



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PALERMO

SCUOLA POLITECNICA

Corso di Laurea Magistrale in Ingegneria Informatica

Dipartimento di Ingegneria Chimica, Gestionale, Informatica e Meccanica

STUDIO ED IMPLEMENTAZIONE DELL' OBSERVATION PACK ALGORITHM

Tesi di laurea di:

Nicola Ciaco

Relatori:

**Chiar.mo Prof.
Marco Ortolani**

Dott. Pietro Cottone

Anno Accademico
2016\17

Indice

Acronimi	vi
Introduzione	vii
1 Inferenza Induttiva	1
1.1 Apprendimento	1
1.1.1 Definire l'apprendimento	1
1.1.2 Una possibile schematizzazione	2
1.2 Induzione	5
1.2.1 Metodologia di ricerca induttiva	10
2 Inferenza Grammaticale	11
2.1 Connotare l'IIR	11
2.2 Limiti dell' IIR	14
2.3 Passive learning	15
2.3.1 Ricerca nel reticolo	15
2.3.2 Algoritmi concreti	17
3 Algoritmi d'apprendimento	20
3.1 Active Learning	20
3.1.1 Active learning nell' Inferenza Induttiva Regolare	21
3.2 L^*	22
3.2.1 Tabella di Osservazione	23
3.2.2 L'algoritmo	27
3.2.3 Il teacher	29
4 Observation Pack	31
4.1 Fondamenta teoriche	31
4.2 Costruzione dell'ipotesi	32
4.2.1 Tabella di osservazione localizzata	32
4.2.2 Discrimination tree	34
4.2.3 Observation Pack	35
4.3 Gestione Controesempio	35
4.3.1 Classificazione	35
4.3.2 Decomposizione controesempio	37

4.3.3	Metodi decomposizione controesempio	38
4.4	L'algoritmo	41
4.4.1	Funzionamento	41
4.4.2	Correttezza	43
4.4.3	Complessità computazionale	47
4.4.4	Discrimination tree vs Tabella di Osservazione localizzata . .	48
4.4.5	Teacher	51
4.5	Scelte Progettuali	51
5	SVM	54
5.1	Overview teorica	54
5.1.1	Rischio Atteso	55
5.1.2	<i>VC dimension</i>	56
5.1.3	Structural Risk Minimization	58
5.2	SVM	59
5.2.1	Classificazione binaria	60
5.2.2	Classificatore a margine massimo	61
5.2.3	Soft Margin	68
5.2.4	Kernels	71
5.2.5	Versione soft margin kernelized	79
5.2.6	Globalità e unicità della soluzione	80
5.2.7	Dati non bilanciati	81
5.2.8	Algoritmo di ottimizzazione	82
5.3	SVM ^{light}	82
5.3.1	Formato dei file	83
5.3.2	Parametri	84
6	Observation Pack Approssimato	86
A	Preliminari	87
A.1	Notazione matematica	87
A.1.1	Insiemi	87
A.1.2	Relazione d'equivalenza	87
A.2	Linguaggi e grammatiche	88
A.2.1	Alfabeto, stringhe e linguaggi	88
A.2.2	Grammatiche	90
A.3	Automi a stati finiti	92
A.3.1	FSA particolari	94
A.3.2	Funzioni di output regolari	96
B	Prel. e impl. ObP	98
B.1	Notazione specifica per l'ObP	98
B.1.1	Definizioni	98
B.1.2	Def. fram.	99
B.2	Dett. impl. ObP	99

C Prel. add. class.	102
C.1 Bias-Varianza tradeoff	102
C.2 Tecniche selezione class.	103
C.2.1 Holdout	104
C.2.2 Validazione incrociata	105
C.2.3 Algorithm selection	106
C.2.4 Boosting	106
C.3 Data Preprocessing	107
C.3.1 Codifiche	107
C.3.2 Scaling	108
C.3.3 Feature extraction	109
C.4 Addestrare una SVM	109
C.5 Misure	111
Bibliografia	114
Indice analitico	119

Elenco delle figure

1.1	Relazione tra deduzione e induzione	7
4.1	Correlazione tra ipotesi e discrimination tree	35
4.2	LCA di due nodi	36
4.3	Sfruttare il controesempio	38
4.4	DFA ipotesi e corrispondente tabella di osservazione in L^*	49
4.5	Discrimination Tree e split di uno stato	49
5.1	Tre punti shattered nel piano	57
5.2	Principio della SRM	59
5.3	Sottoinsiemi SRM	59
5.4	Lineare separabilità	61
5.5	Esempio iperpiano separatore	63
5.6	Mapping in feature space	72
5.7	Campioni dissimili	76
5.8	Campioni simili differenti etichette	77
5.9	Campioni simili differenti etichette	77
A.1	Gerarchia di linguaggi	91
A.2	Maximal Canonical Automaton	95
A.3	Prefix Tre Acceptor	96
C.1	Bias-Varianza trade-off	103
C.2	Matrice di confusione	111

Elenco delle tabelle

1.1	Deduzione	8
1.2	Induzione	9
1.3	Abduzione	10
4.1	Complessità membership queries ObP	48
4.2	Insieme di componenti	50
5.1	Kernels più noti	74
5.2	Parikh kernel	79
5.3	All 2-subsequences kernel	79

Acronimi

<i>ObP</i>	Observation Pack
<i>IIR</i>	Inferenza Induttiva Regolare
<i>GI</i>	Inferenza Grammaticale
<i>P</i>	enunciati premessa
<i>BK</i>	conoscenze di background
<i>H</i>	ipotesi induttiva
<i>MQ</i>	Membership Query
<i>EQ</i>	Equivalence Query
<i>L</i>	linguaggio target
<i>MAT</i>	Minimally Adequate Teacher
<i>FSA</i>	Finite State Automata
<i>DFA</i>	Deterministic Finite Automata
<i>FSM</i>	Finite State Machine
<i>NFA</i>	Non-Deterministic Finite Automata
<i>DT</i>	Discrimination Tree
<i>LCA</i>	least common ancestor
<i>SVM</i>	Support Vector Machine
<i>VC</i>	Vapnik Chervonenkis
<i>SRM</i>	Structural Risk Minimization
<i>OHE</i>	One Hot Encoding

Introduzione

L'obiettivo di questo lavoro è indagare la capacità di apprendere linguaggi regolari in uno scenario di *Active Learning*, nel caso in cui non si disponga di un *Oracolo* capace di rispondere nativamente ne ad **Equivalence Query (EQ)** ne a **Membership Query (MQ)**. La tesi è volta ad investigare lo scenario in cui si utilizzi **Support Vector Machine (SVM)** come classificatore atto a modellare un *Oracolo*, classificatore costruito a partire da alcuni esempi positivi e negativi del linguaggio da apprendere. In letteratura esistono diversi algoritmi utilizzati per l'apprendimento di linguaggi regolari. L'apprendimento di linguaggi regolari è collocabile nel più ampio tema dell'inferenza grammaticale — usata in una varietà di campi come pattern recognition, biologia computazionale e elaborazione del linguaggio naturale — ed è il processo di automaticamente inferire una grammatica esaminando delle stringhe di un linguaggio sconosciuto. Il modus operandi degli algoritmi d'inferenza grammaticale o regolare è inquadrabile all'interno dell'apprendimento per induzione e per questo è spesso detta **Inferenza Induttiva Regolare (IIR)** (o grammaticale). Il lavoro svolto in questa tesi è volto ad approssimare un *Oracolo* ed è indipendente dallo specifico algoritmo d'IIR, tuttavia per renderlo concreto l'attenzione è stata focalizzata sull'**Observation Pack (ObP)**. Allo stato dell'arte l'*ObP* costituisce il secondo algoritmo di riferimento nell'ambito dell'apprendimento di linguaggi regolari. L'algoritmo più performante è invece il più recente TTT algorithm [41]. Si può trovare una presentazione completa dell'*ObP* in [19] e relativa implementazione nella libreria LearnLib¹. Corredata a questa tesi vi è anche l'implementazione dell'*ObP* in C++11, codice che è stato integrato in Gi-learning [11] una libreria preesistente. Nelle applicazioni reali tuttavia è altamente improbabile la disponibilità di un *Oracolo* in grado di rispondere a delle EQ da cui l'esigenza di un *Oracolo* "approssimato" la cui relativa implementazione oggetto di tesi è stata parimenti integrata in Gi-learning [11]. Il lavoro qui esposto si divide in sette parti. Nel primo capitolo si parlerà dell'inferenza induttiva, e riferendosi alla classificazione proposta in [27], si inquadrerà questo meccanismo nel complesso meccanismo dell'apprendimento. Inoltre, dopo avere messo a confronto l'induzione con la deduzione e l'abduzione verranno passati in rassegna le peculiarità del processo induttivo. Nel secondo capitolo si definirà l'inferenza induttiva grammaticale e saranno scandagliati brevemente i risultati teorici e i limiti dell'IIR. Infine si descriverà brevemente il *Passive Learning* tecnica duale all'*Active Learning*. Nel terzo capitolo sarà presentato brevemente il

¹<http://www.learnlib.de/> Qui *ObP* è menzionato come Discrimination Tree

paradigma dell'*Active Learning* e sarà introdotto e approfondito L^* [2] che può essere considerato il capostipite dell'*ObP*. Nel quarto capitolo verrà esposto in maniera dettagliata la ratio che muove l'*ObP*. Inoltre verranno riportate le scelte discostanti dal riferimento principale dell'algoritmo [19] e le motivazioni. Nel quinto capitolo si passerà in rassegna *SVM* il metodo statistico scandagliato per costruire l'*Oracolo*. Il sesto capitolo è il cuore della tesi dove sarà descritto in dettaglio il lavoro svolto per costruire l'oracolo approssimato e il suo utilizzo all'interno di *ObP*. Nel settimo capitolo si descriveranno criticamente i risultati sui test eseguiti sul programma al fine di valutarne le prestazioni sia in termini di accuracy del classificatore ottenuto che in termini di similarità tra il **Deterministic Finite Automata (DFA)** inferito e il *DFA* target. Inoltre si esaminerà come e quando è possibile variare alcuni parametri dell'algoritmo al fine di migliorarne le prestazioni e in quali contesti (complessità del linguaggio target, numero di esempi del linguaggio da apprendere) è possibile avere un livello di fiducia alto sull'utilizzo dell'algoritmo.

Capitolo 1

Inferenza Induttiva

Il metodo induttivo o induzione è un procedimento logico per cui dalla constatazione di fatti particolari si risale ad affermazioni o formulazioni generali. Si suole quindi indicare con il termine induzione il passaggio dal *particolare* al *generale*. Con il termine **Inferenza Induttiva** si indica un processo che partendo da degli esempi specifici congettura delle regole generali. L'inferenza induttiva gioca un ruolo fondamentale nel più vasto scenario dell'apprendimento ed in ogni contesto che si prefigge la scoperta di strutture universali. L'applicazione di questo metodo scientifico, intrinseco agli esseri intelligenti, all'interno delle macchine ha portato alla nascita di diversi filoni di ricerca. Uno dei più rilevanti tratta dei complessi meccanismi che consentono ad un uomo di imparare un linguaggio.

1.1 Apprendimento

1.1.1 Definire l'apprendimento

Insieme alla capacità di pianificare cioè elaborare piani, la capacità di apprendere è ritenuta uno dei segni distintivi di un sistema intelligente. Un sistema si può considerare autonomo fintantochè le sue azioni sono determinate dalle esperienze pregresse e dalle percezioni correnti, invece che dal suo progettista (si pensi agli agenti stimolo-risposta). Senza la capacità di apprendimento un sistema non sarà in grado di operare con successo in qualsiasi ambiente ma solo in quelli previsti dal suo progettista. Nonostante la grande importanza dell'apprendimento, una conclusione largamente diffusa è che non sia possibile darne una definizione precisa: si procede invece analizzando gli effetti che l'apprendimento ha eventualmente prodotto.

Due concetti rivestono un ruolo importante nell'apprendimento:

- Il miglioramento delle capacità del sistema che apprende
- L'acquisizione di nuova conoscenza

Simon [40] approfondisce cosa significa migliorare le capacità di un sistema mediante l'apprendimento: *L'apprendimento identifica delle modifiche in un sistema che sono*

adattive, nel senso che consentono al sistema di svolgere lo stesso goal, o goals analoghi, in maniera migliore nel futuro. E' doveroso però osservare che esistono sistemi che migliorano nel tempo senza essere soggetti a nessun processo di apprendimento e che esistono degli scenari in cui non è facile calare la definizione data da Simon.

L'altro fattore che contraddistingue l'apprendimento è l'acquisizione di nuove conoscenze che presuppone a monte una rappresentazione della conoscenza in maniera descrittiva o iconica per potere rappresentare la nuova conoscenza avvenuta mediante l'apprendimento. In quest'ottica *l'apprendimento è creare e modificare rappresentazioni di ciò che è stato sperimentato.* Laddove con sperimentare si intende sia l'informazione proveniente dall'apparato sensoriale dell'agente sia ciò che il sistema recepisce mediante processi interni (ad esempio ripetere più volte una frase tra sé e sé ci consente d'impararla nonostante non è avvenuto nessuno stimolo dai nostri sensi). Da questo punto di vista apprendere significa costruire una rappresentazione della realtà anziché un miglioramento delle capacità dell'agente, aspetto quest'ultimo considerato come una conseguenza.

E' possibile quindi constatare il grado di apprendimento di un sistema misurando i miglioramenti nel portare a compimento un certo job dopo l'apprendimento. (Miglioramenti che implicitamente sono considerati una conseguenza della rappresentazione interna dell'agente della realtà esterna). Si fa presente che in questa caratterizzazione si assume che l'agente abbia un obiettivo e che tale obiettivo sia conosciuto all'osservatore che valuta l'apprendimento.

1.1.2 Una possibile schematizzazione

Esistono diverse possibilità di classificare i fattori che influenzano l'apprendimento. Michalski [29] propone una divisione basata sulle caratteristiche del sistema che apprende.

