Bioinformatics Technology "InfoLife"

Introduzione al Machine Learning

Laboratorio di Bioinformatica "InfoLife"

Università di Foggia - Consorzio C.IN.I.

Dott. Crescenzio Gallo

crescenzio.gallo@unifg.it

Cos'è il Machine Learning?

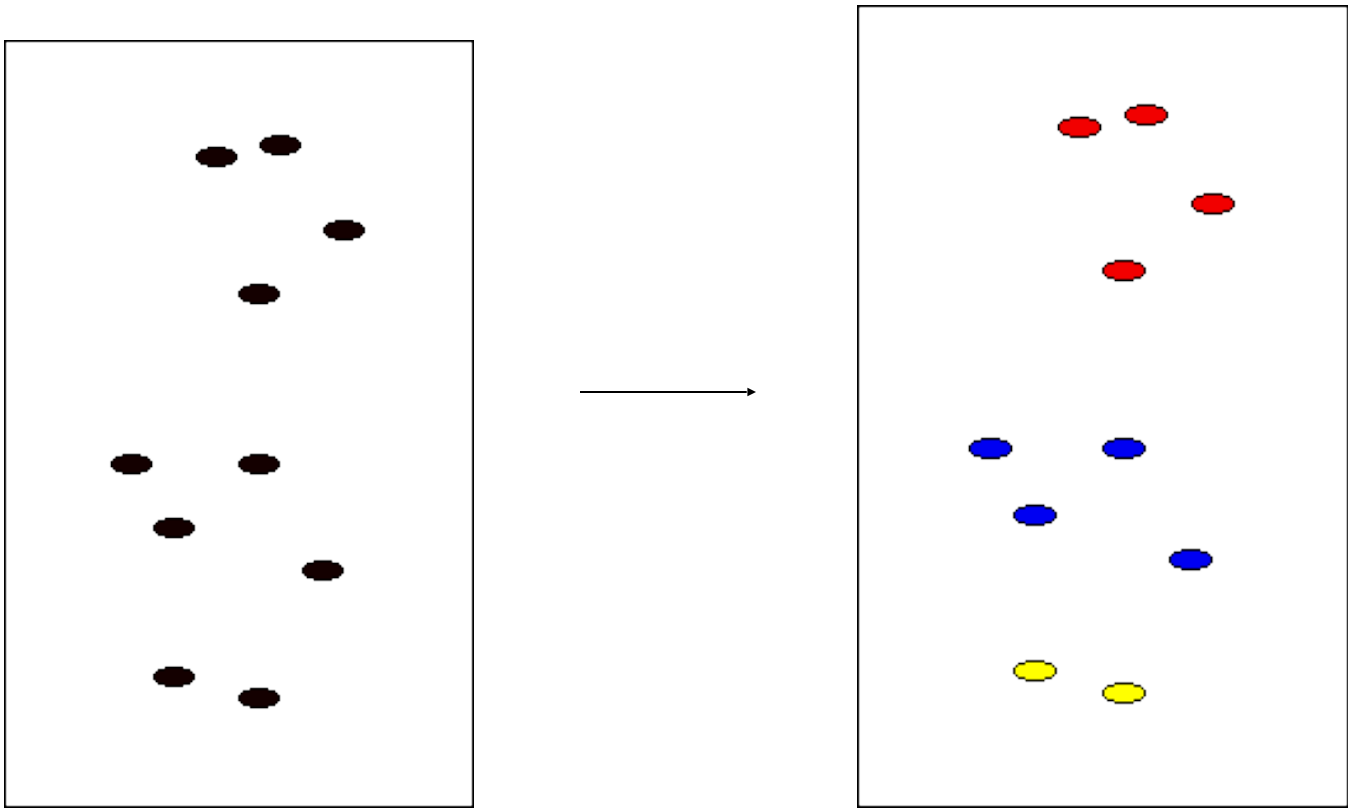
- Fa parte dell'Intelligenza Artificiale
- Riguarda particolari attività, senza l'obiettivo di costruire automi intelligenti
- È relativa alla progettazione di sistemi che migliorano (o almeno cambiano) man mano che acquisiscono conoscenza o esperienza

