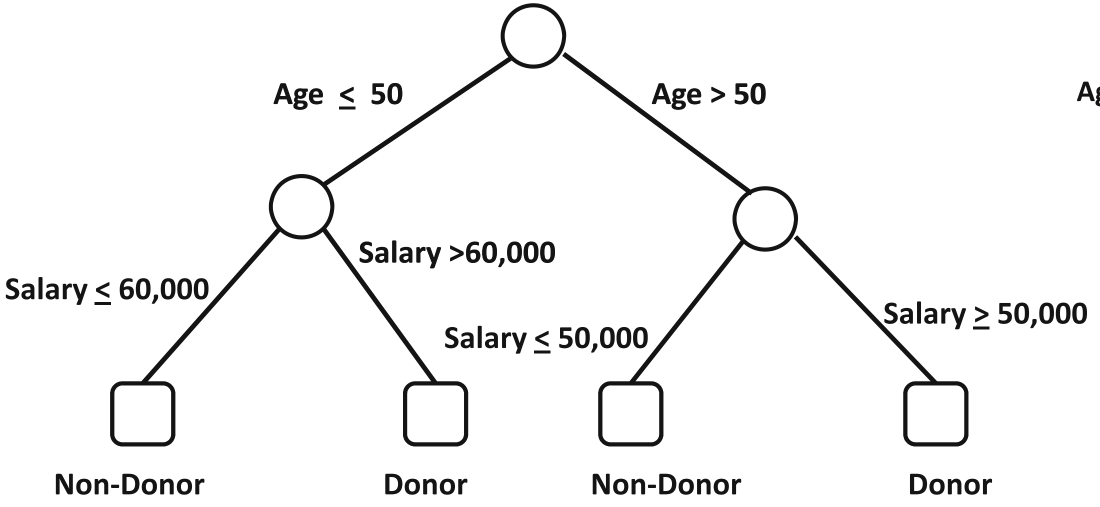
- Modelli «wrapped»
  - Si parte da un insieme di feature $F = \{\}$
  - Si aggiungono feature a F e si testa l'accuratezza dell'algoritmo $\mathcal{A}$ per accettare l'aggiunta delle nuova feature a F
  - L'incremento di F si può fare secondo diverse strategie
    - Random
    - Aggiunta della feature con maggior potere discriminativo rispetto ad un criterio di filtro

Decision Tree

- Il data set viene suddiviso ricorsivamente in parti più piccole sulla base del discrimine sui valori degli attributi

- I nodi foglia dell’albero vengono attribuiti alla classe dominante
  - Gerarchico similmente al clustering
  - Split univariato → decisione su un solo attributo
  - Split multivariato → decisione su un insieme di attributi

Decision tree



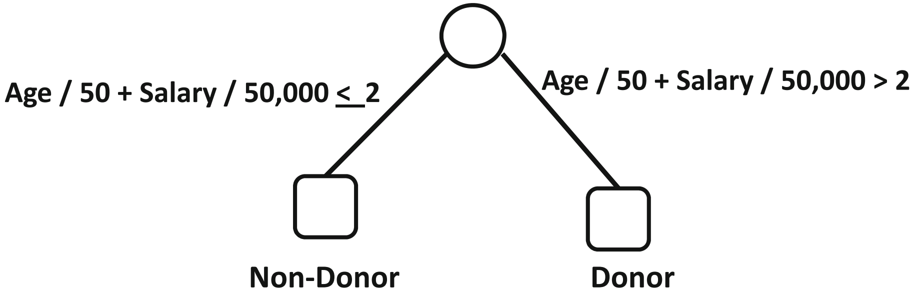
Name	Donor?
Nancy	N
Jim	N
Jane	N
Steve	N

Name	Donor?
Allen	Y

Name	Donor?
Mary	N

Name	Donor?
Peter	Y
Sayani	Y
Lata	Y
Victor	Y
Dale	Y

(a) Univariate split



Name	Donor?
Nancy	N
Jim	N
Jane	N
Steve	N
Mary	N

Name	Donor?
Allen	Y
Peter	Y
Sayani	Y
Lata	Y
Victor	Y
Dale	Y

(b) Multivariate split

Decision tree

Algorithm *GenericDecisionTree*(Data Set: $\mathcal{D}$)
begin
  Create root node containing $\mathcal{D}$;
  repeat
    Select an eligible node in the tree;
    Split the selected node into two or more nodes
      based on a pre-defined split criterion;
  until no more eligible nodes for split;
  Prune overfitting nodes from tree;
  Label each leaf node with its dominant class;
end