Michalski esegue una prima distinzione in base alla quantità di conoscenze iniziali di cui il sistema è dotato. Ai due estremi della classificazione troviamo le reti neurali artificiali e i sistemi esperti. Nel contesto dei sistemi dotati di scarse conoscenze iniziali le reti neurali sono uno strumento largamente usato: le connessioni dei neuroni che costituiscono il sistema, sono determinate in maniera essenziale dagli esempi presentati e solo marginalmente dai valori iniziali (di solito casuali) delle connessioni. Nella progettazione di un sistema esperto invece una grande quantità di informazione viene fornita al sistema. Un altro approccio, suggerito da Michalski, propone di suddividere i sistemi artificiali che apprendono in base al tipo di manipolazione eseguita dal **learner** (sistema che apprende) sull'informazione proveniente dall'esterno. In ogni processo di apprendimento il *learner* trasforma l'informazione fornita da un *teacher*, o più in generale da un **informant** sorgente di informazione, in una nuova forma che viene poi memorizzata per usi futuri. Questa trasformazione dell'informazione, che fa uso anche delle conoscenze già possedute dal *learner* viene chiamata **inferenza**. Il tipo di trasformazione eseguita determina la strategia di ap-

prendimento di cui il sistema fa uso. Si possono distinguere, seguendo esattamente Michalski in [27], cinque diverse strategie:

- Apprendimento per *imitazione*
- Apprendimento per *istruzioni*
- Apprendimento per *deduzione*
- Apprendimento per *analogia*
- Apprendimento per *induzione*

Queste strategie sono elencate in ordine crescente di complessità del learning e decrescente di difficoltà del teaching. Michalski attua questa classificazione restringendo l'ambito di applicabilità al **concept learning** una branca del machine learning. Un sistema intelligente deve essere abile nel classificare alcuni oggetti, eventi o comportamenti come equivalenti per raggiungere un determinato goal. Detto in maniera succinta un sistema intelligente deve essere capace di individuare i *concetti*.

Definizione 1.1. Un **concetto** è una classe di equivalenza per cui esiste un metodo operativo che permette di discriminare le istanze come appartenenti o non appartenenti al concetto.

Dove le istanze sono le singole entità della classe di equivalenza (del concetto), cioè gli esempi presentati dall'informant. Un *learner* impara un concetto quando, tramite una procedura effettiva, è in grado di distinguere le entità che appartengono al concetto da quelle che non appartengono. Adesso si prenderanno brevemente in esame le cinque strategie di apprendimento contestualizzandole nel *concept learning*:

Apprendimento per imitazione Questo è il caso estremo in cui il *learner* non deve effettuare alcuna inferenza sulle informazioni che gli provengono dall'*informant*. Infatti questo metodo è anche detto da Michalski impianto diretto di conoscenza (meglio conosciuto ancora come rote learning) proprio perchè il *learner* non deve fare altro che indicizzare l'informazione per poterla poi recuperare. In questo caso l'*informant* fornirà una descrizione del concetto in input al *learner*. Questa strategia è usata quando uno specifico algoritmo per riconoscere un concetto è implementato su un calcolatore (oppure vi è a disposizione un database di fatti che permette di riconoscere il concetto). Ad esempio nei primi programmi che giocavano a scacchi si salvavano i risultati dell'esplorazione del grafo di ricerca (in alcuni punti che rappresentano possibili situazioni in una partita) in un albero di gioco in modo che quando una situazione già memorizzata si fosse presentata in una partita reale si potesse risparmiare spazio e tempo di esecuzione.

Apprendimento per istruzioni In questo caso il *learner* acquisisce un concetto da un *teacher*, o da un'altra forma organizzata di informazione, come una pubblicazione o un libro, ma non copia direttamente in memoria l'informazione

acquisita. Nell'apprendimento per istruzioni le trasformazioni sull'informazione eseguite dal *learner* sono la selezione e la riformulazione a livello sintattico. Il processo di apprendimento può consistere nel selezionare i fatti più importanti e poi trasformarli in una forma più appropriata. Un programma che costruisce una database di fatti e regole sulla base di una conversazione con un utente è un esempio di sistema che apprende per istruzioni.

Apprendimento per deduzione Il *learner* acquisisce un concetto deducendolo dalle conoscenze fornite dall' *informant* insieme a quelle che il sistema già possedeva. Inoltre, questa strategia include ogni processo nel quale la conoscenza appresa è il risultato di una trasformazione che preserva la verità delle informazioni generate dall' *informant* e di ciò che viene inferito. All'interno dell'apprendimento dei concetti, l'apprendimento per deduzione tramite il processo inferenziale trasforma una definizione non adoperabile per discriminare il concetto, in una definizione operativa adatta a questo scopo. Ad esempio dal fatto che una giarra sia un oggetto stabile e trasportabile, si può dedurre che la brocca ha un fondo piatto e un manico.

Apprendimento per analogia Il *learner* acquisisce un nuovo concetto modificando la definizione di un concetto simile già noto. Anzichè formulare una descrizione del concetto ex novo, il sistema adatta una descrizione esistente modificandola appropriatamente per il nuovo scopo. Ad esempio se già si conosce una regola che definisce il concetto di arancia, per imparare il concetto di mandarino si possono notificare le differenze e le similitudini tra arancia e mandarino. L'apprendimento per analogia può essere visto come un incrocio tra l'apprendimento deduttivo e quello induttivo. Attraverso l'inferenza induttiva si possono determinare le caratteristiche generali o le trasformazioni che unificano i concetti confrontati. Poi, attraverso un'inferenza deduttiva si possono derivare le proprietà caratterizzanti possedute dal concetto che deve essere appreso

Apprendimento per induzione In questa strategia il *learner* acquisisce un concetto effettuando inferenza induttiva sui fatti forniti dall' *informant* o in base a delle osservazioni su tali fatti. Esistono due differenti forme di questa strategia:

1. **Apprendimento da esempi**

Al *learner* partendo da degli esempi specifici (istanze del concetto) ed eventualmente dei controntroesempi induce una descrizione del concetto catturando la struttura generale. Si assume che il concetto esiste e che esiste anche un metodo effettivo per testare l'appartenenza di un'istanza ad un concetto. Il compito del *learner* è determinare una descrizione del concetto analizzando le singole istanze del concetto. Questa strategia è utilizzata nell' *IIR*

2. **Apprendimento per osservazione e scoperta**

Il *learner* analizza le entità in input e determina che qualche sottoinsieme

di queste entità può essere raggruppato in un singolo concetto. Poichè , diversamente dall'apprendimento da esempi, non c'è un *teacher* che conosce in anticipo i concetti questa strategia è talvolta menzionata come *unsupervised learning*. Un esempio è il *clustering* cioè il partizionamento di una collezione di oggetti all'interno di gruppi o classi che avviene in maniera gerarchica; l'eredità gioca un ruolo importante: se un'entità è riconosciuta appartenere ad un determinato concetto erediterà da esso e dai concetti più in alto nella gerarchia tutte le proprietà . Ad esempio se si apprende che Freddy è un elefante, allora si può, senza vedere Freddy, dire che ha la proboscide e tutte le proprietà degli elefanti e più in generale anche degli erbivori e dei mammiferi.

1.2 Induzione

L'induzione è quel procedimento logico che permette di passare dal particolare all'universale. Questa definizione è troppo semplice e non spiega tutte le componenti in gioco nel processo induttivo. A tal fine si seguirà ancora [27]. Qui le principali componenti induttive sono più precisamente distinte e specificate nel contesto della manipolazione simbolica:

Dati i seguenti elementi di partenza

- Gli **enunciati premessa (P)** che comprendono fatti, generalizzazioni intermedie, specifiche osservazioni che forniscono informazioni su oggetti, fenomeni, processi eccetera. Costituiscono l'input del processo inferenziale.
- Le **conoscenze di background (BK)** che contengono concetti generali o specifici del dominio, che permettono di interpretare gli enunciati premessa e le regole rilevanti per l'inferenza. Ed includono concetti precedentemente imparati, vincoli del dominio, relazioni di causalità, goals dell'inferenza, e metodi per valutare la bontà di una congettura in base al goal (criterio di preferenza)

si determina alla fine dell'inferenza induttiva

- Una **ipotesi induttiva (H)** che implica gli enunciati premessa nel contesto delle conoscenze di background ed è l'ipotesi migliore in base al criterio di preferenza.

Si dice che H implica fortemente P nel contesto di BK se usando BK e l'inferenza deduttiva P è una conseguenza logica di H . Schematizzando si ottiene l'equazione

$$H \vee BK \implies P \quad (1.1)$$

che è vera con tutte le possibili *interpretazioni*. In contrasto H implica debolmente gli enunciati premessa nel contesto delle BK se usando le BK e l'inferenza deduttiva P è solo una conseguenza plausibile ma non una conseguenza logica. Michalski fornisce un esempio di quanto appena detto:

Enunciati premessa

Aristotele era greco
Socrate era greco
Platone era greco

Conoscenze di background

Socrate, Aristotele e Platone erano filosofi
Sono vissuti nell'antichità
I greci sono persone
I filosofi sono persone
Criterio di preferenza: Si preferiscono le ipotesi più corte e più utili per decidere la nazionalità dei filosofi

Le **ipotesi induttive** sono:

1. I filosofi che hanno vissuto nell'antichità erano greci
2. Tutti i filosofi sono greci
3. Tutte le persone sono greche

L'ipotesi da preferire, in base al criterio di preferenza, è la 2, perchè è più breve della 1 e più specifica della 3; consente a differenza della 1 di determinare la nazionalità di tutti i filosofi. Si può dimostrare che questa ipotesi induttiva è un'ipotesi forte, poichè P risulta essere una conseguenza logica di H e delle BK .

Supponiamo di aggiungere alla premessa gli enunciati Locke era inglese e Hume era inglese e di modificare le BK aggiungendo il fatto che sia Locke che Hume erano filosofi. In questo caso una ipotesi induttiva forte potrebbe essere che tutti i filosofi erano greci, con l'eccezione di Locke e Hume. Mentre una ipotesi induttiva debole potrebbe essere che alcuni filosofi erano greci. Dal fatto che Platone era un filosofo e sulla base di questa nuova ipotesi debole non consegue che Platone era greco, consegue solo che c'è la possibilità che Platone fosse greco.

Senza pretesa di esaustività si accenna ad altri tipi di inferenza presenti nel pensiero logico con lo scopo di fare emergere le peculiarità dell'inferenza induttiva. L'inferenza sta alla base dell'apprendimento. Seguendo [28] l'apprendimento si può sintetizzare in *apprendimento* = *inferenza* + *memorizzazione* (definizione leggermente diversa da quella data in 1.1.1) quindi una completa teoria dell'apprendimento deve includere una completa teoria dell'inferenza [28]. Viene innanzitutto generalizzata l'equazione (1.1) valida solo per l'induzione ottenendo:

$$Q \vee BK \models C \quad (1.2)$$

detta **equazione fondamentale** per l'inferenza. Poi Michalsky effettua una prima suddivisione tra i metodi d'inferenza:

1. conclusivi
2. contingenti

Nel secondo caso nell'equazione (1.2) C è solo una plausibile, parziale, probabilistica conseguenza logica delle BK e di Q . Nell'inferenza conclusiva invece la conseguenza logica è garantita. Le proprietà dell'inferenza induttiva sono confrontate con quelle dell'inferenza deduttiva ed emerge che sono duali come si vede in figura 1.1 La

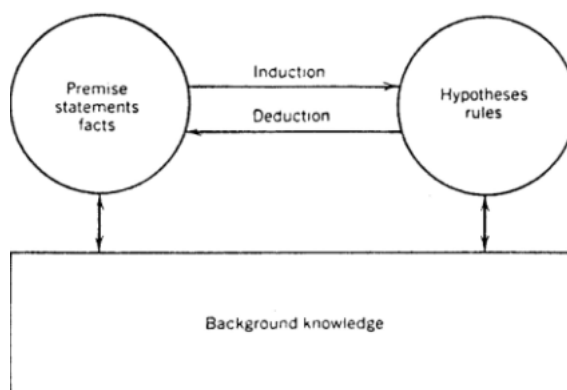


Figura 1.1: Relazione tra deduzione e induzione

relazione logica (1.2) succintamente cattura la relazione tra i due tipi d'inferenza. L'inferenza deduttiva deriva logicamente C date BK e Q . L'inferenza induttiva invece va ad ipotizzare Q date BK e C . La deduzione è il processo di determinare una conseguenza logica a partire da una conoscenza data, ed è *truth-preserving* (C deve essere vero se BK e Q sono veri). In contrasto l'induzione sta ipotizzando un Q che insieme con BK implica l'input C , ed è *false-preserving* (se C è falso allora anche Q deve essere falso. Cioè se l'input in ingresso è falso anche le ipotesi congetturate saranno false). La deduzione contingente invece suona come debole in quanto è debolmente *true-preserving* cioè produce conseguenze che possono essere vere in alcune situazioni e false in altre. Analogamente l'induzione contingente è debolmente *false-preserving*.

In [28] l'inferenza viene considerata come un processo che prende in Input un enunciato e tramite le BK già possedute (ed eventualmente la conoscenza dei criteri di preferenza per il goal che permette di restringere tutte le possibili ipotesi tra le quali scegliere) fornisce un enunciato in Output. In quest'ottica le proprietà dell'induzione sono messe in risalto dal confronto con quelle della deduzione e dell'abduzione fornendo per ciascuno di essi degli esempi chiarificatori.

