

## ■ Dati e Pattern

- Numerici, Categorici, Sequenze

## ■ Problemi di Learning

- Classificazione
- Regressione
- Clustering
- Riduzione Dimensionalità
- Representation Learning

## ■ Tipi di Learning

- Supervisionato, Non supervisionato
- Batch, Incrementale, Naturale
- Reinforcement Learning

## ■ Training e Valutazione Prestazioni

- Funzione Obiettivo, Parametri, Iperparametri
- Misura delle Prestazioni
- Training, Validation, Test
- Convergenza, Generalizzazione e Overfitting

- I dati sono un ingrediente fondamentale del machine learning, dove il comportamento degli algoritmi **non è pre-programmato ma appreso dai dati stessi**.

- Termini come **Data Science**, **Data Mining**, **Big Data** enfatizzano il ruolo dei dati.

- Utilizzeremo spesso il termine **Pattern** per riferirci ai dati

- Pattern può essere tradotto in italiano in vari modi: *forma*, *campione*, *esempio*, *modello*, ecc. [meglio non tradurlo].

- S. Watanabe definisce un pattern come l'opposto del caos e come un'entità vagamente definita cui può essere dato un nome.

- Ad esempio un pattern può essere un volto, un carattere scritto a mano, un'impronta digitale, un segnale sonoro, un frammento di testo, l'andamento di un titolo di borsa.

- **Pattern Recognition** è la disciplina che studia il riconoscimento dei pattern (non solo con tecniche di learning ma anche con algoritmi pre-programmati). L'intersezione con il Machine Learning è molto ampia.

# Tipi di Pattern

# Sequenze e altri dati strutturati

- **Numerici**: valori associati a caratteristiche misurabili o conteggi.

- Tipicamente continui (ma anche discreti, es. interi), in ogni caso soggetti a ordinamento.
- Rappresentabili naturalmente come vettori numerici nello spazio multidimensionale.
- L'estrazione di caratteristiche da segnali (es., immagini, suoni) produce vettori numerici detti anche **feature vectors**.
- Es. Persona: [altezza, circonferenza toracica, circonferenza fianchi, lunghezza del piede]
- Principale tipologia di dati considerata in questo corso.

- **Categorici**: valori associati a caratteristiche qualitative e alla presenza/assenza di una caratteristica (yes/no value).

- Non «semanticamente» mappabili in valori numerici.
- Es. Persona: [sesso, maggiorenne, colore occhi, gruppo sanguigno].
- Talvolta soggetti a ordinamento (ordinali): es. temperatura ambiente: *alta*, *media* o *bassa*.
- Normalmente gestiti da sistemi a regole e alberi di classificazione.
- Molto utilizzati nell'ambito del **data mining**, spesso insieme a dati numerici (mixed).

- **Sequenze**: pattern sequenziali con relazioni spaziali o temporali.

- Es. uno **stream audio** (sequenza di suoni) corrispondente alla pronuncia di una parola, una **frase** (sequenza di parole) in linguaggio naturale, un **video** (sequenza di frame), l'**andamento di un titolo di borsa** (sequenza temporale del prezzo di chiusura).

- Spesso a lunghezza variabile

- La posizione nella sequenza e le relazioni con predecessori e successori sono importanti.

- Critico trattare sequenze come pattern numerici.

- Allineamento spaziale/temporale, e «memoria» per tener conto del passato.

- Approcci:

Dynamic Time Warping (**DTW**), Hidden Markov Models (**HMM**)

Recurrent Neural Networks (**RNN**), Long Short-Term Memory (**LSTM**)

- **Altri dati strutturati**: output organizzati in strutture complesse quali alberi e grafi.

- Applicazioni in Bioinformatics, Natural Language Processing, Speech recognition, ecc.

- Esempio nella traduzione di una frase in linguaggio naturale, l'output desiderato è l'insieme dei *parse tree* plausibili.

- Approcci: Structured SVMs, Bayesian Networks, HMM

# Classificazione

- **Classificazione:** assegna una classe a un pattern.
  - Necessario apprendere una funzione capace di eseguire il mapping dallo spazio dei pattern allo spazio delle classi
  - Si usa spesso anche il termine **riconoscimento**.
  - Nel caso di 2 sole classi si usa il termine **binary classification**, con più di due classi **multi-class classification**.

- **Classe:** insieme di pattern aventi proprietà comuni.
  - Es. i diversi modi in cui può essere scritto a mano libera il carattere A.
  - Il concetto di classe è semantico e dipende strettamente dall'applicazione:
    - 21 classi per il riconoscimento di lettere dell'alfabeto
    - 2 classi per distinguere le lettere dell'alfabeto italiano da quello cirillico

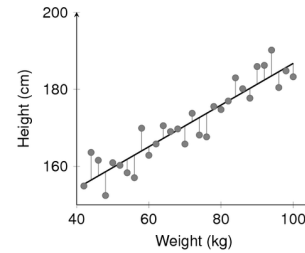
- **Esempi di problemi di classificazione:**

- Spam detection
- Credit Card fraud detection
- Face recognition
- Pedestrian classification
- Medical diagnosis
- Stock Trading

Quali sono i pattern e quali le classi ?

# Regressione

- **Regressione:** assegna un valore continuo a un pattern.
  - Utile per la predizione di valori continui.
  - Risolvere un problema di regressione corrisponde ad apprendere una funzione approssimante delle coppie «input, output» date.