- Split binario
- Split a *r* vie per attributi categorici
- Split binario per attributi categorici binarizzati
- Error rate: la frazione di elementi che non appartengono alla classe dominante
- Gini index
- Entropia

$$G(S) = 1 - \sum_{j=1}^{k} p_j^2, \quad \text{Gini-Split } (S \Rightarrow S_1 \ldots S_r) = \sum_{i=1}^{r} \frac{|S_i|}{|S|} G(S_i)$$

Suddivisione del data set in *r* sottoinsiemi
per uno split a *r* vie → *si sceglie lo split con Gini index più basso*

Decision Tree

- In genere i nodi vicini ai nodi foglia lavorano su pochi dati e sono proni al rumore nell’applicare lo split
  - Tendenza ad esibire overfitting
  - Si utilizzano tecniche di stop che prediligono alberi poco profondi
- Si utilizzano tecniche di pruning dei nodi foglia che vanno in overfit
  - Si valida l’eventuale incremento dell’accuracy su un validation set espunto dai dati di addestramento

Random Forests

- È un ensemble di classificatori decision tree
  - Nei metodi di ensemble, più classificatori vengono addestrati sul data set e i risultati sono combinati tra loro per ottenere una predizione più robusta
- Uso del «bagging»
  - Tecnica per creare un ensemble di classificatori i.i.d. in modo tale da ridurre la varianza della stima da σ^2 a σ^2/k
  - Si generano k data set tramite campionamento con rimpiazzo: i nuovi data set contengono duplicati
  - Si addestrano i classificatori e la predizione è data dalla maggioranza o dalla media dei voti espressi da ciascuno su ogni campione

Random Forests

- I nodi più elevati della gerarchia sono sostanzialmente invarianti
- È necessario diversificare gli alberi per aumentare la capacità di predizione
- L’insieme dei decision tree usa un criterio random per lo split nei diversi alberi dell’ensemble

Random Forests

- Random split selection

  - Forest-RI (Random Input): Un sottoinsieme casuale di *q* feature viene estratto per lo split

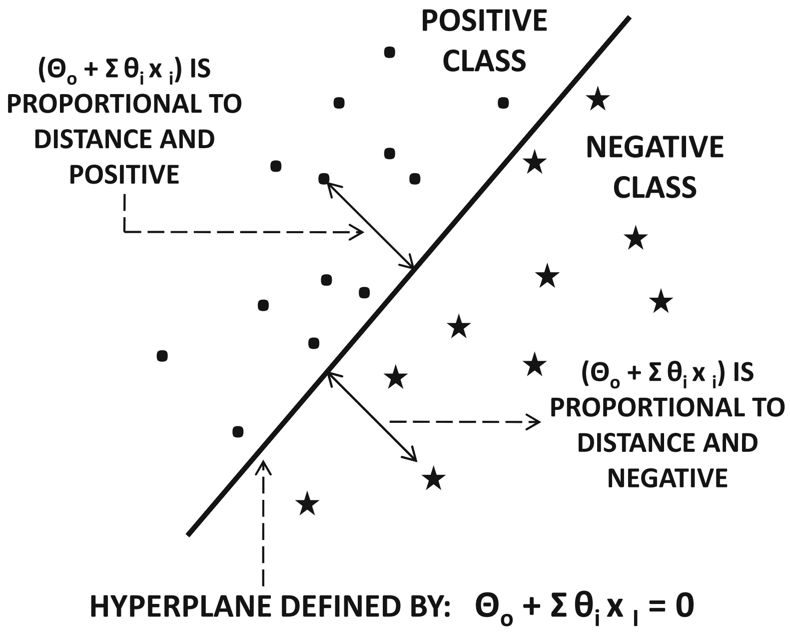
  - Forest-RC (Random Combination): un sottoinsieme *L* di feature viene estratto e si creano *q* combinazioni lineari che vengono usate come feature multivariate per lo split