1. DEDUZIONE tabella 1.1 Riferendosi all'equazione fondamentale (1.2) l'Input sta per Q e l'Output sta per C . L'Input consiste in un enunciato che afferma l'appartenenza di un elemento a ad X . Le BK sono costituite da un enunciato

che assegna una certa proprietà q agli elementi dell'insieme X , e da una regola logica detta *regola di specializzazione universale*. L'inferenza consiste solo nell'applicazione di tale regola che essendo una tautologia¹ fa sì che il risultato dell'inferenza deduttiva assuma pure valore logico vero. Questo è un esempio di inferenza deduttiva conclusiva dato che l'Output è sempre una conseguenza logica dell'Input e delle BK

Input	$a \in X$	a è un elemento di X
BK	$\forall x \in X, q(x)$	Tutti gli elementi di X hanno la proprietà q .
	$\forall x \in X, q(x) \implies (a \in X \implies q(a))$	Se tutti gli elementi di X hanno la proprietà q , allora ogni elemento di x , e quindi anche a , deve avere la proprietà q
Output	$q(a)$	a ha la proprietà q

Tabella 1.1: Deduzione

2. INDUZIONE tabella 1.2 Riferendosi all'equazione fondamentale (1.2) l'Input è la conseguenza C e l'Output è Q (l'ipotesi). Si può dimostrare che l'Input è conseguenza logica dell'Output (l'ipotesi) e delle BK quindi dato che l'equazione fondamentale 1.2 è rispettata l'inferenza è conclusiva (forte). Infatti nel processo inferenziale è *false-preserving* se l'Input fosse falso (a non ha la proprietà q) allora l'Output avrebbe dovuto essere pure falso. Da rimarcare è che l'Output dell'inferenza induttiva (sia che sia conclusiva che contingente) non ha un valore di verità sempre vero ma può essere vero o falso (anche se l'Input e le BK sono vere) da cui deriva il termine ipotesi per connotare l'Output. Essa si basa sull'assunzione che determinate regolarità osservate in un fenomeno continueranno a manifestarsi nella stessa forma anche in futuro e quindi generalizza ciò che è vero per alcune istanze ad un insieme più grande. Invece nell'inferenza deduttiva conclusiva è garantito logicamente che l'Output assuma valore di verità vero se l'Input e le BK sono pure vere perchè ciò che è vero in generale resta vero in un caso specifico contemplato dalla regola generale.

Nell'esempio riportato le conoscenze di BK sono le stesse della deduzione. Tuttavia l'Output (l'ipotesi) è ottenuto tracciando all'indietro la *regola di specializzazione universale*. Quindi l'inferenza consiste nel supporre l'implicazione presente nella regola di specializzazione valida anche nel verso opposto, perciò

¹E' un enunciato che ha sempre valore logico vero

si dice che l'induzione è una regola d'inferenza all'indietro a la deduzione una regola d'inferenza in avanti.

Input	$q(a)$	a ha la proprietà q
BK	$a \in X$	a è un elemento dell'insieme X .
	$\forall x \in X, q(x) \implies (a \in X \implies q(a))$	Se tutti gli elementi di X hanno la proprietà q , allora ogni elemento di x , e quindi anche a , deve avere la proprietà q
Output	$\forall x \in X, q(x)$	Tutti gli elementi di X hanno la proprietà q

Tabella 1.2: Induzione

3. ABDUZIONE tabella 1.3 In riferimento all'equazione (1.2) l'Output è Q e l'Input è C . Si può dimostrare che l'Input è conseguenza logica dell'Output (l'ipotesi) e delle BK quindi dato che l'equazione fondamentale 1.2 è rispettata l'inferenza è conclusiva (forte). Come nel caso dell'induzione l'inferenza abduttiva conclusiva è *false-preserving*. Come nell'induzione l'Output è solo un' ipotesi e quindi il suo valore di verità è incerto e c'è solo una probabilità che sia vero. L'abduzione, come l'induzione, non contiene in sé la sua validità logica e deve essere confermata per via empirica. Nell'abduzione come nell'induzione la regola implicativa di specializzazione universale viene tracciata all'indietro. Tuttavia c'è un'importante differenza infatti nell'induzione la regola implicativa nelle BK costituisce una tautologia mentre nel caso dell'abduzione rappresenta una verità solo nel dominio di conoscenza e non una verità universale.

Nell'esempio specifico si assume che un elemento a gode della proprietà q . Le BK consistono in un unico enunciato, che esprime il fatto che tutti gli elementi di un certo insieme X hanno la proprietà q . L'inferenza abduttiva produce in Output un enunciato che asserisce l'appartenenza di a ad X . Intuitivamente tutti gli elementi che appartengono ad un insieme X hanno una proprietà; dall'input si ha che un elemento a ha quella proprietà; siccome tutti gli elementi appartenenti all'insieme X possiedono quella stessa proprietà si suppone che a appartiene all'insieme X

Input	$q(a)$	a ha la proprietà q
BK	$\forall x, x \in X \implies q(x)$	Se x è un elemento di X allora x ha la proprietà q .
Output	$a \in X$	a è un elemento di X

Tabella 1.3: Abduzione

1.2.1 Metodologia di ricerca induttiva

Si introduce brevemente, seguendo ancora [27] il *learning da esempi* induttivo di un concetto come un problema di ricerca in uno spazio. L'algoritmo inferenziale induttivo riceve in ingresso degli esempi (ed eventualmente anche controesempi) , di membri del concetto target (specifiche istanze) , sottoinsieme dello **spazio delle istanze** che costituisce l'insieme di tutte le possibili istanze osservabili. Lo **spazio dei concetti** costituisce invece l'insieme di tutti i possibili concetti (tutte le possibili soluzioni). I concetti quasi sempre necessitano di una descrizione, un linguaggio che formalmente consente di definire operativamente un concetto e per questo si parla in maniera interscambiabile di **spazio delle descrizioni**. Un concetto è consistente se accetta alcuni esempi positivi e rifiuta tutti quelli negativi; è completo invece quando accetta tutti gli esempi positivi. La macchina inferenziale induttiva ha lo scopo di selezionare un'ipotesi dallo **spazio delle ipotesi** che sia consistente e completa con gli esempi visti. Lo spazio delle ipotesi è un sottoinsieme dello spazio dei concetti. All'aumentare degli esempi visti lo spazio delle ipotesi si riduce, tuttavia le ipotesi valide possono comunque essere numerose e spesso è necessario utilizzare dei criteri di preferenza per scegliere l'ipotesi corrente. E' necessario anche definire dei criteri di terminazione per sancire la ricerca conclusa. In sintesi il *concept learning induttivo* può essere descritto come una ricerca euristica nello spazio delle descrizioni della migliore ipotesi tra tutte quelle consistenti e complete rispetto agli esempi forniti.

Capitolo 2

Inferenza Grammaticale

L' **Inferenza Grammaticale** (**GI**) è considerata una branca del *machine learning* sebbene il primo algoritmo di *GI* sia più datato della nascita del concetto di machine learning. Più in dettaglio *GI* è un'istanza dell'inferenza induttiva e in particolare dell'apprendimento per induzione da esempi introdotti in 1.1.2, e può quindi essere descritto come il problema di congetturare un linguaggio target sconosciuto a partire da un *training set* che di solito comprende un insieme finito di stringhe S^+ appartenenti ad un **linguaggio target** (\mathcal{L}), definite su un alfabeto Σ , dette positive ed eventualmente anche un insieme finito di stringhe negative S^- che non appartengono ad \mathcal{L} .

Sebbene il nome *inferenza grammaticale* potrebbe suggerire che l'*output* di un algoritmo d'*inferenza grammaticale* sia una grammatica non è questo il caso — qualsiasi altra descrizione di un linguaggio come un automa, un'espressione regolare, ecc. può essere pure usata. In questa tesi l'attenzione è volta agli algoritmi di *GI* il cui *linguaggio target* appartiene alla classe più semplice della gerarchia di Chomsky: i linguaggi regolari. In quest'ultimo caso si suole parlare di **inferenza grammaticale regolare** e talvolta di **inferenza induttiva regolare** (*IIR*).

2.1 Connotare l'IIR

Una caratterizzazione del *learning da esempi* induttivo, seguendo [27], è stata già fornita in 1.2.1. In questa sede è opportuno puntualizzare ed approfondire alcuni dei punti di cui si compone e soprattutto contestualizzarla all'*IIR* dato che la classificazione in 1.2.1 fa riferimento all'apprendimento generico di un concetto e nell'*IIR* si specializza l'oggetto dell'inferenza che diventa un linguaggio regolare. I punti di cui si compone sono¹:

¹Da adesso in poi e per tutto il resto della tesi ci si discosterà dalla definizione di consistenza di Mychalski esposta in 1.2.1 a meno che non venga espressamente indicato. Con consistenza si intenderà che, dato un *DFA* A e un insieme di istanze $S = S^+ \cup S^- \forall x \in S^+ : \lambda^A(x) = 1 \wedge \forall x \in S^- : \lambda^A(x) = 0$

Spazio delle istanze L'algoritmo inferenziale induttivo riceve in ingresso degli esempi (ed eventualmente anche controesempi), di membri del concetto target (specifiche istanze), sottoinsieme dello spazio delle istanze che costituisce l'insieme di tutte le possibili istanze osservabili. Nell'*IIR* le istanze sono delle stringhe definite sull'alfabeto Σ .

Spazio dei concetti E' l'insieme di tutte le possibili soluzioni e nell'*IIR* rappresenta l'insieme dei linguaggi regolari.

Spazio delle descrizioni Costituisce lo spazio che contiene le descrizioni operative degli elementi dello spazio dei concetti. Nell'*IIR* si possono usare le espressioni regolari, gli *NFA* o i *DFA* anche se di norma si usano i *DFA* perchè è garantita l'esistenza di un *DFA* canonico.

Spazio delle ipotesi Lo spazio delle ipotesi contiene quei concetti consistenti con gli esempi osservati ed è quindi un sottoinsieme dello spazio dei concetti.

Criteri di successo Sono i criteri che permettono di decretare che il processo d'inferenza è concluso. Esistono varie tecniche e varianti ma i due metodi principali sono:

- *Identification in the limit*
- *PAC-learning*

Definizione (Identification in the limit). Un linguaggio \mathcal{L} è identificato al limite da un algoritmo di inferenza se ad un certo punto del processo inferenziale l'ipotesi intermedia H generata è una descrizione di \mathcal{L} e da quel punto in poi H non muta al variare delle istanze presentate in ingresso all'algoritmo.

Si è supposto che le istanze presentate in ingresso ad ogni iterazione dell'algoritmo di inferenza siano crescenti e includenti le istanze contenute alle iterazioni precedenti, e che le istanze possano divenire anche infinite. Allora si ha identificazione al limite [15] se a partire da una determinata iterazione dell'algoritmo induttivo H resta invariata.

Nel *PAC-learning* [44] invece si richiede una identificazione solo parziale e probabilistica di \mathcal{L} . Sia \mathcal{L} il target e H l'ipotesi induttiva generata da un algoritmo di *IIR*. Sia D una distribuzione di probabilità di tutte le stringhe su Σ^* allora si ha la seguente definizione:

Definizione (True error). Il *tasso di errore* o *true error* $error_D(H)$ di H rispetto alla distribuzione D e ad \mathcal{L} è

$$error_D(H) = \sum_{x \in \mathcal{L} \oplus L(H)} D(x)$$

Informalmente il *true error* è la probabilità che una stringa estratta casualmente dallo spazio delle istanze — in accordo alla distribuzione di probabilità D — appartenga allo spazio dove H ed \mathcal{L} differiscono. L'algoritmo induttivo nel *PAC-learning* prende due parametri in ingresso l'accuratezza ϵ e la confidenza δ entro cui operare.

Definizione 2.1 (PAC learning). Una classe di linguaggi \mathbb{L} è **PAC-learnable** se esiste un algoritmo A tale che $\forall L \in \mathbb{L}$, per ogni distribuzione D su Σ^* , $\forall \epsilon (0 < \epsilon < 1)$, $\forall \delta (0 < \delta < 1)$, A su istanze fornite in accordo alla distribuzione D produce con probabilità $1 - \delta$ un'ipotesi H tale che $error_D(H) \leq \epsilon$.

E' possibile trovare una caratterizzazione alternativa ma analoga del problema induttivo rispetto a quella data in [4] in cui si effettua una classificazione anche in base a come sono presentate le istanze e al metodo impiegato nello spazio di ricerca:

Presentazione delle istanze Se l'insieme di istanze disponibili per l'algoritmo d'inferenza induttiva regolare, S , per apprendere una *DFA* target A sono tali che $\forall x \in S \lambda^A(x) = 1$ si parla di **presentazione positiva** cioè tutti gli esempi(istanze) sono accettanti nel *DFA* A . In questo caso si scrive $S = S^+$. Questo *setting* è denominato *text learning* [13, p. 217]. Si parla invece di **presentazione completa** quando $S = S^+ \cup S^-$ cioè esistono sia esempi accettanti che rigettanti in simboli $\exists x \in S : \lambda^A(x) = 1 \wedge \exists x \in S : \lambda^A(x) = 0$. Quest ultimo caso è menzionato come *informed learning* [13, p. 237].

Si effettua un'ulteriore suddivisione del tipo di presentazione in base a come gli esempi vengono presentati all'algoritmo di inferenza:

- **Presentazione Given-Data**
Le istanze sono un insieme finito presentate totalmente fin dall'inizio del processo.
- **Presentazione completa**
Le istanze (positive o complete) sono una sequenza infinita e sono presentate in successione (in maniera incrementale).
- Esiste un **Oracolo** che è in grado di rispondere a delle *membership query* ed *equivalence query* ed è la macchina inferenziale che direttamente interroga attivamente l'*Oracolo*. Questa modalità sarà approfondita nel capitolo 3.

Metodo inferenziale Gli algoritmi di *GI* e di *IIR* si possono ricondurre a dei problemi di ricerca in un grafo in cui ogni nodo è un'astrazione che rappresenta uno dei possibili linguaggi dello spazio dei concetti. \mathcal{L} , cioè il target, è da ricercare in questo spazio. Allora con algoritmo d'inferenza *astratto* si intende un algoritmo che ha valenza solo teorica perchè una effettiva realizzazione sarebbe troppo onerosa computazionalmente. Il più importante di questi algoritmi è l'algoritmo di *induzione per numerazione* per il quale esiste la seguente congettura largamente condivisa:

Teorema. *La classe dei linguaggi ricorsivi identificabili al limite da un algoritmo di inferenza grammaticale, è anche identificabile al limite da un algoritmo di induzione per numerazione*

L'induzione per numerazione cerca ad ogni iterazione dell'algoritmo tra le descrizioni di tutti i concetti consistenti con gli esempi in ingresso secondo qualche criterio di preferenza. Tali descrizioni sono tipicamente un insieme di cardinalità infinita e ciò rende questo metodo impraticabile.