Attività tipiche del ML

- Clustering
- Classificazione
- Categorizzazione
- Filtro/Selezione
- Riconoscimento (*pattern recognition*)
- Simulazione di giochi
- Comportamento autonomo

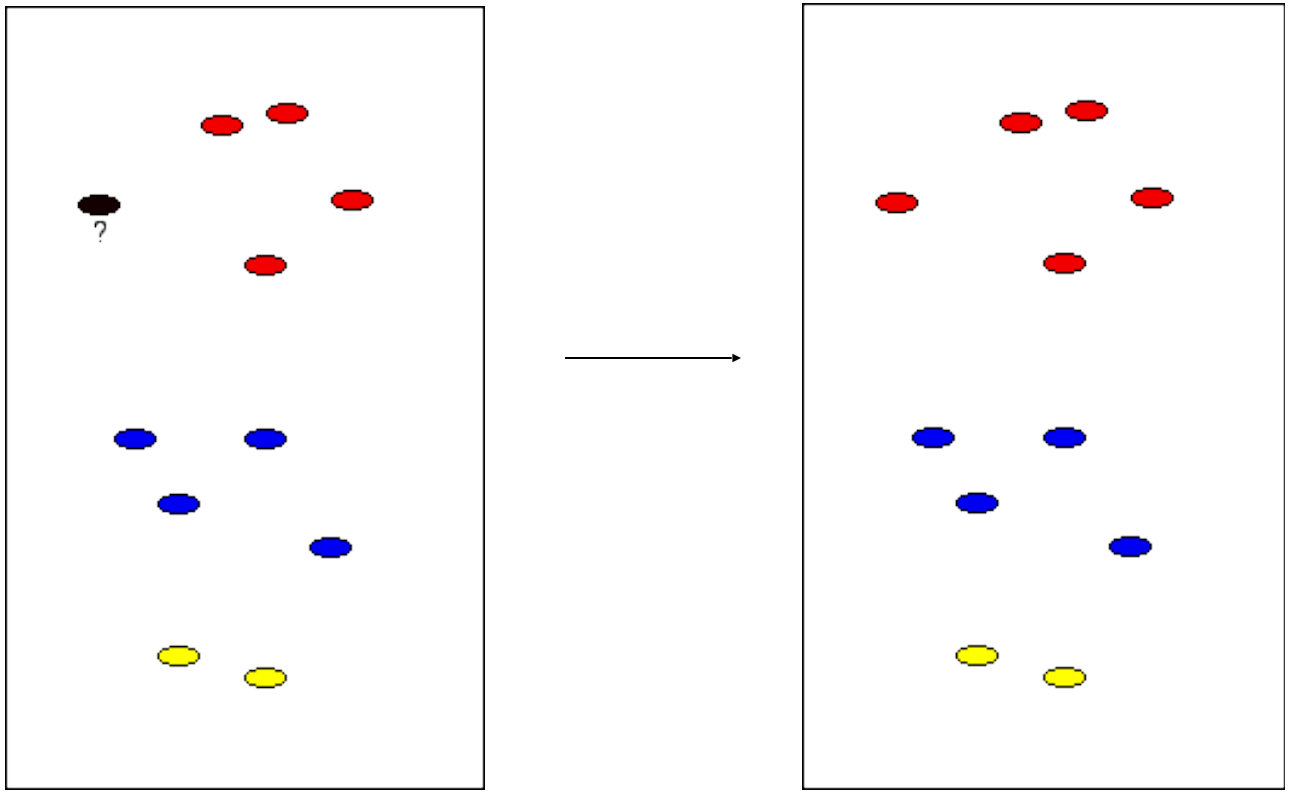
Attività tipiche del ML

- Clustering



Attività tipiche del ML

- Classificazione/Categorizzazione



Attività tipiche del ML

- Riconoscimento (di immagini)