Es. stima dell'altezza di una persona in base al peso

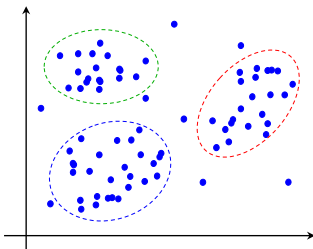
Quale tipo di funzione? Con quale grado di regolarità?

- **Esempi di problemi di regressione:**

- Stima prezzi vendita appartamenti nel mercato immobiliare
- Stima del rischio per compagnie assicurative
- Predizione energia prodotta da impianto fotovoltaico
- Modelli sanitari di predizione dei costi
- Object detection

# Clustering

- **Clustering:** individua gruppi (cluster) di pattern con caratteristiche simili.
  - Le classi del problema non sono note e i pattern non etichettati → la natura non supervisionata del problema lo rende più complesso della classificazione.
  - Spesso nemmeno il numero di cluster è noto a priori
  - I cluster individuati nell'apprendimento possono essere poi utilizzati come classi.

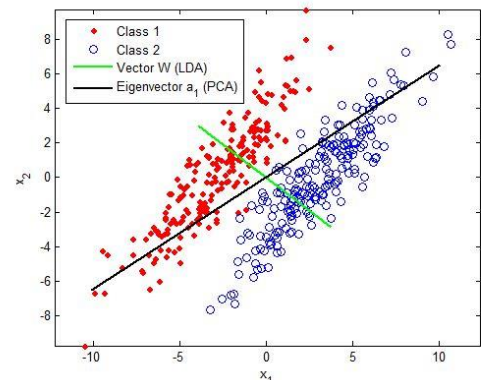


- **Esempi di problemi di clustering:**

- Marketing: definizione di gruppi di utenti in base ai consumi
- Genetica: raggruppamento individui sulla base analogie DNA
- Bioinformatica: partizionamento geni in gruppi con simili caratteristiche
- Visione: segmentazione non supervisionata

# Riduzione Dimensionalità

- **Riduzione di dimensionalità:** riduce il numero di dimensioni dei pattern in input.
  - Consiste nell'apprendimento di un mapping da  $\mathcal{R}^d$  a  $\mathcal{R}^k$  (con  $k < d$ ).
  - L'operazione comporta una perdita di informazione. L'obiettivo è conservare le informazioni «importanti».
  - La definizione formale di importanza dipende dall'applicazione.
  - Molto utile per rendere trattabili problemi con dimensionalità molto elevata, per scartare informazioni ridondanti e/o instabili, e per visualizzare in 2D o 3D pattern con  $d > 3$ .

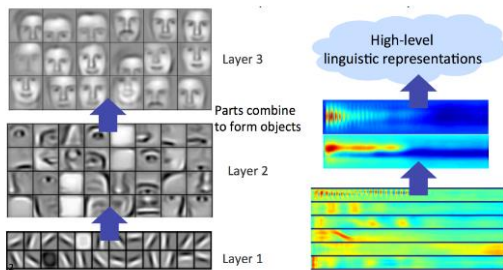


# Representation Learning

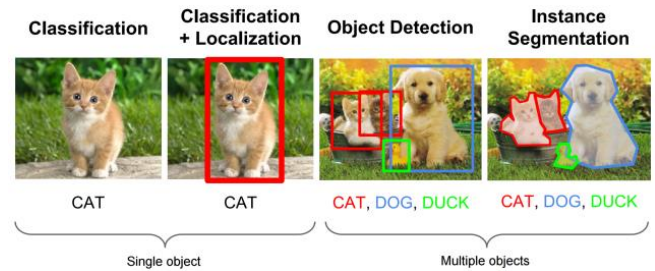
- Il successo di molte applicazioni di machine learning dipende dall'efficacia di **rappresentazione** dei pattern in termini di **features**.
- La definizione di features ad-hoc (**hand-crafted**) per le diverse applicazioni prende il nome di **feature engineering**.
- Ad esempio per il riconoscimento di oggetti esistono numerosi descrittori di forma, colore e tessitura che possiamo utilizzare per convertire immagini in vettori numerici.

## Representation Learning (o feature learning)

- Possiamo **apprendere** automaticamente feature efficaci a partire da **raw data**? O analogamente, possiamo operare direttamente su row data (es. intensità dei pixel di un'immagine, ampiezza di un segnale audio nel tempo) senza utilizzare feature pre-definite?
- Gran parte delle tecniche di **deep learning** (es. **convolutional neural networks**) operano in questo modo, utilizzando come input i raw data ed estraendo automaticamente da essi le feature necessarie per risolvere il problema di interesse.



# Problemi nel dominio Visione



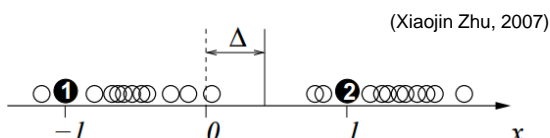
Assumiamo sia presente un solo oggetto o comunque un solo oggetto dominante

Possano essere presenti più oggetti

- Classification**: determina la classe dell'oggetto.
- Localization**: determina la classe dell'oggetto e la sua posizione nell'immagine (bounding box).
- Detection**: per ogni oggetto presente determina la classe e la posizione nell'immagine (bounding box).
- Segmentation**: al posto di una bounding box (rettangolare) etichetta i singoli pixel dell'immagine a classi con indici delle classi. Applicazioni in ambito *telerilevamento* (es. etichettare coltivazioni in immagini satellitari), immagini *mediche* (evidenziare patologie), *guida automatica* (evidenziare regione stradale).