Regressione logistica

$$P(C=+1|\bar{X}) = \frac{1}{1+e^{-\left(\theta_0+\sum_{i=1}^{d}\theta_i x_i\right)}}$$

$$P(C=-1|\bar{X}) = \frac{1}{1+e^{\left(\theta_0+\sum_{i=1}^{d}\theta_i x_i\right)}}$$

$P(C = +1) \equiv P(C = -1) = 0.5 \rightarrow$ $$\theta_0 + \sum_{i=1}^{d}\theta_i x_i = 0$$



Regressione logistica

$$\frac{\partial \mathcal{L}\mathcal{L}(\bar{\Theta})}{\partial \theta_i} = \sum_{\bar{X}_k \in \mathcal{D}_+} \frac{x_k^i}{1+e^{\left(\theta_0+\sum_{i=1}^d \theta_i x_i\right)}} - \sum_{\bar{X}_k \in \mathcal{D}_-} \frac{x_k^i}{1+e^{-\left(\theta_0+\sum_{i=1}^d \theta_i x_i\right)}}$$

$$= \sum_{\bar{X}_k \in \mathcal{D}_+} P\left(\overline{X_k} \in \mathcal{D}_-\right) x_k^i - \sum_{\bar{X}_k \in \mathcal{D}_-} P\left(\overline{X_k} \in \mathcal{D}_+\right) x_k^i$$

$$\theta_i \leftarrow \theta_i + \alpha \left(\sum_{\overline{X_k} \in \mathcal{D}_+} P\left(\overline{X_k} \in \mathcal{D}_-\right) x_k^i - \sum_{\overline{X_k} \in \mathcal{D}_-} P\left(\overline{X_k} \in \mathcal{D}_+\right) x_k^i \right)$$

Addestramento con gradient ascent e termine di regolarizzazione

$$-\lambda \sum_{i=1}^{d} \theta_i^2/2$$

Naive Bayes

$$P(C=c|x_1=a_1,\dots x_d=a_d)=\frac{P(C=c)P(x_1=a_1,\dots x_d=a_d|C=c)}{P(x_1=a_1,\dots x_d=a_d)}$$

$$\propto P(C=c)P(x_1=a_1,\dots x_d=a_d|C=c)$$

Assunzione «naive» ovvero di indipendenza statistica degli attributi

$$P(x_1=a_1,\dots x_d=a_d|C=c)=\prod_{j=1} P(x_j=a_j|C=c)$$

Distribuzione di Bernoulli sui dati

Addestramento con EM

In fase di test fornisce probabilità

$$P(C=c|x_1=a_1,\dots x_d=a_d)\propto P(C=c)\prod_{j=1}^{d} P(x_j=a_j|C=c)$$

Frazione dei campioni che hanno attributo a_j e classe c

$$P(x_j=a_j|C=c)=\frac{q(a_j,c)+\alpha}{r(c)+\alpha\cdot m_j}$$

Laplacian smoothing: m_j è il numero di valori distinti di a_j

La probabilità tende a $1/m_j$ se $r(c)$=0

Frazione dei campioni in classe c

Support Vector Machines

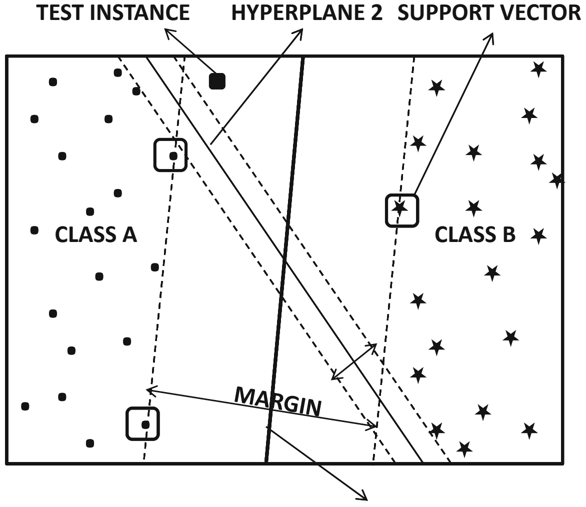
Ricerco il *massimo margine*, cioè la massima distanza tra due iperpiani paralleli che contengono alcune istanze di entrambe le classi ovvero i *support vectors*