Vincent Van Gogh

Joe Di Maggio

Mohammed Ali

Steve Jobs

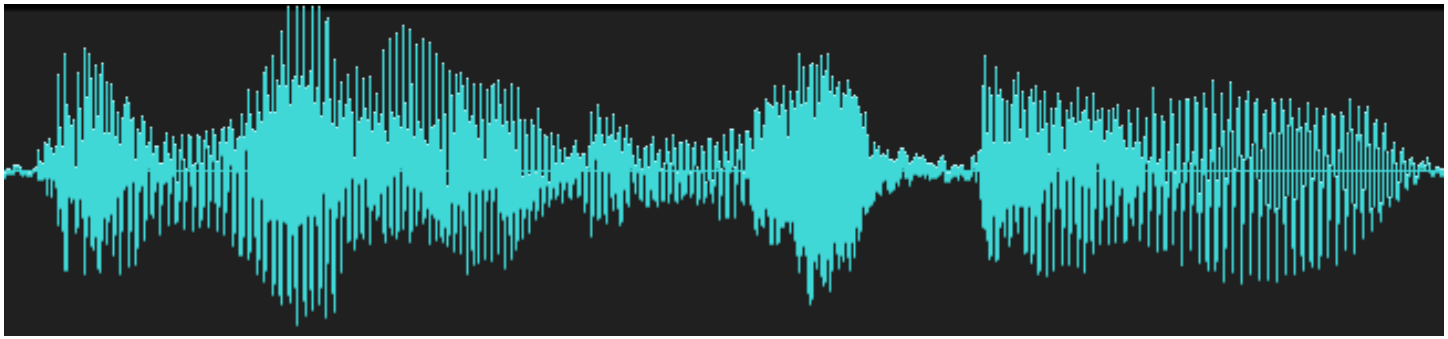
Bill Gates

Winston Churchill

Alfred Hitchcock

Attività tipiche del ML

- Riconoscimento (di suoni)