Per algoritmi induttivi *concreti* si intende invece quegli algoritmi efficientemente implementabili. Tra questi possiamo distinguere tra:

- **Algoritmi esaustivi**

Sono algoritmi deterministici che sotto opportune condizioni degli esempi d'ingresso garantiscono di trovare il linguaggio target

- **Algoritmi euristici**

Si trasalascia di seguire dei percorsi di ricerca nel grafo per aumentare l'efficienza, di solito a scapito della perdita della garanzia di successo. Tipicamente si usano dei meccanismi aleatori, come nel caso degli algoritmi genetici che manipolano delle informazioni simboliche attraverso dei processi aleatori numerici.

2.2 Limiti dell' IIR

Uno dei problemi dell'*GI* e di *IIR* è che nessun sottoinsieme finito di un insieme infinito ha informazioni sufficienti che gli consentono di inferire con assoluta certezza a quale insieme il sottoinsieme appartiene. Nella fattispecie, dato un insieme finito di stringhe S , appartenente a un linguaggio infinito \mathcal{L} , non si può inferire \mathcal{L} da S con assoluta certezza. Il motivo è che S è un sottoinsieme di molti altri, tipicamente infiniti, linguaggi diversi da \mathcal{L} . Questo problema è stato trattato da Gold in [15] nel paradigma dell'*identification in the limit* ottenendo i seguenti risultati:

Teorema 2.1. *La classe dei linguaggi superfiniti non può essere identificata al limite attraverso una presentazione positiva di esempi.*

Ne consegue che i linguaggi regolari di cui i linguaggi superfiniti sono un sottoinsieme non sono parimenti identificabili al limite solo tramite esempi positivi. Considerando anche gli esempi negativi il seguente teorema sempre in [15] stabilisce il limite alla classe di linguaggi inferibili:

Teorema 2.2. *Non è possibile inferire l'intera classe dei linguaggi ricorsivi attraverso una presentazione completa degli esempi.*

Invece i linguaggi primitivi ricorsivi e quindi anche i linguaggi regolari che sono un sottoinsieme sono identificabili al limite come attesta il seguente risultato:

Teorema 2.3. *La classe dei linguaggi primitivi ricorsivi è identificabile al limite mediante una presentazione completa degli esempi*

Un altro risultato implicito che si evince dal lavoro di Gold è che non possiamo mai essere sicuri di apprendere il linguaggio corretto a meno che il numero di esempi non sia infinito. Con una presentazione finita l'unica cosa di cui possiamo essere certi è della consistenza della soluzione inferita con il *training set* (la presentazione). Se il *training set* è grande aumenta la fiducia nell'approssimazione della soluzione inferita con il linguaggio target sconosciuto ma senza mai esserne certi e questa assunzione è nota come **Inductive Learning Hypothesis** [1]. Con il *PAC-learning* si ottiene pure un'approssimazione del linguaggio target ma è possibile quantificare quanto vicini saranno la soluzione ottenuta ed il target e con quale probabilità.

Un altro problema che va affrontato è che tipicamente il numero di ipotesi consistenti con gli esempi a disposizione è infinito, quindi è necessario stabilire un **inductive preference bias** [1] cioè un criterio di preferenza da usare per selezionare quale delle congetture consistenti rispetto ai dati scegliere. Nel caso dell'*IIR* l'*inductive preference bias* che si adotta è il principio del **Rasoio di Occam** che consiste nello scegliere sempre la soluzione più semplice che nell'*IIR* significa scegliere il *DFA* minimo². Tale scelta da maggiori garanzie che il processo di generalizzazione abbia avuto luogo scongiurando il rischio di *overfitting* cioè di un *DFA* sovradattato agli esempi dati.

Il seguente risultato negativo è relativo a quest ultimo requisito di trovare il *DFA* minimo:

Teorema 2.4. *Trovare il più piccolo automa finito deterministico consistente rispetto a un insieme di esempi completo è un problema NP-hard [14].*

2.3 Passive learning

Gli studi su *GI* si possono suddivedere in due filoni, uno volto ad indagare i limiti teorici dell'apprendimento di linguaggi in determinati paradigmi ,come in 2.2, e l'altro volto a superare sotto opportune assunzioni i limiti teorici emersi rendendo gli algoritmi utilizzabili in termini di efficienza computazionale. Quest ultimo tema sarà affrontato adesso volgendo in particolare l'attenzione sugli algoritmi di **passive learning** e sulla strategia che li governa. La trattazione non sarà volutamente esaustiva dato che l'oggetto di studio di questo lavoro è l'*active learning* che è una tecnica duale rispetto al *passive learning*.

2.3.1 Ricerca nel reticolo

I risultati negativi del teorema 2.4 sull'apprendimento del *DFA* minimo possono essere superati delineando il problema di ricerca del *DFA* minimo come un problema

²Si è soliti scegliere quasi sempre i *DFA* come descrizione di un linguaggio regolare proprio perchè assicurano l'esistenza e l'unicità di un *DFA* minimo

di ricerca in un uno spazio degli stati in cui ogni stato è la modellazione di un *DFA*. La strategia più semplice sarebbe quella enumerativa che ha come grafo di ricerca tutto lo spazio delle descrizioni e preleva da questo spazio l' ipotesi minima. Ma tale tecnica è impraticabile perchè tale spazio ha cardinalità infinita (basta pensare che solo i *DFA* consistenti e completi con un dato *training set* sono di per sè infiniti). Allora si definisce come grafo di ricerca il cosiddetto **reticolo booleano** indicato con $Lattice(PTA(S^+))$ che ha come nodo radice $PTA(S^+)$. La radice può essere modellata come un insieme che comprende tutti gli stati dell'automa $PTA(S^+)$, e l'operatore che consente di generare i nodi figli della radice (e applicando ricorsivamente l'operatore anche ai figli ottenuti consente di derivare anche gli altri nodi) è una relazione d'ordine parziale \approx (cioè binaria transitiva, simmetrica e riflessiva) che applicata al $PTA(S^+)$ consente di derivare gli automi quoziente $PTA(S^+)/\approx$ che non sono altro che una fusione di alcuni degli stati del *DFA* di partenza in base alla relazione d'ordine parziale definita. Inoltre l'automa quoziente A/\approx ottenuto applicando la relazione \approx sul nodo che è un automa A è tale che $L(A) \subseteq L(A/\approx)$ quindi tutti gli automi ottenuti nel reticolo sono consistenti con S^+ ed estendendo il linguaggio da cui sono originati effettuano il processo induttivo generalizzando. Questa tecnica è detta di *state-merging* in quanto ad ogni passo effettua una **fusione** degli stati dell'automa cui la relazione è applicata per ottenere un nuovo nodo e tutto il processo è noto in letteratura come **passive learning**.

Un aspetto che finora è stato trascurato riguarda se il *DFA* minimo è sempre contenuto nel *lattice* altrimenti la procedura di ricerca potrebbe essere infruttuosa. Il seguente teorema [35] dà una risposta affermativa se alcune condizioni sono verificate:

Teorema 2.5. *Se l'insieme di istanze positive S^+ è strutturalmente completo rispetto al DFA minimo target M allora $M \in Lattice(PTA(S^+))$.*

laddove

Definizione 2.2 (Insieme di esempi positivi strutturalmente completo). Un insieme di esempi positivi S^+ è detto **strutturalmente completo** rispetto a un automa M accettante L se

- ogni stato di \mathbb{F}_A^M è impiegato da almeno una stringa di S^+
- ogni transizione di M è utilizzata nell'accettazione di almeno un esempio di S^+

Tuttavia la cardinalità del $Lattice(PTA(S^+))$ se $\|PTA(S^+)\| = n$ è :

$$C_n = \sum_{i=0}^{n-1} \binom{n-1}{i} C_i \quad \text{con } C_0 = 1$$

e rende impraticabile qualsiasi algoritmo di ricerca per enumerazione. Anche una ricerca in ampiezza è impraticabile. Inoltre per avere la garanzia dell'automa minimo nel *lattice* è necessario fare delle assunzioni, analogamente per effettuare una ricerca efficiente nel *lattice* del *DFA* minimo sarà necessario imporre dei vincoli.

2.3.2 Algoritmi concreti

Qui si presentano le peculiarità dei due principali algoritmi di *passive learning* in uno scenario di *informed learning*. La trattazione ivi esposta è qualitativa e di alto livello ed i dettagli implementativi sono tralasciati.

Red-Blue Framework

Questo framework riduce significativamente il numero di possibili *merge* tra stati senza ridurre il numero di possibili soluzioni. Gli algoritmi con questo *setting* mantengono un cuore di stati *red* e una frontiera di stati *blue* che sono gli stati immediatamente raggiungibili (figli diretti) a partire dagli stati *red*. Un algoritmo di *red-blue state-merging* esegue *merges* solo tra stati *blue* e stati *red* e se non sono possibili *red-blue merges* l'algoritmo **promuove** uno stato *blue* a *red*. Gli stati *red* inoltre sono gli stati del *DFA* target che sono già stati identificati. L'idea è stata descritta per la prima volta in [25] in cui una prima versione dell'algoritmo *ED-SM* — che valuta il *merge* tra tutte le coppie di stati dell'ipotesi corrente [25, p. 6] — è migliorata nel *Blue-fringe Algorithm* che secondo il principio di blanda località summenzionato valuta il *merge* solo tra stati di colore *red* e *blue*.

Sebbene la nomenclatura *red-blue framework* non venga ufficialmente introdotta in [25] con questo nome, è adottata in molti autorevoli testi e conferenze di riferimento su *GI* come [13] e [38, p. 70].

RPNI

L'algoritmo *REGULAR POSITIVE AND NEGATIVE INFERENCE* (RPNI) [33] è uno dei più noti algoritmi di *state-merging* che consente di trovare un *DFA* — in uno scenario di *informed learning* — consistente e completo con gli esempi $S = S^+ \cup S^-$ in tempo polinomiale. E' un algoritmo esaustivo che supera il problema della dimensionalità del reticolo booleano eseguendo una ricerca in profondità con backtracking a partire dal $PTA(S^+)$ guidata dagli esempi negativi.

Se S è caratteristico per \mathcal{L} allora RPNI assicura che venga trovato il *DFA* minimo:

Definizione 2.3 (Insieme caratteristico). Un insieme di esempi completo $S = S^+ \cup S^-$ è **caratteristico** per un linguaggio L se:

- S^+ è *strutturalmente completo* (definizione 2.2) per il *DFA* che accetta L
- S^- impedisce il *merge* di due stati p, q di un $DFA \in Lattice(PTA(S^+))$ tali che $p \not\equiv q$ durante un'esplorazione del lattice.

Se viene a mancare la condizione in 2.3 di insieme caratteristico non è assicurata la terminazione con il *DFA* minimo ma è comunque garantito un *DFA* consistente rispetto agli *esempi nel training set* grazie alla proprietà d'inclusione descritta in 2.3.1.

Il funzionamento a grandi linee di RPNI è:

1. Costruire $PTA(S^+)$, numerare gli stati in base all'ordine lessicografico delle stringhe di S^+ e inizializzare l'insieme degli stati *red* con lo stato corrispondente a ϵ e gli stati *blue* con i suoi figli diretti.
2. Per ogni stato *blue* si effettua sul *DFA* corrente (inizialmente è $PTA(S^+)$) il *merge* con ogni stato *red* estraendo gli stati in ordine lessicografico ottenendo un *DFA* temporaneo A .
 - (a) Se $A[S^-] \notin \mathbb{F}_A^A$ il *merge* è valido, i restanti *merge* dello stato *blue* corrente con gli altri eventuali stati *red* non vengono valutati, ed A è il nuovo automa da considerare.
 - (b) Se per il corrente stato *blue* non si trova nessun *merge* compatibile (con nessuno dei nodi *red*), si esegue la sua *promozione* a nodo *red* e gli stati che sono figli diretti di questo nuovo nodo *red* sono aggiunti ai nodi *blue*
3. Torna al punto 2 fin quando l'insieme degli stati *blue* non è vuoto.

Questa procedura può generare condizioni di non-determinismo cioè gli automi intermedi e finale prodotti possono essere degli NFA, per ovviare a questo inconveniente si può rendere il *merge* una procedura ricorsiva che oltre a fondere gli stati rossi e blu effettua eventualmente delle ulteriori fusioni se la condizione di determinismo dell'automato creato dal corrente *merge* non è posseduta. Vedasi [13] per una versione di RPNI che genera sempre *DFA*. Infine il costo computazionale dell'algoritmo nella sua versione originale [33] è $\mathcal{O}((\|S^+\| + \|S^-\|)\|S^+\|^2)$

EDSM

EVIDENCE DRIVE STATE MERGING è un algoritmo di *state-merging euristico* che come RPNI non garantisce di trovare un *DFA* canonico ma solo una soluzione ottima a meno che il *training set* non sia caratteristico 2.3. L'algoritmo nella sua versione base è presentato in [25] ed esistono delle versioni più efficienti come *Blue-fringe EDSM* sempre in [25] che usando il *red-blue framework* limitano notevolmente il numero dei *merge* e ne incrementano le *performances*, ed è questo ultimo che viene brevemente spiegato qui. Il miglioramento rispetto a RPNI è che EDSM non è *greedy* nell'esecuzione dei *merges* ma valuta tutti i merges possibili tra stati *red* e *blue* — invece RPNI selezionerebbe il primo possibile e ignorerebbe gli altri *merges* — e si sceglie il *merge* migliore in base ad un'euristica. La migliore euristica emersa nella competizione Abbandingo è quella di Price che valuta un *merge* non possibile se almeno una stringa accettante e almeno una rigettante rispettivamente di S^+ e S^- terminano nello stesso stato, ed ha invece un punteggio tanto più alto quante più stringhe di S^+ o di S^- (ma non di entrambi gli insiemi, quindi l'*or* è esclusivo) terminano in uno stesso stato del *DFA* *mergiato* che si sta valutando. Si sceglierà il *DFA* col punteggio maggiore.

Un'altra differenza sostanziale rispetto a RPNI in EDSM è la priorità data alle *promozioni* a scapito di possibili fusioni: il *merge* viene effettuato soltanto se tutti i

possibili *merges* tra tutte le coppie di stati *red* e *blue* è possibile secondo l'euristica, altrimenti si privilegia la *promozione* dello stato *blue* a *red*. EDSM costituisce lo stato dell'arte per ciò che riguarda gli algoritmi di *passive learning*.