## Apprendimento

- Supervisionato (Supervised)**: sono note le classi dei pattern utilizzati per l'addestramento.
  - il training set è etichettato.
  - situazione tipica nella **classificazione**, regressione e in alcune tecniche di riduzione di dimensionalità (es. Linear Discriminant Analysis).
- Non Supervisionato (Unsupervised)**: non sono note le classi dei pattern utilizzati per l'addestramento.
  - il training set non è etichettato.
  - situazione tipica nel **clustering** e nella maggior parte di tecniche di riduzione di dimensionalità.
- Semi-Supervisionato (Semi-Supervised)**
  - il training set è etichettato parzialmente.
  - la distribuzione dei pattern non etichettati può aiutare a ottimizzare la regola di classificazione.



(Xiaojin Zhu, 2007)

## Batch, Incrementale, Naturale

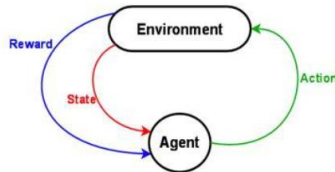
- Batch**: l'addestramento è effettuato una sola volta su un training set dato.
  - una volta terminato il training, il sistema passa in «working mode» e non è in grado di apprendere ulteriormente.
  - Attualmente, la maggior parte dei sistemi di machine learning opera in questo modo.
- Incrementale**: a seguito dell'addestramento iniziale, sono possibili ulteriori sessioni di addestramento.
  - Scenari: Sequenze di Batch, Unsupervised Tuning.
  - Rischio: Catastrophic Forgetting (il sistema dimentica quello che ha appreso in precedenza).
- Naturale**: addestramento continuo (per tutta la vita)
  - Addestramento attivo in working mode.
  - Coesistenza di approccio supervisionato e non supervisionato.

*human-like learning involves an initial small amount of direct instruction (e.g. parental labeling of objects during childhood) combined with large amounts of subsequent unsupervised experience (e.g. self-interaction with objects)*

# Reinforcement Learning (RL)

- **Apprendere un comportamento:** l'obiettivo è apprendere un comportamento ottimale a partire dalle esperienze passate.

- un agente esegue **azioni** che modificano l'**ambiente**, provocando passaggi da uno **stato** all'altro. Quando l'agente ottiene risultati positivi riceve una ricompensa (**reward**) che però può essere temporalmente ritardata rispetto all'azione, o alla sequenza di azioni, che l'hanno determinata.
- Obiettivo è apprendere l'azione ottimale in ciascun stato, in modo da massimizzare la somma dei reward ottenuti nel lungo periodo.



- Nella pratica è molto difficile ottenere esempi che siano allo stesso tempo corretti e rappresentativi di tutte le situazioni in cui l'agente deve agire. Pertanto il classico approccio supervisionato non è facilmente applicabile.
- Numerose applicazioni in **Robotica** (es. object grasping, control, assembly, navigation).
- **Q learning** è uno degli approcci più noti e utilizzati.
- Una sua estensione (deep) denominata **Deep Reinforcement Learning** (DRL) è alla base dei successi ottenuti da Google DeepMind (Atari, AlphaGo).

## Iperparametri

- Molti algoritmi richiedono di definire, **prima** dell'apprendimento vero e proprio, il valore dei cosiddetti **iperparametri H**.
- Esempi di iperparametri:
  - Il numero di neuroni in una rete neurale.
  - Il numero di vicini  $k$  in un classificatore  $k$ -NN.
  - Il grado di un polinomio utilizzato in una regressione.
  - Il tipo di loss function.
- Si procede con un approccio a due livelli nel quale per ogni valore «**ragionevole**» degli iperparametri si esegue l'apprendimento, e al termine della procedura si scelgono gli iperparametri che hanno fornito **prestazioni migliori**.
- Ma come si **valutano le prestazioni**, e su **quali dati**?

# Parametri e Funzione Obiettivo

- In genere, il comportamento di un algoritmo di Machine Learning è regolato da un set di **parametri  $\theta$**  (es. i pesi delle connessioni in una rete neurale). L'apprendimento consiste nel determinare il valore ottimo  $\theta^*$  di questi parametri.
- Dato un training set **Train** e un insieme di parametri, la **funzione obiettivo  $f(\text{Train}, \theta)$**  può indicare:

- l'**ottimalità** della soluzione (da **massimizzare**).

$$\theta^* = \operatorname{argmax}_{\theta} f(\text{Train}, \theta)$$

- oppure l'**errore** o **perdita** (**loss-function**) da **minimizzare**.

$$\theta^* = \operatorname{argmin}_{\theta} f(\text{Train}, \theta)$$

- **$f(\text{Train}, \theta)$**  può essere ottimizzata:

- **esplicitamente**, con metodi che operano a partire dalla sua definizione matematica.

Es: si calcolano le derivate parziali di  $f$  rispetto ai parametri (gradiente), si eguaglia il gradiente a 0 (sistema di equazioni) e si risolve rispetto ai parametri.

- **implicitamente**, utilizzando euristiche che modificano i parametri in modo coerente con  $f$

Es: clustering con algoritmo k-means.