Mr Tambourine man

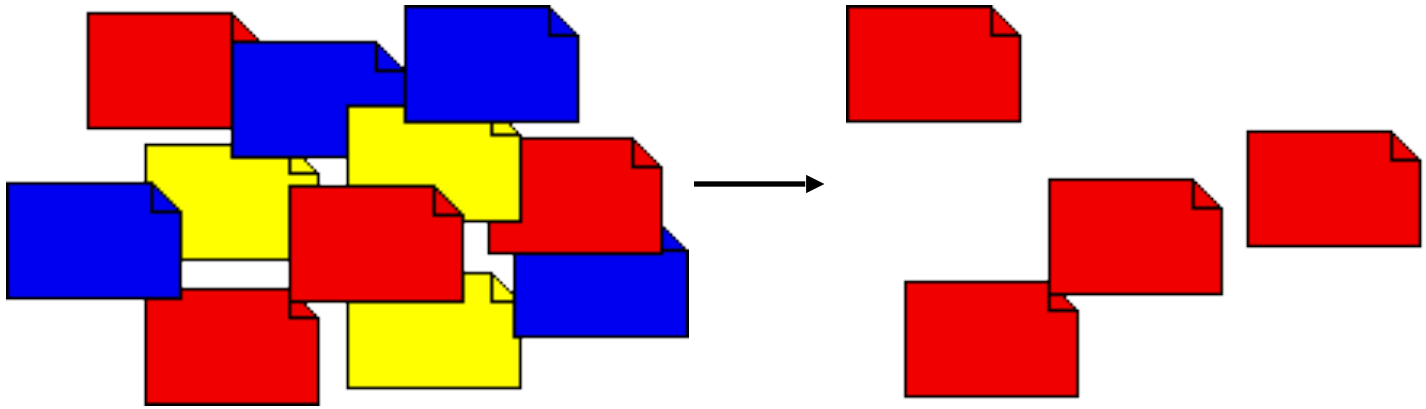
La Canzone del padre

Teach your children

Il suonatore Jones

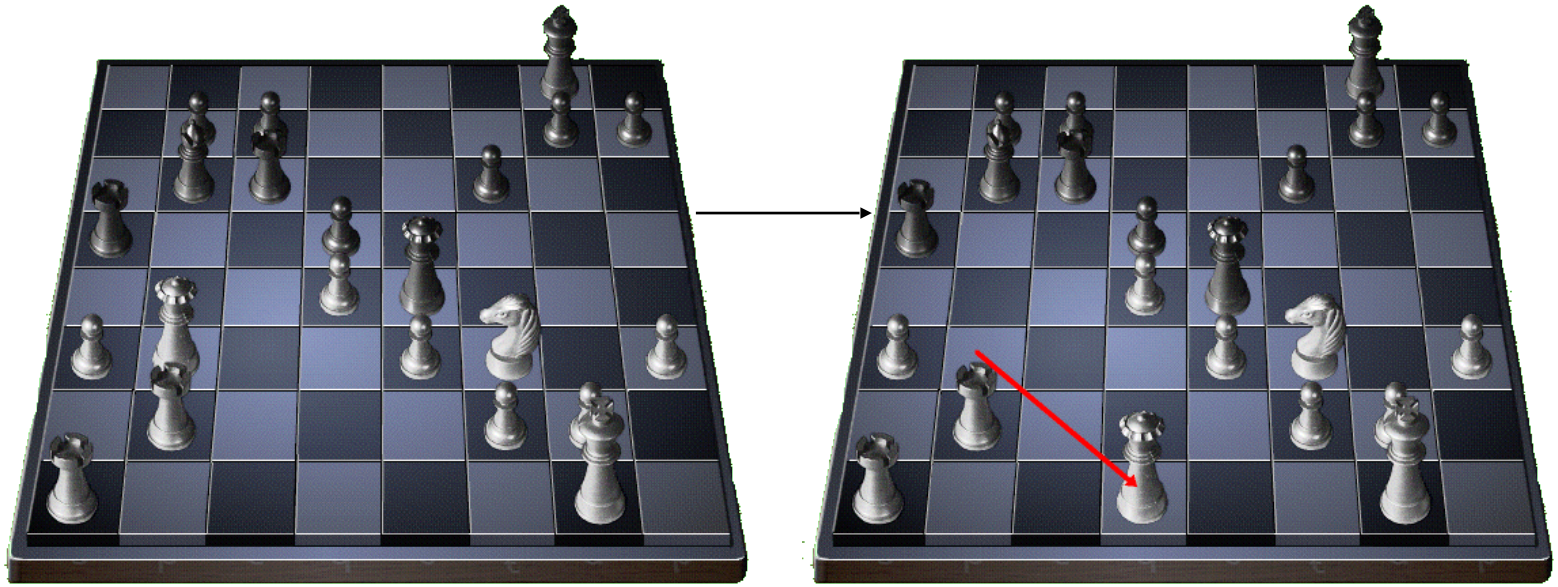
Attività tipiche del ML

- Filtro/Selezione



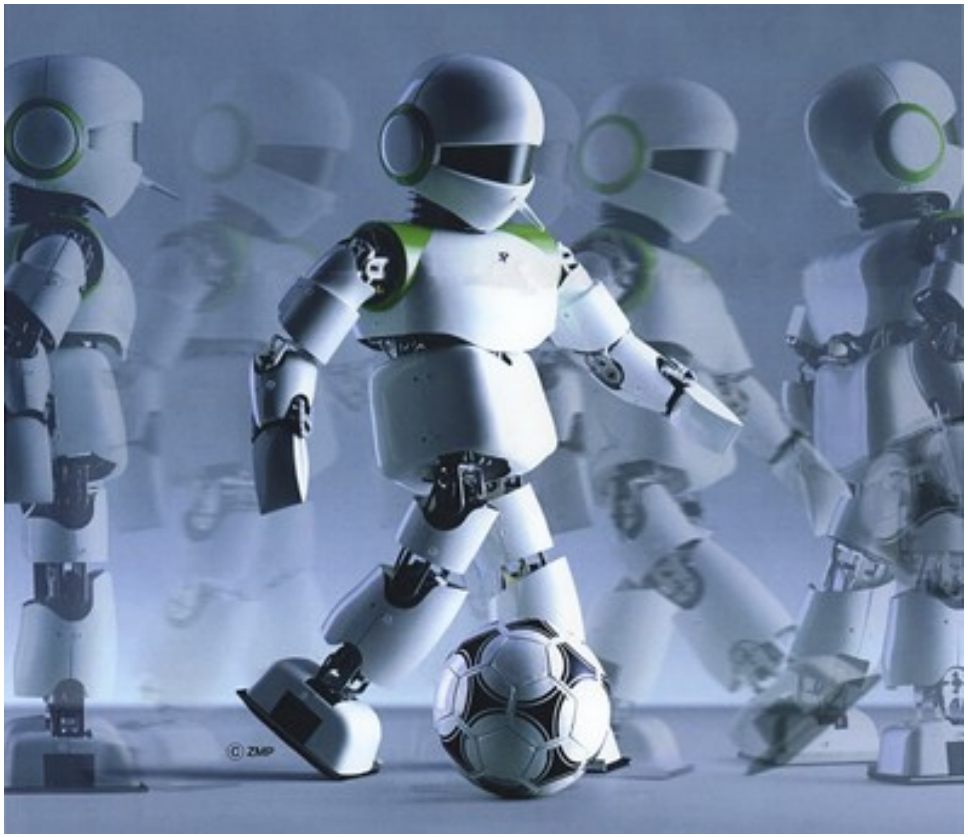
Attività tipiche del ML

- Simulazione di giochi



Attività tipiche del ML

- (Apprendimento e) Comportamento autonomo



Parole chiave del ML

- Data Mining (analisi di dati)
- Knowledge Management (KM – gestione della conoscenza)
- Information Retrieval (IR – ricerca di informazioni)
- Expert Systems (sistemi esperti)
- Text Mining (individuazione e controllo di argomenti in testi e social networks)

Chi si occupa di ML?

- Ricerca e industria
- In stretta sinergia tra di loro
- Non molti moduli ML/KM riutilizzabili, al di fuori di pochi sistemi commerciali
- Il KM è visto come una componente chiave della strategia delle grosse imprese
- Il ML è un settore di ricerca estremamente attivo con basso "costo di ingresso"

Quando è utile il ML?

- Quando vi sono grandi quantità di dati
- Quando non vi sono abbastanza persone per risolvere un problema, o quelle disponibili non possono operare con maggiore rapidità
- Quando ci si può permettere di sbagliare in qualche caso (efficacia *vs* precisione)
- Quando occorre trovare modelli (*pattern*)
- Quando non si ha più nulla da perdere…

Teoria e Terminologia ML

- Il ML è relativo ad una funzione obiettivo (*target*) collegata ad un set di esempi (casi, istanze)
- La funzione obiettivo è spesso chiamata ipotesi
- Esempio: con una Rete Neurale, una *trained network* (rete addestrata) è un'ipotesi