Capitolo 3

Algoritmi di apprendimento

3.1 Active Learning

L' *Active Learning* è un caso speciale di *semi-supervised machine learning*¹ in cui un algoritmo di *learning* può interagire con l'utente o qualche sorgente d'informazione per ottenere informazioni significative come ad esempio l'etichetta di un'istanza. Nel contesto dell' *IIR* l' *active learning* non esplora il reticolo costruito a partire dal PTA o dall' APTA come fanno gli algoritmi presentati in 2.3.2 ma si basa su una stretta interazione tra il *learner* e il *teacher* detto anche **Oracolo** o **informant**. L' *active learning* è una tecnica duale rispetto al *passive learning*: il *passive learning* è un approccio *top-down* che esplora lo spazio di ricerca a partire dal nodo iniziale (PTA o APTA costruito dagli esempi iniziali) e tramite dei *merges* genera nuovi nodi e nel caso degenerare ha come ultimo nodo l'automa universale, invece l' *active learning* effettua una ricerca *bottom-up* che inizia dall'automa universale e mediante lo *split* degli stati raffina l'ipotesi. Inoltre è il *learner* che sceglie attivamente gli esempi e il *teacher* può selezionare attentamente i controesempi significativi: proprio per queste ragioni spesso il numero di esempi per apprendere un concetto e in generale il tempo di esecuzione del processo di apprendimento è minore negli algoritmi di *active learning* che in quelli di *passive learning*. L' *active learning* nasce per ragioni teoriche come ad esempio per dimostrare che non è possibile apprendere in maniera efficiente alcune classi di linguaggi con una presentazione given-data: nell' *active learning* nel cui contesto è il *learner* che seleziona gli esempi è sufficiente dimostrare che il numero di query non può essere polinomiale. Ma è anche applicabile in numerosi contesti pratici come la Robotica in cui un agente può costruire una mappa usando l'interazione tra i sensori e l'ambiente come *Oracolo* o nella modellazione dell'acquisizione dei linguaggi naturali dove attribuire la figura del *teacher* al genitore risulta naturale. Qui si esaminerà l' *active learning* nell' *IIR*. L* è senz'altro il più noto algoritmo di *active learning* applicato ai linguaggi regolari. Il più recente e performante *Observation Pack* sarà introdotto nel capitolo 4

¹Nel semi-supervised learning una piccola quantità di dati è etichettata e la restante, la maggioranza, è senza etichetta.

3.1.1 Active learning nell' Inferenza Induttiva Regolare

Il paradigma dell' *active learning* si basa sull'esistenza di un *Oracolo* che conosce \mathcal{L} e può rispondere solo a certi tipi di interrogativi sottopostigli dal *learner*. L' *Oracolo* può trovarsi in una situazione in cui più risposte valide sono possibili e in questo caso si deve assumere che non viene rispettata nessuna distribuzione di probabilità nelle risposte date ma che queste sono casuali pertanto nell'analisi dell'algoritmo si deve assumere il caso peggiore cioè un *Oracolo* avverso (nell' algoritmo adoperato nell' *IIR*, il table-filling descritto nella sottosezione 4.4.5, l'*Oracolo* non garantisce di ritornare la **witness** cioè il controesempio più breve). I principali tipi di interrogativi possibili a cui si può sottoporre un *Oracolo* sono:

- **MQ** Una membership query è effettuata proponendo una stringa all' *Oracolo*, che risponde YES se la stringa appartiene a \mathcal{L} e NO se la stringa non appartiene:

$$MQ : \Sigma^* \rightarrow \{\text{YES}, \text{NO}\}$$

- **EQ** (forte) Un'equivalence query (forte) è effettuata proponendo un *DFA* ipotesi H all' *Oracolo* che risponde YES se il *DFA* ipotesi H è equivalente al *DFA* target altrimenti ritorna una stringa (*witness*) appartenente alla differenza simmetrica tra \mathcal{L} e $L(H)$:

$$EQ : DFA \rightarrow \{\text{YES}\} \cup \Sigma^*$$

- **WEQ** (debole) Un'equivalence query (debole) è effettuata proponendo un *DFA* ipotesi H all' *Oracolo* che risponde YES se il *DFA* ipotesi H è equivalente al *DFA* target altrimenti ritorna NO :

$$WEQ : DFA \rightarrow \{\text{YES}, \text{NO}\}$$

- **SSQ** Una subset query è effettuata proponendo un *DFA* ipotesi H all' *Oracolo* che risponde YES se $L(H)$ è un sottoinsieme di \mathcal{L} altrimenti ritorna una stringa appartenente a $L(H)$ che non appartiene ad \mathcal{L} :

$$SSQ : DFA \rightarrow \{\text{YES}\} \cup \Sigma^*$$

I seguenti risultati e definizioni sono in [3]. Si dà la seguente definizione preliminare:

Definizione 3.1. Chiamiamo ρ un'esecuzione del *learner* A . Chiamiamo $\langle r_1, r_2, \dots, r_m \rangle$ la sequenza di risposte alle query $\langle q_1, q_2, \dots, q_m \rangle$ che l' *Oracolo* fa durante l'esecuzione ρ . Si dice che A è **polinomialmente limitato** se esiste un polinomio a due variabili $p()$ che dato qualsiasi formalismo L descrivente \mathcal{L} e in qualsiasi esecuzione ρ , e a qualsiasi *query point* (indica il momento in cui avviene una specifica query) k dell'esecuzione, denotando il tempo di esecuzione prima di quel punto con t_k , si ha:

- $k \leq p(\|L\|, \max\{|r_i| : i < k\})$

- $|q_k| \leq p(\|L\|, \max\{|r_i| : i < k\})$
- $t_k \in \mathcal{O}(p(\|L\|, \max\{|r_i| : i < k\}))$

Informalmente significa che in qualsiasi *query point* k di qualunque esecuzione, al momento precedente l'effettuazione della query q_k , si ha che il numero di query fatte, il tempo di esecuzione e la dimensione della prossima query (q_k) sono tutte limitate da un polinomio p dipendente dalla dimensione del target e dalla lunghezza del più lungo controesempio ritornato dall'*Oracolo* fino a quel punto.

La seguente definizione stabilisce quando una classe di linguaggi è efficientemente *identificabile in the limit* da un algoritmo di *learning*.

Definizione 3.2. Una classe di linguaggi \mathcal{L} è **polinomialmente identificabile in the limit con query** fissati i tipi di query possibili se esiste un **polinomialmente limitato learner** A che dato il formalismo descrivente qualsiasi linguaggio $L \in \mathcal{L}$, identifica L in the limit, cioè ritorna L' equivalente ad L e termina.

Adesso ci si chiede se la classe dei linguaggi regolari è polinomialmente identificabile in the limit tramite qualche algoritmo di apprendimento secondo la definizione 3.2. E' importante sottolineare che la risposta a questa domanda dipende anche dalla classe cui appartiene l'*Oracolo* cioè dal tipo di interrogativi che è possibile rivolgergli. A tal proposito si hanno i seguenti risultati :

Teorema 3.1. *La classe dei linguaggi regolari non è polinomialmente identificabile in the limit da un numero polinomiale di MQ, WEQ e SSQ*

Quindi come conseguenza del teorema 3.1 la classe dei linguaggi regolari non è polinomialmente identificabile in the limit neanche sottoponendo all'*Oracolo* esclusivamente MQ .

Un'ulteriore risultato è il seguente:

Teorema 3.2. *La classe dei linguaggi regolari (usando i DFA come formalismo descrittivo) non è polinomialmente identificabile in the limit da un numero polinomiale di EQ (forti)*

Si rimanda alla sezione 3.2 per le condizioni di polinomiale identificabilità in the limit dei linguaggi regolari

3.2 L^*

L^* è il più noto algoritmo di *active learning* nell'ambito dell' *IIR* e garantisce di emettere in output il DFA minimo (o uno ad esso isomorfo) accettante \mathcal{L} . Detto n il numero degli stati del DFA target minimo ed m la lunghezza del più lungo controesempio ritornato dall' *Oracolo* durante l'inferenza, il costo computazionale di L^* sarà limitato da una funzione polinomiale di n ed m . In L^* il *teacher* appartiene alla classe dei **Minimally Adequate Teacher (MAT)** in grado di rispondere ad

EQ e MQ . Questi risultati, che consentono di dire che i linguaggi regolari sono polinomialmente identificabili in the limit (definizione 3.2), sono stati conseguiti da Dana Angluin [2] e succintamente riportati nel seguente teorema:

Teorema 3.3. *Dato un MAT presentante un linguaggio regolare sconosciuto U , il Learner L^* termina restituendo in output un automa finito isomorfo al DFA minimo accettante il linguaggio target U . Inoltre, se n è il numero di stati del DFA minimo accettante U e m è un limite superiore della lunghezza di ogni controesempio ritornato dal Teacher, allora il costo totale di esecuzione di L^* è limitato da un polinomio in n ed m*

L^* viene presentato all'interno del *red-blue framework* (introdotto in 2.3.2) che in algoritmi come *EDSM* (vedasi sottosezione 2.3.2) consente di diminuire i *merges*. In L^* l'adozione di questo *framework* malgrado non comporti un vantaggio computazionale consente un'esposizione più chiara.

3.2.1 Tabella di Osservazione

Una **tabella di osservazione** è una struttura dati che rappresenta il DFA ipotesi congetturato al passo corrente. Al suo interno sono codificati gli esiti delle MQ richieste al *teacher*.

Definizione (Tabella di Osservazione). La *tabella di osservazione* è una tripla $\langle STA, EXP, OT \rangle$, dove:

- $STA = RED \cup BLUE$. STA è un insieme finito di stringhe definite su Σ che rappresentano gli stati. STA è **prefix-closed**
 $RED \in \Sigma^*$ è un insieme finito di stati
 $BLUE = \{ua \notin RED : u \in RED\}$ è l'insieme dei successori degli stati RED che non sono RED . Rappresentano le transizioni.
- $EXP \in \Sigma^*$ è l'insieme degli esperimenti. E' **suffix-closed**
- $OT : STA \times EXP \rightarrow \{0,1,*\}$ è una funzione così definita:

$$OT[u][e] = \begin{cases} 1 & \text{se } ue \in \mathcal{L} \\ 0 & \text{se } ue \notin \mathcal{L} \\ * & \text{altrimenti} \end{cases}$$

Dalla tabella di osservazione si costruisce una nuova ipotesi e la si sottopone al *teacher*. Se l'ipotesi non è equivalente al *DFA target* il *teacher* torna un controesempio che sarà usato dal *learner* per *splittare* gli stati e modificare la tabella di osservazione per ottenere una nuova ipotesi cofacente al controesempio. Le MQ permettono di riempire i buchi generati dall'introduzione di nuovi prefissi dal controesempio. A partire dalla tabella di osservazione è possibile costruire un DFA ipotesi solo se questa gode di tre proprietà:

Completezza

La completezza garantisce che non ci siano comportamenti parzialmente (o totalmente) sconosciuti per prefissi presenti all'interno della tabella.

Definizione (Tabella completa). Una tabella è completa se non ha *buchi*. Un *buco* in una tabella di osservazione è una coppia (u, e) tale che $OT[u][e] = *$.

L'eventuale incompletezza può essere eliminata mediante *MQ* al *teacher*.

Chiusura

La chiusura (algoritmo 4) assicura che ogni possibile stato raggiunto con una transizione sia presente tra gli stati finali dell'automa. Dato un elemento $s \in STA$ e gli n esperimenti $e \in EXP$ si indica con $row(s)$ la riga in OT indicizzata da s cioè $row(s) = OT[s][e_1] \cdot OT[s][e_2] \cdot \dots \cdot OT[s][e_n]$. Gli stati dell'automa sono un sottoinsieme degli stati RED, quando una transizione da uno stato RED porta ad uno stato BLUE si deve trovare uno stato RED equivalente a quello BLUE (vedasi algoritmo 1) (almeno secondo i suffissi trovati fino a quel momento) in modo che la transizione arrivi in questo stato RED (che è presente nell'automa ipotesi perchè gli stati RED trovati fanno parte del *DFA* ipotesi a differenza di quelli BLUE).

Definizione (Tabella chiusa). Una tabella è **chiusa** se $\forall u \in BLUE, \exists s \in RED : row(u) = row(s)$

Se la tabella di osservazione non fosse chiusa è possibile renderla tale mediante una (o più) **promozione**, cioè l'inserimento di **u** responsabile della non chiusura nei RED e $u \cdot \Sigma$ nei BLUE

Consistenza

La consistenza (algoritmo 5) impedisce situazioni di indeterminismo nel DFA, nella fattispecie che da uno stato dell'ipotesi per uno stesso simbolo dell'alfabeto si giunga in stati di arrivo diversi. Questa situazione è resa possibile dal fatto che l'algoritmo non impedisce di avere due stati RED s_1 ed s_2 tali che $row(s_1) = row(s_2)$.

Definizione (Tabella consistente). Una tabella di osservazione è **consistente** se $\forall s_1, s_2 \in RED : row(s_1) = row(s_2) \implies \forall a \in \Sigma, row(s_1 a) = row(s_2 a)$

La definizione sopra significa che affinché vi sia consistenza ogni coppia di stati equivalenti RED cioè di stati in RED con righe uguali deve restare equivalente in STA aggiungendo qualsiasi simbolo dell'alfabeto. Se la tabella di osservazione non fosse consistente è possibile renderla tale ampliando l'insieme EXP con la stringa composta dal suffisso e dall'esperimento che hanno generato l'inconsistenza. Ciò assicura che i due stati s_1 ed s_2 che prima erano equivalenti (e che quindi rappresentavano un unico stato nell'ipotesi) adesso non lo sono più perchè $row(s_1) \neq row(s_2)$ e quindi sarà aggiunto un nuovo stato all'insieme RED cioè un nuovo stato all'ipotesi.