## Valutazione delle Prestazioni

- Una possibilità consiste nell'utilizzare direttamente la funzione obiettivo per quantificare le prestazioni. In genere però si preferisce una misura legata direttamente alla semantica del problema.
- In un problema di **Classificazione**, l'**accuratezza** di classificazione [0...100%] è la percentuale di pattern correttamente classificati. L'errore di classificazione è il complemento.

$$\text{Accuratezza} = \frac{\text{pattern correttamente classificati}}{\text{pattern classificati}}$$

$$\text{Errore} = 100\% - \text{Accuratezza}$$

**Attenzione ai problemi di classificazione con cardinalità classi molto sbilanciate:**

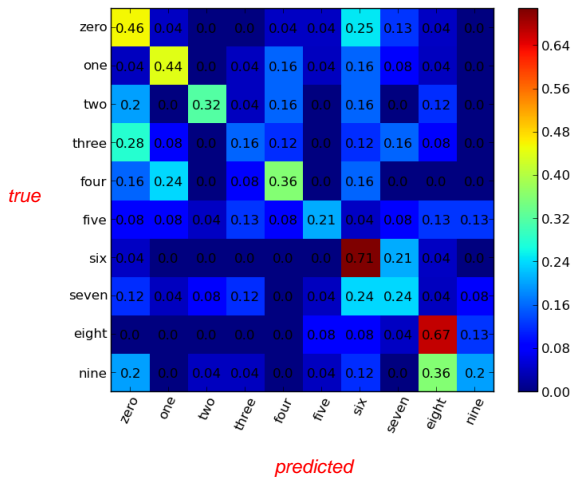
- Es. in un problema di classificazione binaria, se una delle due classi è rara, un classificatore «dummy» che non la predice mai potrebbe raggiungere un'accuratezza di classificazione vicina al 100%. Meglio usare Precision/Recall in questo caso (vedi slide successive).

- Nei problemi di **Regressione**, si valuta in genere l'**RMSE** (Root Mean Squared Error) ovvero la radice della media dei quadrati degli scostamenti tra valore vero e valore predetto.

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1..N} (\text{pred}_i - \text{true}_i)^2}$$

## Matrice di Confusione

- La matrice di confusione (confusion matrix) è molto utile nei problemi di **classificazione** (multiclasse) per capire come sono distribuiti gli errori.
- Nell'esempio un problema di classificazione digit (10 classi).
  - Sulle righe le classi **true** sulle colonne le classi **predicted**.
  - Una cella (r,c) riporta la percentuale di casi in cui il sistema ha predetto di classe **c** un pattern di classe vera **r**.
  - Idealmente la matrice dovrebbe essere diagonale. Valori elevati (fuori diagonale) indicano concentrazioni di errori.



## Problemi Closed e Open set

- Nel caso **più semplice** (e più comune nei benchmark di machine learning) si assume che il pattern da classificare appartenga a una delle classi note (**closed set**). Es. classificare le persone in {uomini, donne}.
- In molti casi reali invece i pattern da classificare possono appartenere a una delle classi note o a nessuna di queste (**open set**). Es. Classificare tutta la frutta in {mele, pere, banane}.

Due soluzioni:

- Si aggiunge alle classi un'ulteriore classe fittizia «il resto del mondo» e si aggiungono al training set i cosiddetti «esempi negativi».
- Si consente al sistema di non assegnare il pattern. A tal fine si definisce una **soglia** e si assegna il pattern alla classe più probabile solo quando la probabilità è superiore alla soglia.
- Consideriamo un problema di classificazione **binario**, dove le due classi corrispondono a esempi **Positivi** (vera classe) e **Negativi** (classe fittizia resto del mondo).
  - Es. *Face detection*. Positivi: tutte le porzioni di immagine (finestre) in cui appaiono volti. Negativi: finestre (scelte a caso) in cui non compaiono volti.
- Analogamente possiamo considerare solo la classe **positivi** e un sistema (con soglia) in grado di calcolare la probabilità **p** di appartenenza di un pattern alla classe. Sia **t** il valore di soglia, allora il pattern viene classificato come positivo se  $p > t$ , come negativo in caso contrario.

## False Positive and False Negative

- Dato un **classificatore binario** e  $T = P + N$  pattern da classificare (P positivi e N negativi), il risultato di ciascuno dei tentativi di classificazione può essere:
  - True Positive (TP)**: un pattern positivo è stato correttamente assegnato ai positivi.
  - True Negative (TN)**: un pattern negativo è stato correttamente assegnato ai negativi.
  - False Positive (FP)**: un pattern negativo è stato erroneamente assegnato ai positivi. Detto anche errore di **Tipo I** o **False**.
  - False Negative (FN)**: un pattern positivo è stato erroneamente assegnato ai negativi. Detto anche errore di **Tipo II** o **Miss**.

- Passando da errori a frequenze/probabilità:

$$TPR \text{ (True Positive Rate)} = \frac{TP}{P}$$

$$TNR \text{ (True Negative Rate)} = \frac{TN}{N}$$

$$FPR \text{ (False Positive Rate)} = \frac{FP}{N}$$

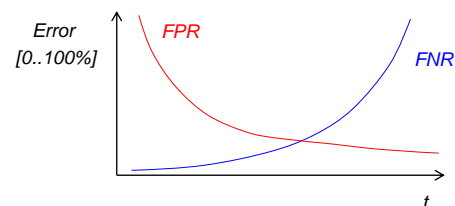
$$FNR \text{ (False Negative Rate)} = \frac{FN}{P}$$

Con questa notazione l'accuratezza di classificazione può essere scritta come:

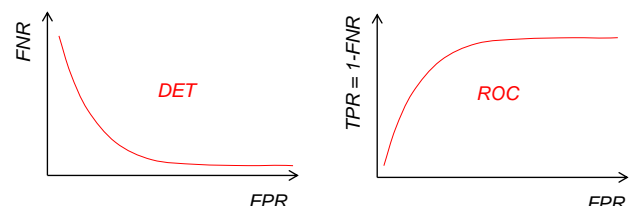
$$Accuracy = \frac{TP + TN}{T = P + N}$$

## Sistemi con soglia (DET e ROC)

- Nei sistemi con soglia false positive rate e false negative rate sono **funzione** della soglia **t**. Soglie restrittive (elevate) riducono i false positive a discapito dei false negative; viceversa soglie tolleranti (basse) riducono i false negative a discapito dei false positive.