- L'insieme di tutte le possibili funzioni obiettivo è chiamato lo spazio delle ipotesi
- Il processo di addestramento può essere visto come una ricerca nello spazio delle ipotesi

Teoria e Terminologia ML

- Le tecniche di ML
  - **escludono** alcune ipotesi
  - **preferiscono** alcune ipotesi rispetto ad altre
- Le regole di esclusione e preferenza di una tecnica ML costituiscono la sua capacità (*bias*) di induzione
- Se una tecnica non è "biased" (cioè dotata di *buone* regole), non può imparare e quindi **generalizzare**
- Esempio: i bambini che imparano a fare le moltiplicazioni (comprendere invece che imparare a memoria: quanti danni vengono fatti alle elementari…)

Teoria e Terminologia ML

- Idealmente, una tecnica ML
  - non deve escludere l'ipotesi "corretta", cioè lo spazio delle ipotesi deve includere l'ipotesi obiettivo;
  - preferisce l'ipotesi obiettivo sulle altre.
- Misurare il grado di soddisfacimento di tali criteri è importante e talvolta complicato

Valutazione di Ipotesi

- Spesso la conoscenza della "bontà" di un'ipotesi:
  1. è necessaria per sapere come si comporterà nel mondo reale;
  2. può essere usata per migliorare la tecnica di apprendimento o perfezionare i suoi parametri;
  3. può essere usata da un algoritmo di apprendimento per migliorare automaticamente l'ipotesi.
- Di solito la valutazione viene effettuata su dati di test
  - i dati di test devono essere separati dai dati usati nella fase di apprendimento;
  - i dati di test usati sono di solito noti come dati di validazione o hold-out;
  - i dati di addestramento (training), validazione e test dovrebbero sempre essere diversi e non essere mescolati tra di loro.