$$\overline{W} \cdot \overline{X_i} + b \geq 0 \quad \forall i : y_i = +1$$

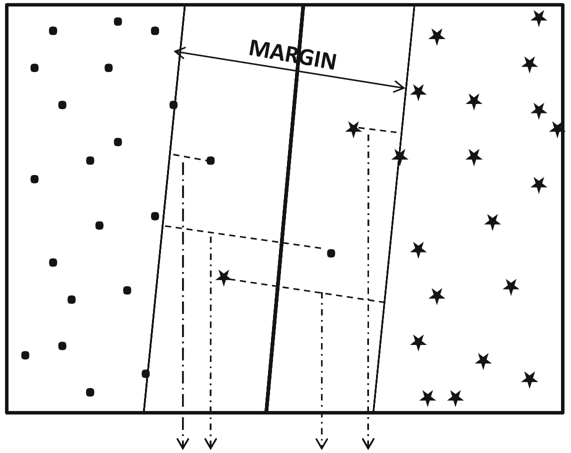
$$\overline{W} \cdot \overline{X_i} + b \leq 0 \quad \forall i : y_i = -1$$

Con un apposito scaling di $\overline{W}$ e b :

$$\begin{cases} \overline{W} \cdot \overline{X_i} + b \geq +1 \forall i : y_i = +1 \\ \overline{W} \cdot \overline{X_i} + b \leq -1 \forall i : y_i = -1 \end{cases} \Rightarrow y_i(\overline{W} \cdot \overline{X_i} + b) \geq +1, \forall i$$