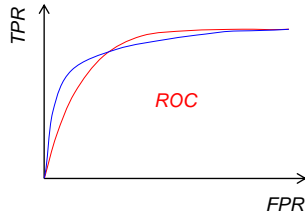
- Le due curve possono essere «condensate» in una curva **DET** (Detection Error Tradeoff) che nasconde la soglia. Piuttosto usata è anche la rappresentazione **ROC** (Receiver Operating Characteristic) che in ordinata riporta True positive invece di False negative (ROC è ribaltata verticalmente rispetto a DET).



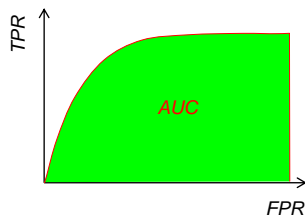


## Area Under Curve (AUC)

- Quale dei due sistemi (rosso, blu) è migliore dell'altro?



- Il sistema migliore è quello la cui curva è più «alta», ma in questo caso le curve si intersecano ... e l'ottimalità dipende dal punto di lavoro desiderato.
- Un confronto può essere fatto «mediando» sui diversi punti di lavoro del sistema. L'area sotto la curva ROC (AUC) è uno scalare in  $[0,1]$  che caratterizza la prestazione media (maggiore è, meglio è). Può essere calcolata come integrale numerico.



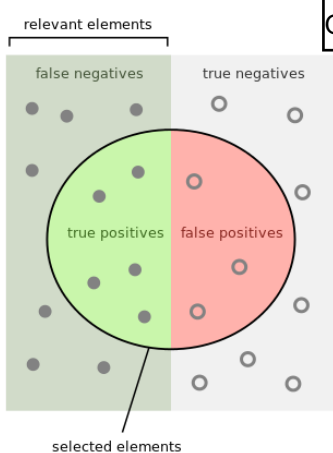
## ...ancora sui sistemi con soglia

- Un tipico esempio di sistemi con soglia sono i sistemi biometrici di verifica di identità:
  - Questa immagine dell'iride è del soggetto Q ?
  - False positive e False negative in questo caso prendono il nome di False Match e False Non-Match.
- E nel caso open set multi-classe?
  - In generale per la classificazione vedi [1]
  - Nella biometria si parla anche di identificazione distinguendola dalla verifica di identità e si definiscono FPIR (False Positive Identification Rate) e FNIR (False Negative Identification Rate).

[1] Sokolova & Lapalme (2009). A systematic analysis of performance measures for classification tasks. Information Processing and Management. <http://rali.iro.umontreal.ca/rali/sites/default/files/publis/SokolovaLapalme-JIPM09.pdf>

## Precision - Recall

- Notazione molto usata in Information Retrieval e in generale nelle applicazioni di detection.



Quante volte ha detto SI ed era verame

Precision indica quanto è accurato il sistema.

Che percentuale di documenti selezionati è pertinente?

$$\text{Precision} = \frac{TP}{TP + FP}$$

Recall quanto è selettivo.

Di tutti i documenti pertinenti quanti ne sono stati selezionati?

$$\text{Recall} = \frac{TP}{TP + FN} = \frac{TP}{P} = TPR$$

How many selected items are relevant?



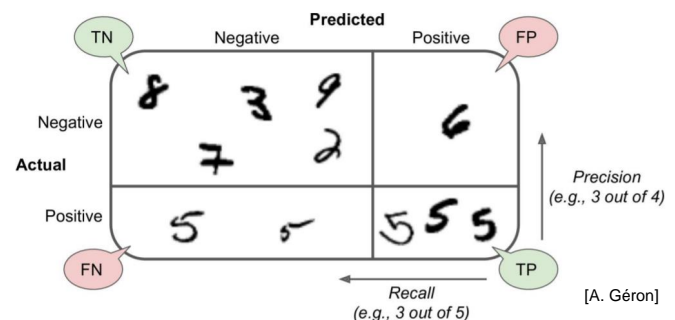
How many relevant items are selected?



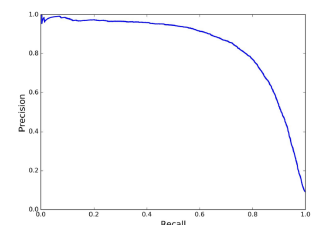
Quante volte ha detto SI risp

## Precision - Recall su matrice 2x2

- Un'altra rappresentazione grafica utile per comprendere Precision e Recall è la matrice di confusione 2x2 che evidenzia TN, TP, FP, FN:
- Il classificatore (binario) dell'esempio sotto ha come classe positiva il digit 5 e come classe negativa tutti gli altri digit.