Valutazione di Ipotesi

- Alcune misure statistiche utilizzate sono: error rate (tasso di errore), accuracy (accuratezza), precision (precisione, cioè esattezza), recall (sensibilità, cioè completezza), F1
- Vengono calcolate per mezzo di tabelle di contingenza

		Reale Sì	*Reale* No
Calcolato	Sì	a	b
Calcolato	No	c	d

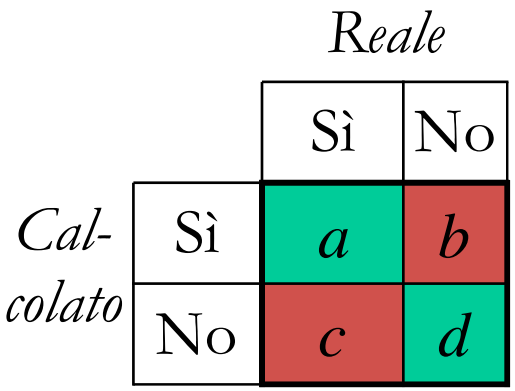
a = True Positive (TP)

b = False Positive (FP)

c = False Negative (FN)

d = True Negative (TP)

Valutazione di Ipotesi



- Error rate = $(b+c)/(a+b+c+d)$
- Accuracy = $(a+d)/(a+b+c+d)$
- Precision = $p = a/(a+b)$
- Recall = $r = a/(a+c)$
- $F_1 = 2 \cdot p \cdot r/(p+r)$

- Precision = frazione di "veri positivi" tra i casi trovati positivi
- Recall = frazione di "veri positivi" trovati rispetto a tutti i veri positivi
- F_1 combina precision e recall per una valutazione più completa

Valutazione di Ipotesi

		Reale Sì	*Reale* No
Calcolato	Sì	2663	467
Calcolato	No	1081	2675

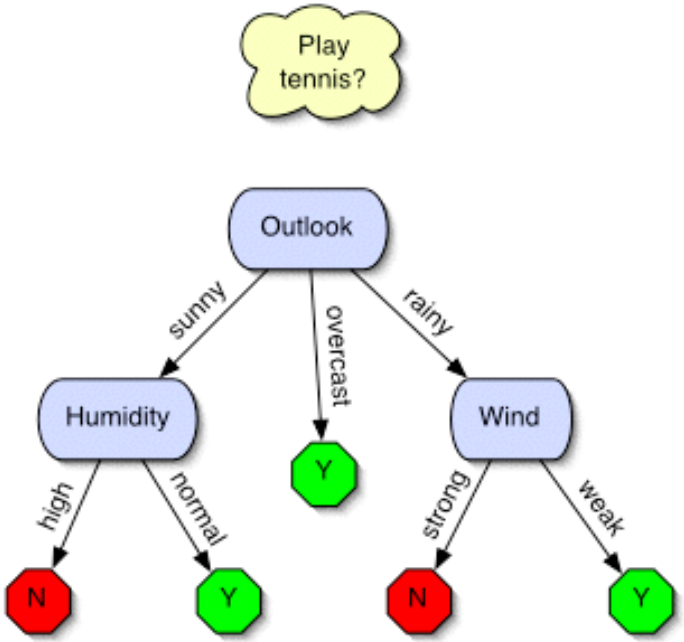
- Esempio (di classificazione)
- Si osservi che la *precision* è più alta del *recall* – questo indica un classificatore "cauto"

Precision = 0.851, Recall = 0.711, $F_1 = 0.775$

Questi valori dipendono dal tipo di classificazione (e dal numero di classi), e non vanno confrontati con altre classificazioni.

Spesso è utile confrontare le classi separatamente, quindi fare la media *(macro-averaging)*.

Alberi di Decisione



- Concettualmente semplici
- Rapida valutazione
- Strutture di decisione esaminabili
- Possono *apprendere* da dati di training
- Possono essere difficili da costruire
- Possibile "overfit" dei dati di training
- Di solito sono preferibili alberi di decisione più semplici, cioè più *piccoli*

Alberi di Decisione

- Esempio di dati di training (il noto dataset "Play tennis?"):

Outlook	Temp	Humid	Wind	Play?
Sunny	Hot	High	Weak	No
Sunny	Hot	High	Strong	No
Overcast	Hot	High	Weak	Yes
Rain	Mild	High	Weak	Yes
Rain	Cool	Normal	Weak	Yes
Rain	Cool	Normal	Strong	No
Overcast	Cool	Normal	Strong	Yes
		. . .		