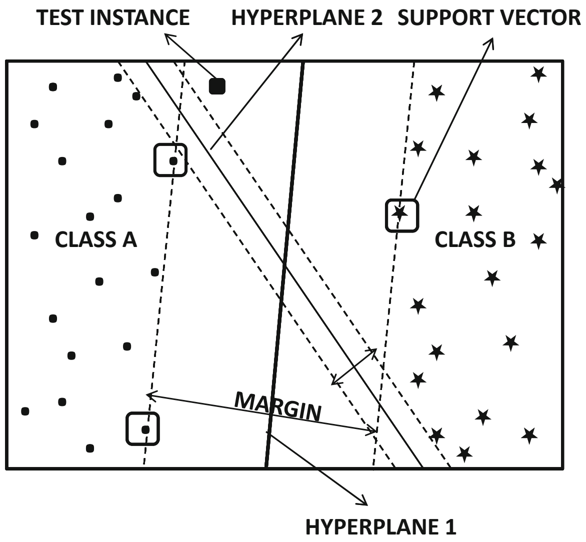


(a) Hard separation

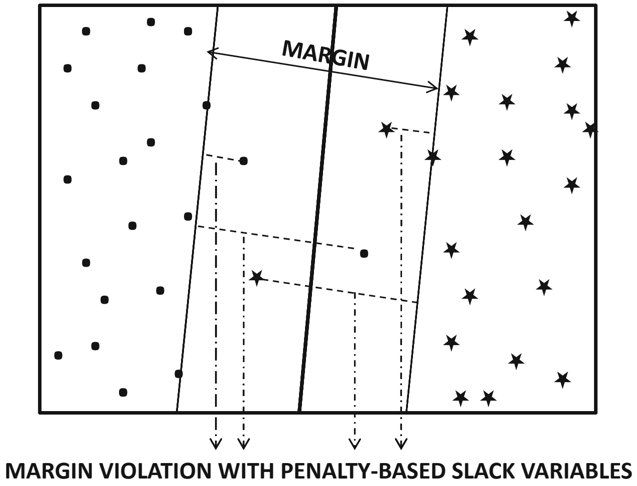


(b) Soft separation

Support Vector Machines



(a) Hard separation



(b) Soft separation

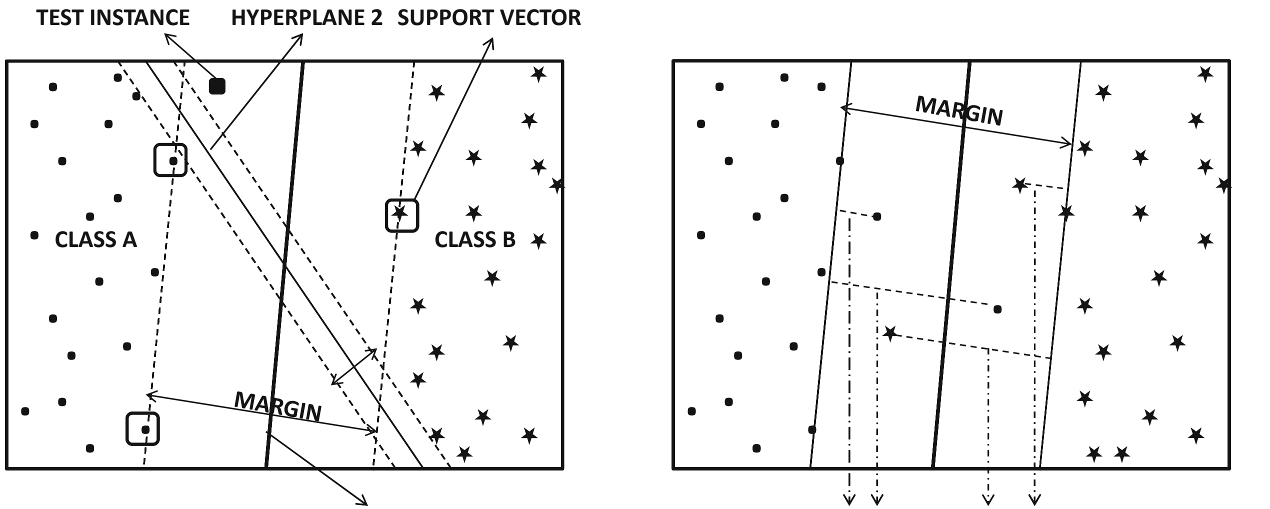
$$\text{distanza iperpiani}: \; 2/\|\overline{W}\|$$

$$\text{funzione obiettivo}: \; O = \|\overline{W}\|^2/2$$

$$L_P = \frac{\|\overline{W}\|^2}{2} - \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \left[y_i(\overline{W} \cdot \overline{X_i} + b) - 1 \right], \; \lambda_i \geq 0$$

$$\text{support vectors}: \; \lambda_i \left[y_i(\overline{W} \cdot \overline{X_i} + b) - 1 \right] = 0$$

Support Vector Machines



(a) Hard separation (b) Soft separation

$$L_P = \frac{\|\overline{W}\|^2}{2} - \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \left[y_i(\overline{W} \cdot \overline{X_i} + b) - 1 \right], \ \lambda_i \geq 0$$

$$\text{Problema duale di massimizzazione} : O^* = \frac{\|\overline{W}*\|^2}{2} \geq L_D^* = \max_{\lambda \geq 0} \min_{\overline{W}, b} L_P$$

Si mostra che i support vectors sono quelli per cui sono soddisfatte le condizioni KKT :

$(\overline{W}^*, \lambda^*, b^*)$ è un *punto sella* di $L_D(\overline{W}, \lambda, b)$

Support Vector Machines

$$\nabla L_P = \nabla \frac{\|\overline{W}\|^2}{2} - \nabla \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \left[y_i(\overline{W} \cdot \overline{X_i} + b) - 1 \right] = 0$$

$$\overline{W} = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i y_i \overline{X}_i, \quad \sum_{i=1}^{n} \lambda_i y_i = 0$$