Algoritmo 1 LSTAR-BUILDAUTOMATON

Input: a closed and complete observation table $\langle \text{STA}, \text{EXP}, \text{OT} \rangle$ **Output:** DFA $\langle \Sigma, Q, q_\epsilon, F_A, F_R, \delta \rangle$

- 1: $Q \leftarrow \{q_u : u \in \text{RED} \wedge \forall v < u \text{ row}(v) \neq \text{row}(u)\}$
 \triangleright le stringhe più corte sono minori e per stringhe della stessa lunghezza si intendono minori quelle che lessicograficamente vengono prima
 - 2: $F_A \leftarrow \{q_u \in Q : \text{OT}[u][\epsilon] = 1\}$
 - 3: $F_R \leftarrow \{q_u \in Q : \text{OT}[u][\epsilon] = 0\}$
 - 4: **for** $q_u \in Q$ **do**
 - 5: **for** $a \in \Sigma$ **do** $\delta(q_u, a) \leftarrow q_w \in Q : \text{row}(ua) = \text{row}(w)$
 - 6: **end for**
 - 7: **return** $\langle \Sigma, Q, q_\epsilon, F_A, F_R, \delta \rangle$
-

Algoritmo 2 LSTAR

Input: –**Output:** DFA \mathcal{A}

- 1: LSTAR-INITIALISE
 - 2: **repeat**
 - 3: **while** $\langle \text{STA}, \text{EXP}, \text{OT} \rangle$ *is not closed or not consistent* **do**
 - 4: **if** $\langle \text{STA}, \text{EXP}, \text{OT} \rangle$ *is not closed* **then**
 - 5: $\langle \text{STA}, \text{EXP}, \text{OT} \rangle \leftarrow \text{LSTAR-CLOSE}(\langle \text{STA}, \text{EXP}, \text{OT} \rangle)$
 - 6: **if** $\langle \text{STA}, \text{EXP}, \text{OT} \rangle$ *is not consistent* **then**
 - 7: $\langle \text{STA}, \text{EXP}, \text{OT} \rangle \leftarrow \text{LSTAR-CONSISTENT}(\langle \text{STA}, \text{EXP}, \text{OT} \rangle)$
 - 8: **end while**
 - 9: Answer $\leftarrow \text{EQ}(\langle \text{STA}, \text{EXP}, \text{OT} \rangle)$
 - 10: **if** Answer $\neq \text{YES}$ **then**
 - 11: $\langle \text{STA}, \text{EXP}, \text{OT} \rangle \leftarrow \text{LSTAR-USEEQ}(\langle \text{STA}, \text{EXP}, \text{OT} \rangle, \text{Answer})$
 - 12: **until** Answer = YES
 - 13: **return** LSTAR-BUILDAUTOMATON($\langle \text{STA}, \text{EXP}, \text{OT} \rangle$)
-

Algoritmo 3 LSTAR-INITIALISE

Input: –**Output:** $\langle \text{STA}, \text{EXP}, \text{OT} \rangle$

- 1: RED $\leftarrow \{q_\epsilon\}$
 - 2: BLUE $\leftarrow \{q_a : a \in \Sigma\}$
 - 3: EXP $\leftarrow \{\epsilon\}$
 - 4: $\text{OT}[\epsilon][\epsilon] \leftarrow \text{MQ}(\epsilon)$
 - 5: **for** $a \in \Sigma$ **do** $\text{OT}[a][\epsilon] \leftarrow \text{MQ}(a)$
 - 6: **return** $\langle \text{STA}, \text{EXP}, \text{OT} \rangle$
-

Algoritmo 4 LSTAR-CLOSE

Input: $\langle \text{STA}, \text{EXP}, \text{OT} \rangle$ **Output:** $\langle \text{STA}, \text{EXP}, \text{OT} \rangle$ updated

```

1: for  $s \in \text{BLUE}$  such that  $\forall u \in \text{RED} \text{ row}(s) \neq \text{row}(u)$  do
     $\triangleright$  Non per  $\forall s$  ma per uno solo quindi la tabella in output può ancora essere non
    chiusa
2:    $\text{RED} \leftarrow \text{RED} \cup \{s\}$ 
3:    $\text{BLUE} \leftarrow \text{BLUE} \setminus \{s\}$ 
4:   for  $a \in \Sigma$  do  $\text{BLUE} \leftarrow \text{BLUE} \cup \{s \cdot a\}$ 
5:   for  $u, e \in \Sigma^*$  such that  $\text{OT}[u][e]$  is a hole do  $\text{OT}[u][e] \leftarrow \text{MQ}(ue)$ 
6: end for
7: return  $\langle \text{STA}, \text{EXP}, \text{OT} \rangle$ 

```

Algoritmo 5 LSTAR-CONSISTENT

Input: $\langle \text{STA}, \text{EXP}, \text{OT} \rangle$ **Output:** $\langle \text{STA}, \text{EXP}, \text{OT} \rangle$ updated

```

1: find  $s_1, s_2 \in \text{RED}$ ,  $a \in \Sigma$  and  $e \in \text{EXP}$  such that  $\text{row}(s_1) = \text{row}(s_2)$  and
2:  $\text{OT}[s_1 \cdot a][e] \neq \text{OT}[s_2 \cdot a][e]$ 
     $\triangleright$  se  $s_1 a$  ed  $s_2 a$  differiscono per più di un esperimento basta considerarne uno
3:  $\text{EXP} \leftarrow \text{EXP} \cup \{a \cdot e\}$ 
4: for  $u, e \in \Sigma^*$  such that  $\text{OT}[u][e]$  is a hole do  $\text{OT}[u][e] \leftarrow \text{MQ}(ue)$ 
5: return  $\langle \text{STA}, \text{EXP}, \text{OT} \rangle$ 

```

Algoritmo 6 LSTAR-USEEQ

Input: $\langle \text{STA}, \text{EXP}, \text{OT} \rangle$, Answer**Output:** $\langle \text{STA}, \text{EXP}, \text{OT} \rangle$ updated

```

1: for  $p \in \text{PREF}(\text{Answer})$  do  $\triangleright$  Anche Answer fa parte dei prefissi
2:    $\text{RED} \leftarrow \text{RED} \cup \{p\}$   $\triangleright$  Se un pref. è già in OT renderlo RED se non lo è
3:   for  $a \in \Sigma$  :  $pa \notin \text{PREF}(\text{Answer})$  do  $\text{BLUE} \leftarrow \text{BLUE} \cup \{pa\}$ 
4: end for
5: for  $u, e \in \Sigma^*$  such that  $\text{OT}[u][e]$  is a hole do  $\text{OT}[u][e] \leftarrow \text{MQ}(ue)$ 
6: return  $\langle \text{STA}, \text{EXP}, \text{OT} \rangle$ 

```

3.2.2 L'algoritmo

Funzionamento

La *ratio* che ispira L^* è il teorema *Myhill-Nerode* (sezione A.1). Nella tabella di osservazione le righe RED, in realtà un sottoinsieme delle stringhe RED, corrispondono agli stati del DFA ipotesi e le colonne, l'insieme EXP, corrispondono alle stringhe rappresentanti i suffissi che distinguono coppie di stati distinti dell'ipotesi. I singoli stati sono etichettati dalle stringhe che portano dallo stato iniziale allo stato stesso. Lo stato iniziale è etichettato dalla stringa ϵ . Per ogni stato q l'etichetta della colonna (un esperimento) indica lo stato che potrebbe essere raggiunto a partire dallo stato q dopo la lettura della stringa corrispondente all'etichetta dell'esperimento. Due stati sono considerati equivalenti se hanno le righe uguali nella tabella.

L'algoritmo inizia costruendo una tabella di osservazione corrispondente all'automa universale (algoritmo 3). Una volta resa la tabella completa, chiusa e consistente viene estratta l'ipotesi corrispondente² e viene effettuata un'EQ dell'ipotesi al *teacher*. In caso di risposta affermativa cioè di equivalenza il processo termina in quanto il *learner* ha identificato un automa uguale o equivalente al *target* (L^* inferisce il DFA minimo, invece il *target* potrebbe non essere un DFA minimo). In caso contrario sarà ritornato un controesempio che sarà usato per modificare la tabella di osservazione e quindi formulare una nuova ipotesi. L'algoritmo 2 chiarifica e approfondisce i passaggi summenzionati.

Correttezza

Per verificare che L^* è corretto è sufficiente dimostrare che termina dato che la terminazione con un *MAT* assicura l'equivalenza dell'ipotesi col *target*. A tal fine si riporta preliminarmente il seguente teorema ([2]):

Teorema 3.4. *Se una tabella di osservazione è completa, chiusa e consistente, allora l'ipotesi H (quella inferita dall'algoritmo 1) è consistente con la funzione OT . Qualsiasi altra ipotesi consistente con OT ma non equivalente ad H deve avere più stati.*

Nel teorema 3.4 con ipotesi consistente con la funzione OT si intende che $\forall u \in \text{STA}$ e $\forall e \in \text{EXP}$, $ue \in \mathcal{L} \iff OT[u][e] = 1$

Il risultato del teorema 3.4 è che qualunque DFA consistente con OT o è isomorfico all'ipotesi inferita da L^* o contiene almeno uno o più stati. Quindi ogni ipotesi H fatta da L^* è sempre il minimo DFA consistente con OT .

Un altro risultato che ci torna utile è:

Lemma 1. *Detto n il numero di differenti valori di $\text{row}(s)$ per $\forall s \in \text{RED}$ in una tabella di osservazione. Qualsiasi H consistente con OT deve avere almeno n stati*

²La prima ipotesi fatta dal *learner* non è sempre l'automa universale, ma dipende dall'esito delle *MQ*

Si indica con n il numero di stati del DFA minimo accettante \mathcal{L} . E' facile dimostrare che il numero di valori distinti di $row(s)$ per $s \in RED$ è incrementato monotonicamente fino ad un massimo di n durante l'esecuzione di L^* . Infatti sia la chiusura che la consistenza introducono un nuovo stato RED. Se la tabella fosse già chiusa e consistente il controesempio t tornato dal *teacher* comunque garantisce che un nuovo stato RED venga aggiunto alla tabella di osservazione: detto T_u il DFA *target* minimo (ovviamente consistente con OT) — il controesempio t ci permette di dedurre che H e T_u non sono equivalenti —, allora dal teorema 3.4 sappiamo che H ha al massimo $n - 1$ stati. Inoltre L^* classificherà il controesempio t allo stesso modo di T_u e quindi il nuovo DFA ipotesi H' che si otterrà non sarà equivalente ad H (per via di t) e inoltre sarà consistente con OT, quindi dal teorema 3.4 si deduce che H' deve avere almeno n stati (almeno 1 stato in più di H).

Questo dimostra che ad ogni passo del ciclo più esterno di L^* almeno uno stato RED distinto deve essere aggiunto sempre alla tabella di osservazione. Quando ci saranno n stati RED distinti L^* troverà il DFA *target* minimo consistente con OT infatti il DFA *target* minimo è sempre consistente con OT³ e l'ipotesi creata da L^* è sempre il DFA minimo per il teorema 3.4 e dal lemma 1 si ha che l'ipotesi creata da L^* deve avere almeno n stati. Essendo il DFA ipotesi un DFA ipotesi minimo e con n stati e consistente con T non può essere che uguale o isomorfo col DFA *target* minimo. Quindi L^* dovrà costruire nel caso peggiore $n - 1$ ipotesi errate prima di trovare l'ipotesi corretta e quindi il numero di EQ è al massimo n (perchè l'ipotesi corretta comunque va sottoposta al *teacher*)

Complessità computazionale

Come detto in precedenza la complessità computazionale di L^* è limitata da un polinomio dipendente dal numero di stati del DFA minimo identificante \mathcal{L} e dalla lunghezza del controesempio più lungo ritornato dal *teacher*. In [2] si trova una dimostrazione dettagliata di quanto detto sopra. In questa sede si analizzano dei parametri oggettivi nella valutazione del costo computazionale cioè il numero di MQ e di EQ . In quest'analisi si terrà conto anche di k un ulteriore parametro che rappresenta la dimensione dell'alfabeto. Il numero di EQ sarà limitato da n (sottosezione correttezza 3.2.2) come dimostrato in precedenza. Il numero di MQ è invece limitato dalla dimensione della tabella di osservazione. Il numero di elementi in EXP non può eccedere n , in quanto l'insieme EXP viene incrementato di un elemento quando la tabella di osservazione è inconsistente (algoritmo 5) e l'inconsistenza può presentarsi al più $n - 1$ volte cioè ogni volta che viene aggiunto un nuovo nodo RED distinto (con n nodi RED distinti L^* termina quindi se ne aggiungono al più $n - 1$) (la dimensione di EXP è al più n e non $n - 1$ perchè EXP inizialmente contiene λ). EXP rappresenta il numero di colonne della tabella di osservazione, adesso si calcola il

³Ma se sia il *target* che H sono sempre consistenti con OT come si fa a trovare un controesempio? La risposta è semplice: da OT viene creata un' ipotesi H consistente all'OT ma nell'ipotesi possono essere *parsate* anche altre stringhe non contemplate in OT da cui può derivare la non equivalenza con il *target*

numero di righe della stessa. Si indica con m la lunghezza del controesempio più lungo ritornato dal *teacher*. Il numero di stati RED non può eccedere $n + m(n - 1)$ perchè gli stati RED sono aggiunti quando si scopre che la tabella non è chiusa e quando il *teacher* torna un controesempio. La non chiusura può accadere al più $n - 1$ volte ed ogni volta aggiunge uno stato RED, e ci possono essere massimo $n - 1$ controesempi ognuno dei quali può causare l'aggiunta di al più m stati RED (i prefissi aggiunti ad ogni iterazione sono al più pari alla lunghezza del controesempio e nel caso peggiore in cui tutti i controesempi sono lunghi m il numero dei prefissi aggiunti ad ogni iterazione è m). Il numero degli stati BLUE è al più $k(n + m(n - 1))$ perchè i BLUE, che rappresentano le transizioni, sono ottenuti concatenando tutti i simboli dell'alfabeto agli stati RED. Quindi la dimensione della tabella sarà righe * colonne cioè $(\text{RED} + \text{BLUE}) * \text{EXP}$ quindi si ha:

$$(k + 1)(n + m(n - 1))n = \mathcal{O}(kmn^2)$$

che è il numero di MQ totali.