Alberi di Decisione

- Come costruiamo l'albero dai dati di addestramento?
- Vogliamo ottenere alberi il più piccoli possibile.
- Quale attributo (Outlook, Wind, etc.) è il miglior classificatore?
- Abbiamo bisogno di una misura di quanto un attributo contribuisca al risultato finale della classificazione.
- Si utilizza a tale scopo l'*Information Gain* (IG), che si basa sull'*entropia* dei dati di addestramento.
- L'attributo con il più alto IG è il classificatore "più utile" poichè fornisce la massima riduzione dell'entropia.

Alberi di Decisione

$$Entropy = \sum_i p_i \log_2 \left(\frac{1}{p_i} \right)$$

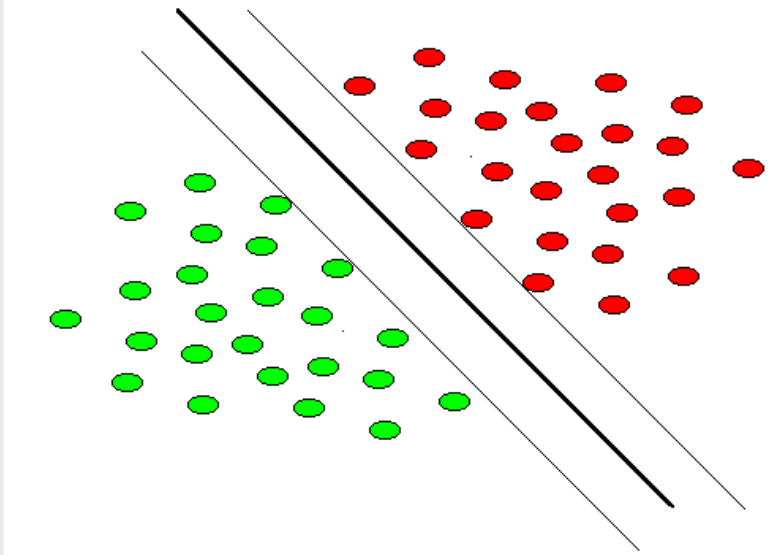
- Deriva dalla teoria dell'informazione (Information Theory) di Claude Shannon.
- Misura l'incertezza di una decisione tra opzioni alternative.
- Si rappresenta con il valore atteso (in senso probabilistico) del numero di bit necessari per specificare il valore di un attributo.
- i rappresenta il valore di un attributo I, p_i rappresenta la probabilità (frequenza) di quel valore.

Alberi di Decisione

$$Gain(S,I) = Entropy(S) - \sum_{i \in I} \frac{|S_i|}{|S|} Entropy(S_i)$$

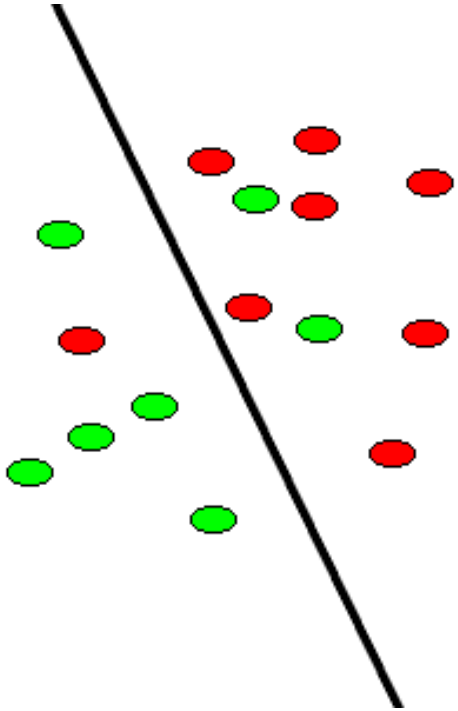
- Gli S_i sono i sottoinsiemi di S in cui l'attributo I ha valore i
- IG è l'entropia originale meno l'entropia dato il valore i
- Ad ogni nodo di decisione (*splitting node*) viene trovato $\text{argmax}_I(Gain(S, I))$
- Per massimizzare IG basta minimizzare il secondo termine sulla destra, essendo $Entropy(S)$ costante
- Questo è noto come "algoritmo ID3" (J. R. Quinlan, 1986)