$\partial L_P / \partial b = 0$

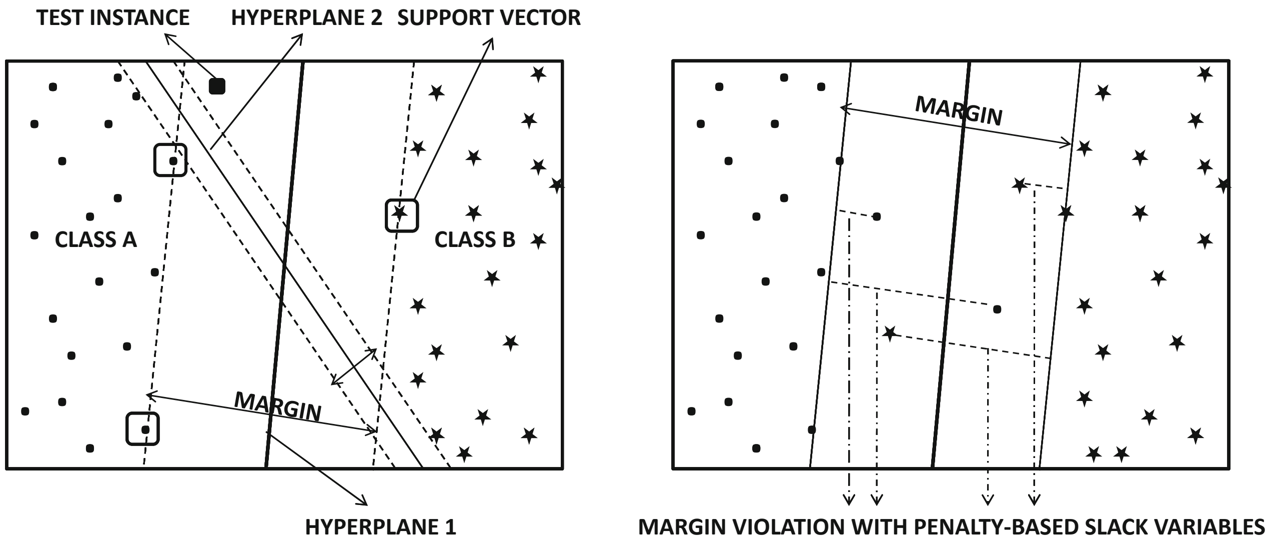
formulazione del problema duale di massimizzazione :

$$L_D = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \lambda_i \lambda_j y_i y_j \overline{X_i} \cdot \overline{X_j}$$

Si ottiene sostituendo l'espressione di *W* in L_P

addestramento lungo il gradiente :

$$\frac{\partial L_D}{\partial \lambda_i} = 1 - y_i \sum_{j=1}^{n} y_j \lambda_j \overline{X_i} \cdot \overline{X_j}, \quad (\lambda_1 \ldots \lambda_n) \leftarrow (\lambda_1 \ldots \lambda_n) + \alpha \left(\frac{\partial L_D}{\partial \lambda_1} \ldots \frac{\partial L_D}{\partial \lambda_n} \right)$$



(a) Hard separation (b) Soft separation

Support Vector Machines

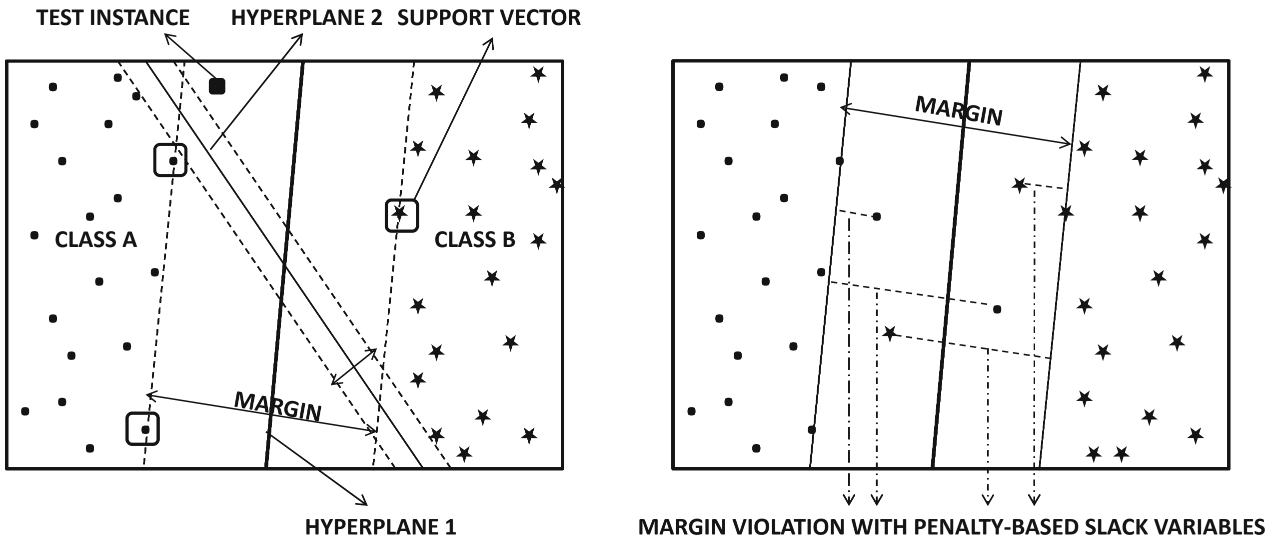
I dati non sono separabili: ammetto delle *violazioni con penalità* sulla funzione obiettivo

$$\begin{cases} \overline{W} \cdot \overline{X_i} + b \geq +1 - \xi_i \ \forall i : y_i = +1 \\ \overline{W} \cdot \overline{X_i} + b \leq -1 + \xi_i \ \forall i : y_i = -1 \end{cases}, \ \xi_i \geq 0 \ \forall i$$