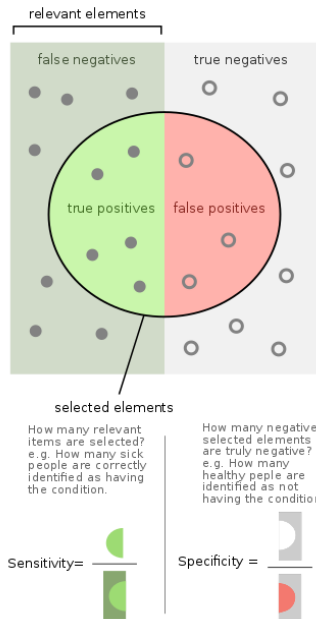


Tipicamente anche Precision/Recall dipendono da soglia → grafico

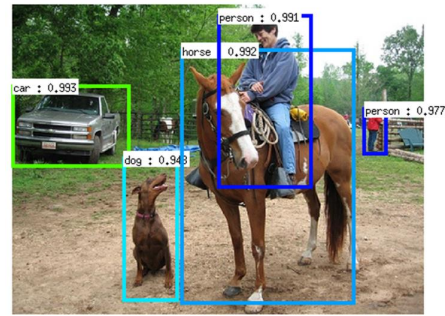


## Sensitivity - Specificity

- In diagnostica medica (es. **immunologia**) si usano i termini Sensitivity e Specificity per caratterizzare la bontà di un test (es. tampone Covid-19).



## Object Detection: AP e mAP



**Detection:** per ogni oggetto presente determina la probabilità di appartenenza alla classe più probabile e la corrispondente bounding box.

- Possibili **diversi tipi di errore**, tra cui: oggetto non trovato, classe errata, bounding box sbagliata o imprecisa. Come quantificare il tutto con uno scalare per rendere sistemi confrontabili?
- Average Precision (**AP**) è una sorta di AUC calcolata su grafico Recall/Precision per oggetti di una singola classe su tutto il database.
- medium Average Precision (**mAP**) è la media di AP su tutte le classi.
- Per calcolare TP, FP (a una certa confidenza) si considera una prediction corretta quando la classe è giusta e la Intersection over Union (**IoU**) delle due bounding box (rilevata e vera) è maggiore di un valore dato (es. 0.5).
- Per maggiori dettagli: [https://medium.com/@jonathan\\_hui/map-mean-average-precision-for-object-detection-45c121a31173](https://medium.com/@jonathan_hui/map-mean-average-precision-for-object-detection-45c121a31173)

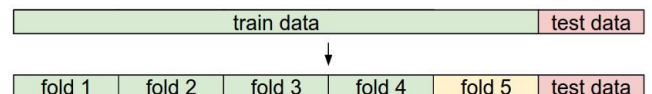
## Training, Validation, Test

- Il **Training Set (Train)** è l'insieme di pattern su cui addestrare il sistema, trovando il valore ottimo per i parametri  $\theta$ .
- Il **Validation Set (Valid)** è l'insieme di pattern su cui tarare gli iperparametri  $H$  (ciclo esterno).
- Il **Test Set (Test)** è l'insieme di pattern su cui valutare le prestazioni finali del sistema. *Sempre forte è la tentazione di tarare gli iperparametri sul test set, ma questo dovrebbe essere evitato, pena sovrastima delle prestazioni.*

- Nei benchmark di machine learning la suddivisione dei pattern in Train, Valid e Test è spesso predefinita, per rendere confrontabili i risultati. In caso contrario come procedere?
- Se i dati sono sufficientemente numerosi per la complessità del modello da addestrare (ovvero non producono overfitting, vedi slide successive), si possono usare **Set Disgiunti**:
- Es. dati 15000 pattern: 10000 Train, 2500 Valid, 2500 Test.

## K-fold Cross-Validation

- Una scelta più robusta degli **iperparametri** (di fatto obbligatoria per dataset di piccole dimensioni) si ottiene con la procedura di k-fold Cross-Validation. Nell'ipotesi di 15000 pattern totali e  $k=5$ :
- 5000 pattern sono **scorporati a priori** per il Test.
- i 10000 pattern rimanenti (dopo averli mescolati) sono suddivisi in 5 gruppi (fold) da 2000 pattern ciascuno.



- Per ogni **combinazione di iperparametri  $H_i$** , che si vuole valutare:
  - Si esegue 5 volte il training scegliendo uno dei fold come Valid e i 4 rimanenti come Train.
  - Si calcola l'accuratezza **avg\_acc**, come media/mediana delle 5 accuratezze sui rispettivi Valid
- Si **sceglie la combinazione di iperparametri con migliore avg\_acc**.
- Scelti gli iperparametri ottimali **si riaddestra il modello su tutto il training set** (5 fold) e, solo a questo punto, si verificano le prestazioni sul **test set**.

- Leave-one-out:** caso estremo di cross-validation dove i fold hanno dimensione 1. Visto il costo computazionale, si utilizza quando i pattern sono pochi (es. < 100).

## Partizionare i dati

- Partizionare i dati in **Training**, **Validation** e **Test**, richiede in genere di generare (random) gli indici degli elementi da assegnare ai diversi insiemi per poi procedere alla suddivisione facendo attenzione a dividere nello stesso modo anche le etichette (in classificazione) o valori target (nella regressione).
- La funzione `train_test_split` di **Scikit Learn** automatizza questa fase, a partire dalle proporzioni specificate in input, fornendo anche supporto per **shuffling** (ordinamento casuale dei pattern) e **stratification** (selezione bilanciata rispetto a certe categorie o insiemi di valori).
- Relativamente a **Cross Validation** **Scikit Learn** mette a disposizione la funzione `cross_val_score` che a partire da un unico training set e il numero K di fold, valuta K volte il sistema e ritorna un array di K score (es. accuratèzze di classificazione).