Support Vector Machine (SVM)



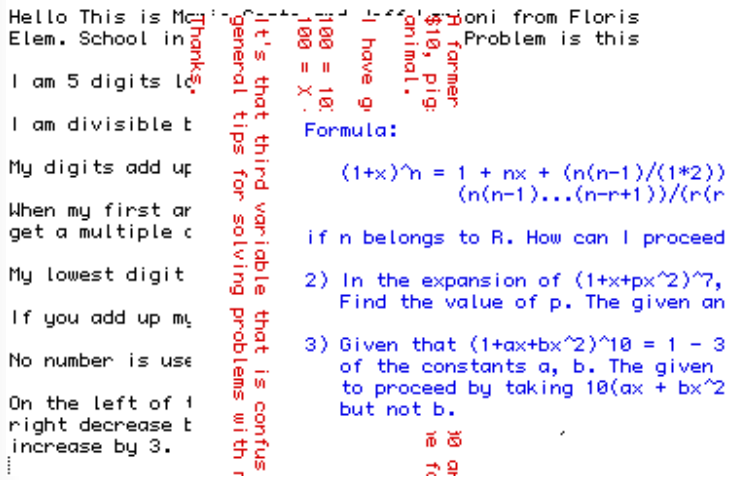
- Un'altra tecnica ML
- Misura le feature (attributi) quantitativamente inducendo uno spazio vettoriale
- Trova la *superficie di decisione* ottima

Support Vector Machine (SVM)



- I dati possono non essere separabili
- Gli stessi algoritmi di solito funzionano per trovare la "migliore" superficie di separazione
- Si possono usare differenti forme di superfici
- Di solito scala bene con il numero di feature, non molto bene con il numero di casi

Classificazione di Testi



- La classificazione di testi (Text Categorization), e la classificazione in generale, è una tecnica ML estremamente potente
- Si applica bene a molte aree:
  - Document management
  - Information Retrieval
  - Gene/protein identification
  - Spam filtering
- Concetto abbastanza semplice
- Comporta molte sfide tecniche

Naïve Bayes Categorization

- Semplice e rapida tecnica di Machine Learning
- Siano $c_{1\ldots m}$ le categorie (classi), e $w_{1\ldots n}$ le parole di un dato documento

$$Best\ \ category = \arg\max_{c_i} p\left(c_i \middle| w_{1..n}\right)$$

Il termine precedente non è computazionalmente fattibile – i dati sono troppo sparsi!

Naïve Bayes Categorization

- Applichiamo il Teorema di Bayes:

$$p(a|b) = \frac{p(a)p(b|a)}{p(b)}$$

$$Best\ \ category = \arg\max_{c_i} \frac{p(c_i)p(w_{1\cdots n}|c_i)}{p(w_{1\cdots n})}$$

$$= \arg\max_{c_i} p(c_i)p(w_{1\cdots n}|c_i)$$

$$\approx \arg\max_{c_i} p(c_i)p(w_1|c_i)p(w_2|c_i)\cdots p(w_n|c_i)$$

Naïve Bayes Categorization

$$\approx \arg\max_{c_i} p(c_i)\,p(w_1|c_i)\,p(w_2|c_i)\cdots p(w_n|c_i)$$

- Le quantità $p(c_i)$ e $p(w_j|c_i)$ possono essere calcolate dal training set
- $p(c_i)$ è la frazione del training set che appartiene alla categoria c_i
- $p(w_j|c_i)$ è la frazione di parole in c_i che sono w_j
- Occorre trattare le parole non esaminate, non vogliamo che nessun $p(w_j|c_i)$ sia zero
- Tipicalmente si vuole che le parole non esaminate siano state viste 0.5 volte (o strategie simili)

Grazie per l'attenzione!