Slack variables

funzione obiettivo :

$$O = \frac{\|\overline{W}\|^2}{2} + C \sum_{i=1}^{n} \xi_i$$



(a) Hard separation (b) Soft separation

Lagrange penalty :

$\partial L_P / \partial \xi_i = 0 \rightarrow \xi_i (C - \lambda_i - \beta_i) = 0 \rightarrow (C - \lambda_i - \beta_i) = 0, (C - \lambda_i) = \beta_i >= 0 \rightarrow$

$0 < \lambda_i < C$ per i support vectors ($\xi_i = 0$)

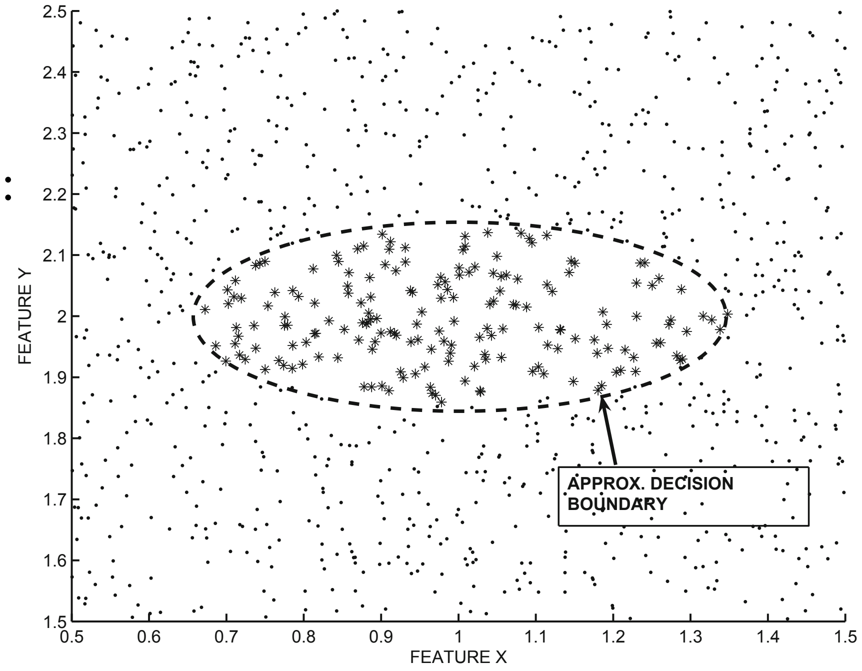
$$L_P = \frac{\|\overline{W}\|^2}{2} + C \sum_{i=1}^{n} \xi_i - \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \left[y_i (\overline{W} \cdot \overline{X_i} + b) - 1 + \xi_i \right] - \sum_{i=1}^{n} \beta_i \xi_i$$

Support Vector Machines

kernel trick per superfici di separazione non lineari :

$$L_D = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i - \frac{1}{2} \cdot \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \lambda_i \lambda_j y_i y_j K(\overline{X_i}, \overline{X_j})$$

Function	Form
Gaussian radial basis kernel	$K(\overline{X_i}, \overline{X_j}) = e^{-\|\overline{X_i} - \overline{X_j}\|^2 / 2\sigma^2}$
Polynomial kernel	$K(\overline{X_i}, \overline{X_j}) = (\overline{X_i} \cdot \overline{X_j} + c)^h$
Sigmoid kernel	$K(\overline{X_i}, \overline{X_j}) = \tanh(\kappa \overline{X_i} \cdot \overline{X_j} - \delta)$