3.2.3 Il teacher

Il teacher di L^* essendo un *MAT* è chiamato a rispondere a due tipi di query: MQ ed EQ . Si suppone che esso abbia a disposizione il DFA che identifica \mathcal{L} quindi è immediato rispondere a una MQ . Il *teacher* deve anche vagliare l'equivalenza del target con l'ipotesi fornitagli dal *learner* e in caso di inequivalenza deve tornare un controesempio. A tal fine il *table-filling algorithm* [32] risulta essere un buon algoritmo (il più performante con complessità quasi lineare atto solo a testare l'equivalenza e tornare una witness quindi senza consentire anche la minimizzazione è [17])

Table-filling

Il *table-filling* [32] è un algoritmo in grado di individuare ricorsivamente tutti gli stati tra loro distinti, alla fine dell'esecuzione le coppie di stati non marcati come tali saranno coppie di stati equivalenti. Per questo motivo l'algoritmo di table-filling è utilizzato anche nella minimizzazione di DFA dove gli stati trovati equivalenti saranno fusi in un unico stato.

Per stati distinti si intende stati per cui esiste almeno una stringa che partendo da quei due stati (e non dallo stato iniziale) giunge in una coppia di stati di arrivo composta da uno stato accettante e da uno stato rigettante.

Inizialmente si distinguono le coppie di stati che non sono equivalenti cioè gli stati che vengono distinti dalla stringa vuota cioè quelle coppie di stati formate da uno stato accettante e da uno rigettante. Al passo successivo si procede esaminando tutte le coppie di stati che momentaneamente l'algoritmo considera equivalenti (che non ha marcato come distinti nei passi precedenti): se per un simbolo dell'alfabeto s da quella coppia di stati di partenza si arriva a una coppia di stati distinti (già marcati dall'algoritmo nei passi precedenti) anche la coppia di stati di partenza va marcata come distinti perchè se gli stati di arrivo sono distinti vuol dire che esiste un suffisso

w che li distingue quindi gli stati di partenza saranno distinti dalla stringa sw . Questa procedura va ripetuta ed ha termine quando al passo corrente l'algoritmo non ha trovato nessuna nuova coppia di stati distinti. Inoltre come attesta il seguente teorema:

Teorema. *Se due stati non sono marcati come distinti dall'algoritmo di table-filling, allora questi stati sono equivalenti. [18]*

si ha che quando vengono identificati gli stati equivalenti è possibile passare alla minimizzazione tramite il merge di questi stati.

Per testare l'equivalenza di due DFA si manda in esecuzione il *table-filling* sul DFA costituito dall'unione dei due DFA di cui verificare l'equivalenza. Se al termine dell'esecuzione i due stati iniziali risultano equivalenti i due DFA di partenza saranno equivalenti perchè non esiste nessuna stringa che distingue i due stati iniziali e quindi i due linguaggi dei due DFA sono identici. Per ottimizzare l'esecuzione è possibile interrompere l'esecuzione non appena viene individuato che i due stati iniziali sono distinti.

Per abilitare il *teacher* a ritornare, in caso di inequivalenza, una *witness* è necessario modificare leggermente il *table-filling*. Anzichè limitarsi nel marcare le coppie di stati non equivalenti è necessario anche memorizzare il simbolo dell'alfabeto che ha causato l'inequivalenza. Inoltre bisogna marcare con la stringa vuota o con un marcatore speciale le coppie di stati distinti in fase d'inizializzazione. Quando l'algoritmo termina è possibile creare il controesempio, partendo dalla coppia di stati iniziali, percorrendo la struttura dati usata durante il *table-filling* con l'ausilio delle funzioni di transizione dei due DFA e del marcatore memorizzato fino a quando non viene trovata una coppia di stati contrassegnata con la stringa vuota (cioè uno stato accettante e l'altro no). E' garantito che un controesempio venga sempre individuato ma non vi è la garanzia che ad essere scovato sia quello di lunghezza minima.

Una versione più efficiente

Il *table-filling* ha una complessità polinomiale rispetto ad n cioè alla somma del numero degli stati dei DFA di cui si vuole testare l'equivalenza. Si avranno $n * \frac{n-1}{2}$ coppie distinte di stati che verranno tutte considerate ad ogni visita della tabella (la struttura dati mantenuta dall'algoritmo) quindi $\mathcal{O}(n^2)$. Nel caso peggiore una sola coppia verrà scoperta essere distinta e le coppie sono tutte distinte quindi la tabella verrà esaminata al più $\mathcal{O}(n^2)$ volte. Moltiplicando le due complessità si ottiene $\mathcal{O}(n^4)$ che è il costo computazionale nel caso peggiore.

E' possibile migliorare la complessità computazionale a $\mathcal{O}(n^2)$ memorizzando per ogni coppia di stati (i, j) una lista di dipendenza costituita da tutte quelle coppie (x, y) che tramite un singolo simbolo dell'alfabeto k arrivano in (i, j) cioè $\hat{\delta}(x, k) = i$ e $\hat{\delta}(y, k) = j$. Si memorizzano in una coda tutte le coppie di stati inizialmente distinte. Si estrae una coppia dalla coda (che quindi è distinta) e tutte le coppie che da essa dipendono sono marcate come distinte nella tabella e sono aggiunte in fondo alla coda. L'algoritmo ripete questi passi finchè la coda è vuota.

Capitolo 4

Observation Pack

Esistono molte varianti dell'algoritmo L^* originariamente presentato da Angluin. L'algoritmo *ObP* presentato da Falk Howar in [19] –presentato per le Mealy Machines ma comunque applicabile ai DFA – si basa su alcune di queste varianti. Tecnicamente l'*ObP* combina l'idea di usare un **Discrimination Tree (DT)** per i linguaggi regolari [21] con una versione localizzata della tabella di osservazione [36]. Inoltre viene utilizzata una tecnica più efficiente di gestione del controesempio rispetto ad L^* . Quindi l'*ObP* è in stretta correlazione con L^* , e molti dei concetti introdotti nel capitolo 3 rimangono validi. Anche *ObP*, come L^* è un algoritmo di *active learning* nell'ambito dell'*IIR* che garantisce di emettere in output il DFA minimo (o uno ad esso isomorfo) accettante \mathcal{L} . Anche in questo caso detto n il numero degli stati del DFA target minimo ed m la lunghezza del più lungo controesempio ritornato dal *teacher* durante l'inferenza, il numero di *MQ* sarà limitato da una funzione polinomiale di n ed m e il numero di *EQ* linearmente da n . Nonostante L^* sia il più noto algoritmo di *active learning* l'*ObP* ottiene prestazioni migliori dato che permette di diminuire il numero delle *MQ*. Nell' *ObP* il teacher appartiene ancora alla classe dei *MAT*, in grado di rispondere ad *EQ* e *MQ*.

4.1 Fondamenta teoriche

Si parla di *active learning* perchè il *learner* attivamente può interrogare il *teacher* sull'appartenenza o meno di alcune stringhe ad \mathcal{L} , in contrapposizione al *passive learning* in cui le stringhe sono date a priori come in *EDSM* ad esempio. Il *learner* da un certo punto di vista si trova ad affrontare un problema di *classificazione* cioè deve assegnare alcune stringhe ad un determinato stato di H . L'ipotesi H ottenuta induttivamente sarà consistente con l'etichettatura degli esempi sottoposti al *teacher* fino al momento della creazione di H ma produrrà una generalizzazione dato che in H è possibile effettuare il *parsing* di stringhe mai sottoposte al *teacher*. Detto T il DFA target, la *classificazione* delle stringhe e la costruzione dell'ipotesi si basa sui risultati del teorema Myhill-Nerode (teorema A.1) che consente di:

1. Trovare un insieme $Sp \subset \Sigma^*$ di **prefissi**, detti **short prefix o access sequence**, in cui ogni short prefix è una stringa rappresentativa per una classe di equivalenza sulla relazione d'equivalenza \simeq_{λ^T}
2. Trovare un insieme $V \subset \Sigma^*$ di **suffissi** che è sufficiente a realizzare la relazione di Nerode su Sp , cioè tale che $s \not\simeq_{\lambda^T} s'$ implica $\lambda^T(sv) \neq \lambda^T(s'v)$ per $s, s' \in Sp$ e qualche $v \in V$

Il teorema di Myhill-Nerode asserisce che un linguaggio $L(T) = \mathcal{L}$ è regolare se e solo se \simeq_{λ^T} identifica un numero finito di classi d'equivalenza. \simeq_{λ^T} agisce su due stringhe x e y che sono in relazione se non esiste nessuna stringa z tale che xz e yz , esattamente una delle due appartiene ad \mathcal{L} : quindi nella classe d'equivalenza ci saranno stringhe non distinguibili da nessuna altra stringa e che quindi rappresentano un unico stato dell'automa T . L'*ObP* trova dei prefissi in cui ogni singolo prefisso è una stringa contenuta in una specifica classe d'equivalenza (e vi è un prefisso rappresentativo, detto short prefix, per ogni classe d'equivalenza). Essendo $L(T) = \mathcal{L}$ un linguaggio regolare, il numero di classi d'equivalenza è finito e sarà certamente possibile trovare un insieme di short prefix Sp . L'esistenza dell'insieme di suffissi V in 2 è garantita dal fatto che se esistono almeno due classi di equivalenza deve esistere almeno un suffisso che distingue le due classi d'equivalenza (che altrimenti sarebbero un'unica classe d'equivalenza). Quindi $|V|$ è limitato dall'indice di \simeq_{λ^T} cioè dal numero di stati del *DFA* target.

4.2 Costruzione dell'ipotesi

L'*ObP* mantiene due strutture dati rappresentative dell'ipotesi: il *DT* e un insieme di componenti.

4.2.1 Tabella di osservazione localizzata

A differenza di L^* in cui vi è un'unica tabella d'osservazione rappresentativa dell'ipotesi, in *ObP* vi è una tabella di osservazione di dimensioni ridotte per ogni stato trovato fino a quel momento denotata come **componente**:

Definizione (Componente). Un componente C è una quadrupla $\langle U, u_0, V, OT \rangle$ dove:

$U \subset \Sigma^*$ è un insieme finito di prefissi

$u_0 \in U$ è l'unico short prefix del componente

$V \subset \Sigma^*$ è un insieme di suffissi v_1, \dots, v_k

$OT : U \times V \rightarrow \{0, 1, *\}$ è una funzione così definita:

$$OT[u][v] = \begin{cases} 1 & \text{se } uv \in \mathcal{L} \\ 0 & \text{se } uv \notin \mathcal{L} \\ * & \text{altrimenti} \end{cases}$$

Sia $u \in U$ e sia $|V| = n$, si indica con $\text{row}(u)$ la riga in OT indicizzata da u cioè $\text{row}(u) = OT[u][v_1] \cdot OT[u][v_2] \cdot \dots \cdot OT[u][v_n]$. Il componente è individuato dall'access sequence e quindi spesso lo si indica con C_{u_0}

Un componente approssima¹ la relazione di Nerode. Ogni componente rappresenta una classe di equivalenza: tutti i prefissi del componente fanno parte della stessa classe di equivalenza cioè sono equivalenti (secondo OT) in base ai suffissi di quel componente. I valori di output di OT sono ricavati tramite delle *MQ*. L'access sequence non è altro che un prefisso, possibilmente il più breve ma non necessariamente, rappresentativo del componente. Nell'ipotesi H ad ogni componente corrisponde uno stato. I prefissi di un componente sono tutte quelle stringhe che terminano nello stato dell'ipotesi rappresentato da quel componente. L'insieme di tutti i componenti è indicato con C_I , invece con $\text{Sp}(C_I)$ o semplicemente Sp si indica l'insieme delle access sequences di tutte le componenti. **Sp è prefix-closed.**

Completezza

La completezza garantisce che non ci siano comportamenti parzialmente (o totalmente) sconosciuti per prefissi presenti all'interno di una componente.

Definizione (Componente completo). Un componente è completo se non ha *buchi*. Un *bucio* in un componente è una coppia (u, v) tale che $OT[u][v] = *$.

C_I è completo se tutti i componenti sono completi. L'eventuale incompletezza può essere eliminata mediante *MQ* al *teacher*.

Chiusura

La proprietà di chiusura di C_I garantisce che tutti i prefissi di un componente sono equivalenti secondo la relazione di Nerode approssimata.

Definizione (Componente chiuso). Un componente $\langle U, u_0, V, OT \rangle$ è chiuso se $\text{row}(u) = \text{row}(u_0)$ per $\forall u \in U$.

C_I è chiuso se tutti i componenti sono chiusi.

La proprietà di chiusura su C_I consente l'applicazione del teorema di Myhill-Nerode sulla relazione \simeq_{OT} . La relazione di Nerode è soltanto approssimata in quanto la funzione OT non è definita su Σ^* ma su un dominio più ristretto. Tuttavia, se le proprietà di chiusura e completezza su C_I sono mantenute il teorema Myhill-Nerode è ancora valido e come visto in A.1 assicura la costruzione di un *DFA* la cui *funzione di output* è quella su cui si basa la relazione di Nerode utilizzata che nella fattispecie

¹Si parla di approssimazione perchè può accadere che alcuni prefissi che attualmente fanno parte dello stesso componente in futuro facciano parte di componenti diverse. Ciò è dovuto all'aggiunta di nuovi suffissi non ancora esaminati fino a quel momento. In ultima analisi ciò è dovuto al fatto che OT ha un dominio ristretto ad $U \times V$ anzichè Σ^*

è OT. Un ipotesi H consistente con OT può essere costruita come nell'algoritmo 7. L'eventuale non chiusura di un componente può essere eliminata con uno *split*, che consiste nel dividere un componente in due componenti oppure uno stato in due stati (un componente corrisponde ad uno stato).