[https://scikit-learn.org/stable/modules/cross\\_validation.html](https://scikit-learn.org/stable/modules/cross_validation.html)

## Selezione Automatica Iperparametri

La ricerca di valori ottimali per gli iperparametri può essere lunga e noiosa. Automatizzare quando possibile:

- **Grid Search**: per ogni iperparametro si definisce un insieme di valori da provare. Il sistema è valutato su tutte le combinazioni di valori di tutti gli iperparametri. Può essere molto costoso: **raffinamento incrementale** dei valori. Attenzione inoltre se vengono selezionati **valori di bordo** per uno o più iperparametri.

- Esempio con funzione `GridSearchCV` di **Scikit-Learn**:

```
param_grid = [  
    {'C': [1, 10, 100, 1000], 'kernel': ['linear']},  
    {'C': [1, 10, 100, 1000], 'gamma': [0.001, 0.0001], 'kernel': ['rbf']},  
]
```

Ogni { } corrisponde a una grid search:

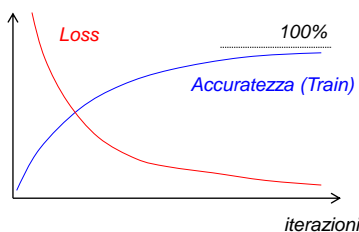
- nella prima si valuta un classificatore SVM con kernel lineare e con 4 valori di C → 4 valutazioni;
- nella seconda si valuta il classificatore con kernel rbf, 4 valori di C e 2 valori di gamma → 8 valutazioni;
- In totale 12 valutazioni, ciascuna delle quali fatta con Cross Validation (se richiesto).

- **Random Search**: sorteggia casualmente valori di iperparametri dai range/distribuzioni specificati/e, eseguendo un numero prefissato di iterazioni.

- Funzione `RandomizedSearchCV` di **Scikit-Learn**:

## Convergenza

- Il primo obiettivo da perseguire durante l'addestramento è la **convergenza** sul Train set. Consideriamo un classificatore il cui addestramento prevede un processo **iterativo**. Si ha convergenza quando:
  - La **loss** (output della loss function) ha andamento **decrescente**.
  - L'**accuratezza** ha andamento **crescente**.



- Note:

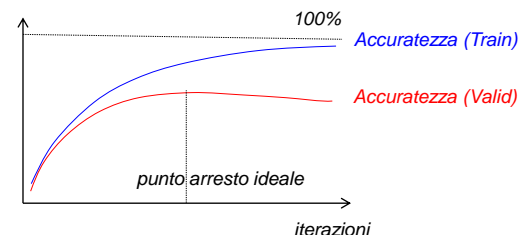
- Se la **loss non decresce** (o **oscilla** significativamente) il sistema **non converge**: il metodo di ottimizzazione non è efficace, gli iperparametri sono fuori range, il learning rate è inadeguato, ci sono errori di implementazione, ecc.
- Se la **loss decresce** ma l'**accuratezza non cresce**, probabilmente è stata scelta una loss-function errata.
- Se l'**accuratezza non si avvicina al 100% sul Train**, i gradi di libertà del classificatore non sono sufficienti per gestire la complessità del problema.

## Generalizzazione e Overfitting

- Ricordiamoci che il nostro obiettivo è massimizzare l'accuratezza su **Test**. Nell'ipotesi che **Valid** sia rappresentativo di **Test**, ci poniamo l'obiettivo di massimizzare l'accuratezza su Valid.

- Per **generalizzazione** intendiamo la capacità di **trasferire** l'elevata accuratezza raggiunta su Train a Valid.

- Se i gradi di libertà del classificatore sono eccessivi, si raggiunge elevata accuratezza su Train, ma non su Valid (scarsa generalizzazione). In questo caso si parla di **overfitting** di Train. Questa situazione si verifica molto facilmente quando Train è di piccole dimensioni.



- Nei processi di addestramento iterativo, tipicamente dopo un certo numero di iterazioni l'accuratezza su Valid non aumenta più (e può iniziare a decrescere) a causa dell'overfitting. Monitorando l'andamento si può **arrestare l'addestramento** nel punto ideale (**early stopping**).



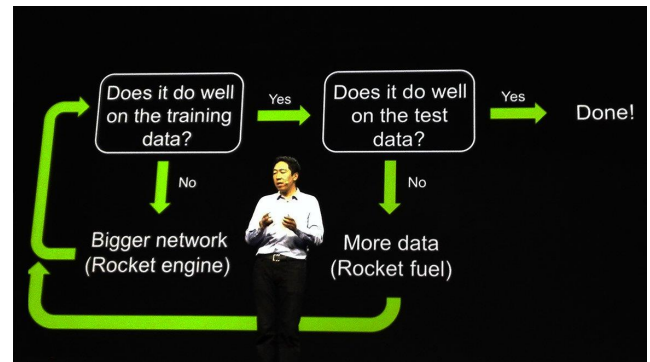
# Controllare l'Overfitting

per massimizzare la Generalizzazione

- I gradi di libertà del classificatore non devono essere eccessivi, ma adeguati rispetto alla complessità del problema.
- Buona norma partire con pochi gradi di libertà (controllabili attraverso iperparametri) e via via aumentarli monitorando accuratezza su Train e Valid.
  - A parità di fattori la spiegazione più semplice è da preferire (Guglielmo di Occam (Occam Razor)).
  - *Everything Should Be Made as Simple as Possible, But Not Simpler* (Albert Einstein)
- I gradi di libertà influenzano la regolarità della soluzione appresa (esempio regolarità del decision boundary nella classificazione o regolarità di una funzione approssimante nella regressione).
- La regolarità della soluzione può essere talvolta controllata aggiungendo un fattore regolarizzante alla loss-function che penalizza soluzioni irregolari.