Valutazione della bontà della classificazione

$$ACC = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{C} \sum_{x \in C_k} I(C(x) \equiv C_k), \quad I = \begin{cases} 0, & C(x) \neq C_k \\ 1, & C(x) = C_k \end{cases}$$

$$bACC = \frac{1}{C} \sum_{k=1}^{C} \frac{1}{|C_k|} \sum_{x \in C_k} I(C(x) \equiv C_k)$$

Valutazione della bontà della classificazione

Predizione → Reference ↓	C_i	Altre classi
C_i	TP_i	FN_i
Altre classi	FP_i	TN_i

$$P_i = \frac{TP_i}{TP_i + FP_i}$$

$$R_i = \frac{TP_i}{TP_i + FN_i}$$

$$F_1 = 2\frac{P_i \cdot R_i}{P_i + R_i}$$

$$P_{\text{micro}} = \frac{\sum_{i=1}^{C} TP_i}{\sum_{i=1}^{C} TP_i + FP_i}$$

$$R_{\text{micro}} = \frac{\sum_{i=1}^{C} TP_i}{\sum_{i=1}^{C} TP_i + FN_i}$$

$$F_{1\text{micro}} = 2\frac{P_{\text{micro}} \cdot R_{\text{micro}}}{P_{\text{micro}} + R_{\text{micro}}}$$

$$P_{\text{macro}} = \frac{1}{C}\sum_{i=1}^{C} \frac{TP_i}{TP_i + FP_i} = \frac{\sum_{i=1}^{C} P_i}{C}$$

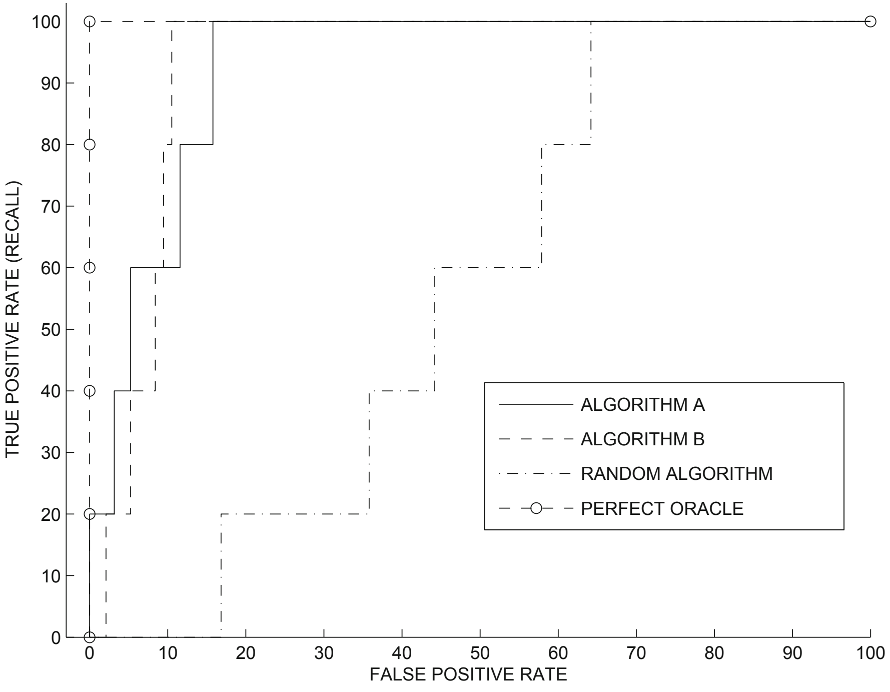
$$R_{\text{macro}} = \frac{1}{C}\sum_{i=1}^{C} \frac{TP_i}{TP_i + FN_i} = \frac{\sum_{i=1}^{C} R_i}{C}$$

$$F_{1\text{macro}} = 2\frac{P_{\text{macro}} \cdot R_{\text{macro}}}{P_{\text{macro}} + R_{\text{macro}}}$$

Valutazione della bontà della classificazione

$$ROC(t) \propto FPR(t) \text{ vs. } TPR(t)$$

$$TPR(t) \equiv Recall(t), FPR(t) = \frac{FP(t)}{FP(t) + TN(t)}$$



(a) ROC

AUC, Area Under the Curve, tende a 1 per buona classificazione

Per i problemi multi-classe si possono tracciare più curve, una per singola classe, e calcolare l'AUC media.