Es. in una rete neurale si possono favorire soluzioni prive di pesi con valori elevati ( $L_2$  regularization), oppure dove solo una parte dei pesi sono diversi da 0 ( $L_1$  regularization  $\rightarrow$  sparsity).

# La «ricetta» in una slide



Andrew Ng (Stanford, Baidu, Coursera)

<http://www.gizmodo.com.au/2015/04/the-basic-recipe-for-machine-learning-explained-in-a-single-powerpoint-slide/>

## In Pratica

- Non utilizzate approcci di Machine Learning per problemi sui quali non avete a disposizione sufficienti esempi per il Training e il Test.
- Collezionare esempi (ed etichettarli) può richiedere ingenti sforzi, a meno che non siate in grado di reperire i pattern in rete, e/o non possiate pagare qualcuno per collezionarli/etichettarli al posto vostro (es. Crowdsourcing via Amazon Mechanical Turk per ImageNet).
- Collezionate pattern rappresentativi del problema da risolvere e distribuiteli adeguatamente tra Train, Valid e Test.
  - evitate di concentrarvi solo su casi troppo semplici (ad esempio rimuovendo iterativamente i pattern che il vostro approccio non riesce a gestire).
- Automatizzate «subito» al meglio le procedure di valutazione delle prestazioni, le eseguite molte volte ... e alla fine avrete risparmiato un sacco di tempo.
- Confrontate le prestazioni del vostro sistema solo con altri addestrati sullo stesso dataset e con lo stesso protocollo.
- Attenzione all'affidabilità statistica dei risultati su set di piccole dimensioni. Intervalli di confidenza e simulazioni su più Run (al variare delle condizioni iniziali) possono aiutarvi.
- Infine (ma estremamente importante): scrivete codice strutturato, ordinato, eseguite debug incrementale e unit testing. Gli algoritmi di Machine Learning non sono «esatti» e trovare bug nel codice può essere molto difficile!

## Come si vince una competizione?

- Kaggle è una delle più popolari piattaforme dove sono condivisi benchmark di machine learning e si organizzano competizioni su domini diversi (anche con ingenti premi in denaro).
- Il più vincente tra i partecipanti della community (Kaggler #1 nel 2018) ha svelato in un'intervista le basi del suo approccio (sistematico):
  - Read the overview and data description of the competition carefully
  - Find similar Kaggle competitions. As a relatively new comer, I have collected and done a basic analysis of all Kaggle competitions.
  - Read solutions of similar competitions.
  - Read papers to make sure I don't miss any progress in the field.
  - Analyze the data and build a stable CV (Cross-Validation).
  - Data pre-processing, feature engineering, model training.
  - Result analysis such as prediction distribution, error analysis, hard examples.
  - Elaborate models or design a new model based on the analysis.
  - Based on data analysis and result analysis, design models to add diversities or solve hard samples.
  - Ensemble (e.g. multi-classifiers).
  - Return to a former step if necessary.

## Tool per il Machine Learning

Nel corso degli anni ricercatori, sviluppatori indipendenti e imprese hanno sviluppato numerosi **tool software** (**librerie**, **framework**, **simulatori**), gran parte dei quali open-source.

La **scelta** del tool (e relativo linguaggio di programmazione) dipende dagli obiettivi del progetto e dalla preferenze dello sviluppatore.

Tra i tool più noti, ricordiamo:

- **Scikit-learn\*** (Python). *General Purpose*
- **OpenCV** (C++). *Molto utilizzato in ambito Visione Artificiale*
- **Weka** (Java). *Molto utilizzato in ambito Data Mining*
- **R** and **Caret**. *Dalla Statistica al Machine Learning*

Per un elenco più dettagliato:

<https://github.com/josephmisiti/awesome-machine-learning>.

I principali framework per il **deep learning** (tutti con interfaccia Python) sono:

- **Tensorflow\*** (Google). *Il più noto e diffuso*
- **PyTorch** (Facebook). *Molto apprezzato in ambito ricerca*
- **Caffe** (Berkeley). *Efficiente per Visione Artificiale*

\* utilizzati per le esercitazioni di questo corso

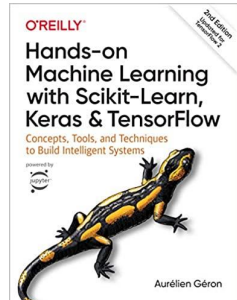
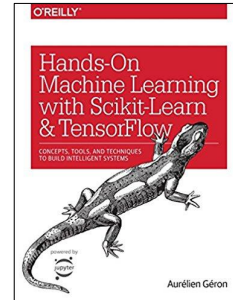
## Altre risorse

- Nessun libro di testo ufficiale per la parte teorica del corso:
  - le slide coprono tutto il programma
  - approfondimenti e link a siti web forniti di volta in volta

- Per la parte pratica (esercitazioni):

- testo consigliato:

nel seguito: [A. Géron]



- Lacune in **algebra lineare** e **probabilità** ?
  - vedi cap. 2 e 3 del libro «Deep Learning» disponibile online a:  
<https://www.deeplearningbook.org/>