Algoritmo 7 OBP-BUILDAUTOMATON

Input: a closed and complete components set C_I

Output: DFA $\langle \Sigma, Q, q_\epsilon, F_A, F_R, \delta \rangle$

1: $Q \leftarrow \{q_u : \forall u \in \text{Sp}(C_I)\}$

2: $q_\epsilon \leftarrow$ Component with short prefix ϵ

▷ Stato iniziale corrispondente al componente con short prefix ϵ

3: $F_A \leftarrow \{q_u \in Q : \text{OT}[u][\epsilon] = 1\}$

4: $F_R \leftarrow \{q_u \in Q : \text{OT}[u][\epsilon] = 0\}$

5: **for** $q_u \in Q$ **do**

6: **for** $a \in \Sigma$ **do** $\delta(q_u, a) \leftarrow q_w \in Q : \text{row}(ua) = \text{row}(w)$

▷ Da q_u per a si va nello stato q_w se ua è nel componente con short prefix w

7: **end for**

8: **return** $\langle \Sigma, Q, q_\epsilon, F_A, F_R, \delta \rangle$

4.2.2 Discrimination tree

Definizione (Discrimination tree). Un *discrimination tree* è un albero binario con radice definito come $DT = \langle N, n_0, E, \tau, L \rangle$ dove:

N è un insieme finito di nodi

$n_0 \in N$ è la radice dell'albero

$E \subseteq N \times N \times \mathbb{B}$ è l'insieme finito di archi²

$\tau : N \rightarrow \Sigma^*$ assegna le etichette ai nodi

$L \subseteq N$ è l'insieme di foglie

Un DT è in stretta connessione con l'ipotesi come mostrato in figura 4.1. C'è una corrispondenza biunivoca tra foglie nel DT e stati in H . Come si può vedere in figura 4.1 alcune delle transizioni in H sono disegnate in *bold* perchè corrispondono ai prefissi che fungono da short prefix: nella fattispecie si ha $Sp = \{\epsilon, a, ab, b\}$. Le foglie sono etichettate con gli short prefix contenuti in Sp . I nodi interni invece sono etichettati con i suffissi $\in V$ di C_I che consentono di *discriminare* le foglie cioè stati diversi del DFA. Il DT assicura l'esistenza di un discriminatore per ogni coppia di foglie (e quindi di short prefix e di stati) diverse, il **least common ancestor (LCA)**. L' LCA di due foglie a e b è incontrato nei rispettivi percorsi dai nodi verso la radice e rappresenta, nei percorsi dalla radice verso a e b , il nodo in

²Si specifica per ogni arco se il secondo nodo è figlio destro o sinistro del primo nodo (rispettivamente 1 e 0)

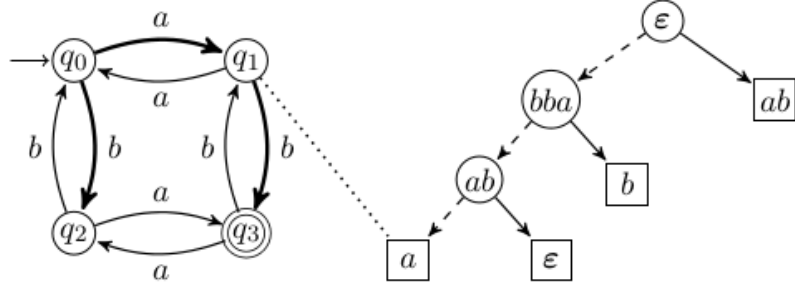


Figura 4.1: DFA ipotesi e possibile Discrimination Tree corrispondente

cui questi percorsi divergono come evidenziato in figura 4.2.

Un'operazione fondamentale è il *sift* di una stringa $x \in \Sigma^*$ nel *DT* che consente di *affondare* x all'interno dell'albero. Sia q un nodo interno etichettato con v ed A il *DFA* target, il sifting di x procede, partendo dalla radice, nel sottoalbero sinistro o nel sottoalbero destro di q a seconda del valore di $\lambda^A(xv)$ (se è 0 si va nel sottoalbero sinistro). Questa procedura è ripetuta finché una foglia è raggiunta. Ad esempio in figura 4.1 il *sift* della stringa *aba* —, che ha access sequence *b*, e che in H termina nello stato q_2 — tramite la valutazione nel *DFA* target A di $\lambda^A(aba \cdot \epsilon)$ che dà 0 (per questo si va a sinistra) e di $\lambda^A(aba \cdot bba)$ che produce 1 (per questo si va a destra) arriva alla foglia con etichetta *b* (non casualmente, infatti *b* e *aba* sono transizioni che nell'ipotesi giungono nello stesso stato e quindi sono nella stessa classe di equivalenza). Il *sift* è descritto in dettaglio nell'algoritmo 12 e nella sottosezione 4.4.1.

4.2.3 Observation Pack

Definizione (Observation Pack). Un Observation Pack è una tupla $\langle C_I, DT \rangle$

Da cui deriva il nome dell'algoritmo. Un Observation Pack è chiuso e completo se C_I è chiuso e completo.

4.3 Gestione del controesempio

4.3.1 Classificazione

Un controesempio è una stringa $w \in \mathcal{L} \oplus L(H)$ che viene ritornato dal *teacher* quando H e il target differiscono. w va sfruttato dal *learner* in qualche modo per produrre una nuova ipotesi H . Esistono essenzialmente due modi per farlo:

1. *Metodi Suffix-based*. Aggiungono uno o più suffissi del controesempio all'insieme di suffissi dell'algoritmo provocando la non chiusura.
2. *Metodi Prefix-based*. Aggiungono uno o più prefissi di un controesempio all'insieme di prefissi dell'algoritmo causando l'inconsistenza delle osservazioni, cioè una situazione di indeterminismo in H .

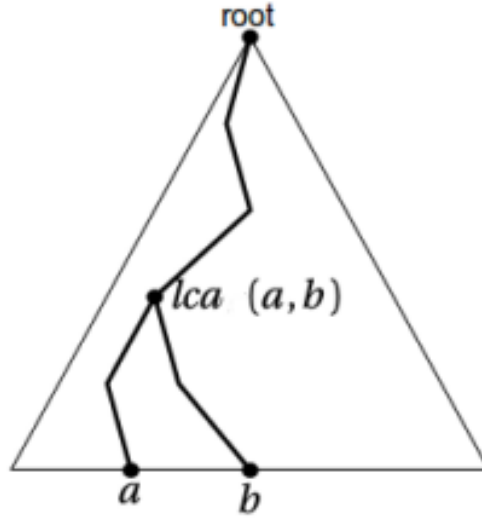


Figura 4.2: LCA di due nodi in un discrimination tree

ObP usa la prima strategia. Inoltre un'ulteriore classificazione sui metodi di gestione del controesempio viene effettuata in base a (1) se tutti o solo qualche suffisso (prefisso nel caso dei metodi *prefix-based*) del controesempio sono impiegati e (2) questi suffissi (prefissi) sono applicati a tutti o solo a qualche prefisso (nell'accezione di prefisso rappresentante uno stato dell'ipotesi). Esistono diverse versioni di *ObP* (e in generale anche per i metodi *suffix-based*) in base a quest'ulteriore classificazione:

- **AllGlobally.**
Si aggiungono tutti i suffissi del controesempio all'insieme di suffissi V di ogni componente in C_I .
- **OneGlobally**
Si individua e si aggiunge un singolo suffisso del controesempio e lo si aggiunge all'insieme di suffissi V di ogni componente in C_I .
- **OneLocally**
Si individua e si aggiunge un singolo suffisso del controesempio ad un ben preciso componente.

In tutti e tre i casi l'aggiunta del suffisso (o dei suffissi) porterà alla non chiusura di almeno un componente e al conseguente *split* che produrrà un nuovo stato nell'ipotesi. In AllGlobally e OneGlobally è possibile far diventare l'insieme V globale dato che è uguale per ogni componente. Nella strategia OneLocally l'insieme V di suffissi differirà da componente a componente. Su come sia possibile individuare un singolo suffisso dal controesempio e l'esatto componente a cui bisogna aggiungere questo suffisso si rimanda al teorema 4.1. Una classificazione simile è possibile per i metodi *prefix-based*. La politica di gestione del controesempio è una differenza rilevante tra L^* e *ObP*. L^* gestisce il controesempio in maniera poco sofisticata: usa

un metodo *prefix-based* in cui tutti i prefissi del controesempio sono aggiunti alla tabella di osservazione: quindi è una strategia AllGlobally dato che tutti i prefissi del controesempio sono usati in combinazione con un insieme di suffissi globale. Questa strategia causa l'inconsistenza di alcuni prefissi e per risolverla si aggiunge un suffisso che a sua volta causa una non chiusura e una promozione (un prefisso BLUE diventa RED). Lo svantaggio principale di questa strategia è che vengono aggiunti dei prefissi improduttivi che fanno aumentare il numero di MQ . Invece con una strategia che aggiunge un solo suffisso (o un solo prefisso) è necessario fare delle MQ per trovare il suffisso in questione dal controesempio ma il numero complessivo di MQ risulterà sempre minore complessivamente ad una strategia AllGlobally come quella usata da L^* (qui si fa riferimento alla versione originale di L^* in [2]. Esiste la variante OneLocally di L^* in [21] che determina un unico prefisso del controesempio che genera inconsistenza, che viene risolta con l'aggiunta di un suffisso che causa uno *split* nella loro versione del discrimination tree).

4.3.2 Decomposizione del controesempio

Il seguente risultato fondamentale [36] garantisce che dato qualsiasi controesempio esiste sempre un suffisso che discrimina due prefissi nello stesso componente e ne causa di conseguenza lo *split*:

Teorema 4.1 (Decomposizione del controesempio). *Sia H un'ipotesi, A il target, e $w \in \Sigma^+$ un controesempio, cioè $\lambda^A(w) \neq \lambda^H(w)$. Allora esiste una decomposizione $\langle u, a, v \rangle \in \Sigma^* \times \Sigma \times \Sigma^*$ tale che $w = u \cdot a \cdot v$ e $\lambda^A([u]_H a \cdot v) \neq \lambda^A([ua]_H \cdot v)$.*

Innanzitutto bisogna precisare che il controesempio non può essere mai ϵ perchè $\lambda^A(\epsilon) = \lambda^H(\epsilon)$ che segue da $\epsilon \in Sp$ e dall'invariante (I2) (vedasi sottosezione 4.4.2) e ciò giustifica l'assunzione $w \in \Sigma^+$ che si fa nel teorema 4.1. Si osservi che u e $[u]_H$ sono stringhe che terminano nello stesso stato di H , lo stesso dicasi allora per ua e $[u]_H \cdot a$. Inoltre ua e $[ua]_H$ terminano nello stesso stato di H da cui segue transitivamente che pure $[u]_H \cdot a$ e $[ua]_H$ terminano nello stesso stato dell'ipotesi H (e quindi appartengono anche allo stesso componente dato che c'è corrispondenza biunivoca tra stati dell'ipotesi e componenti). Quanto detto è schematizzato nella figura 4.3. Ma il teorema 4.1 afferma che $\lambda^A([u]_H a \cdot v) \neq \lambda^A([ua]_H \cdot v)$ il che significa che $[u]_H \cdot a$ e $[ua]_H$ — che sono due stringhe che in H terminano nello stesso stato — nel target A terminano in due stati diversi. Quindi si è trovato il suffisso v che discrimina i due prefissi $[u]_H \cdot a$ e $[ua]_H$ e in più si sa che i due prefissi sono anche nello stesso componente.

Decomposizione del controesempio riformulata

In [43] è descritto un framework che permette di riformulare il teorema 4.1 in modo da facilitarne la comprensione della correttezza ed anche l'implementazione. Alcune funzioni si trovano nell'appendice C e qui sono date per scontate.

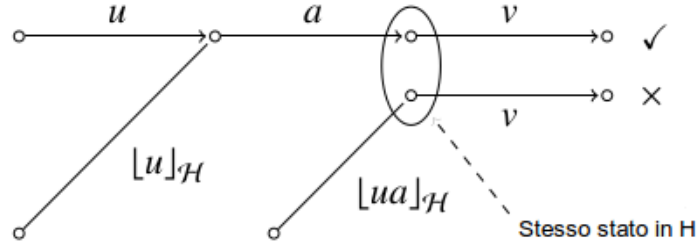


Figura 4.3: Sfruttare il controesempio

Sia dato un controesempio $w \in \Sigma^+$ tale che $|w| = m$. Dato che $\pi_H(w, m) \in Sp$ (si evince dalla definizione di w considerando che il controesempio è lungo m), dall'invariante (I2) (nella sottosezione 4.4.2) si ha $\lambda^A(\pi_H(w, m)) = \lambda^H(w)$ quindi $\alpha(m) = 1$. Inoltre dato che $\pi_H(w, 0) = w$ e w è un controesempio si ha $\lambda^A(\pi_H(w, 0)) \neq \lambda^H(w)$, quindi $\alpha(0) = 0$. Allora si può ricondurre il teorema 4.1 nel trovare un indice i tale che $\alpha(i) \neq \alpha(i + 1)$. Siccome $\alpha(0) = 0$ e $\alpha(1) = 1$ sicuramente ci sarà un indice i in cui il valore di α passa da 0 ad 1 e ciò dimostra la correttezza e l'esistenza del suffisso. Il teorema 4.1 può essere riformulato così:

Teorema 4.2 (Decomposizione del controesempio riformulata). *Una politica di analisi del controesempio suffix-based può essere riformulata come il problema di, data una funzione $\alpha : [0, m + 1) \rightarrow \mathbb{B}$ con $\alpha(0) = 0$ e $\alpha(1) = 1$, trovare un indice i , $0 \leq i < m$, soddisfacente $\alpha(i) \neq \alpha(i + 1)$*

Una volta trovato un indice i siffatto la decomposizione è $u=w_{[0,i)}$, $a=w_i$, $v=w_{[i+1,m)}$

4.3.3 Metodi di decomposizione del controesempio

Esistono diverse strategie per la ricerca del suffisso (o per i metodi *prefix-based*) all'interno del controesempio. I parametri da tenere in considerazione nella valutazione di tali strategie sono il numero di MQ effettuate e la dimensione del suffisso trovato. Infatti per valutare $\alpha(i)$ è necessaria una MQ quindi l'impiego di un'euristica o di una politica che porta velocemente alla scoperta dell'indice i e quindi del suffisso permette di risparmiare il numero di MQ da effettuare al *teacher*. La dimensione dei suffissi³ è anch'esso un parametro molto importante in quanto il suffisso trovato verrà aggiunto all'insieme dei suffissi dei componenti o del componente rispettivamente in OneGlobally e OneLocally, e anche al DT (vedasi algoritmo 13). Quando si navigherà il DT , per esempio durante un sift, verranno fatte delle MQ in cui parte della stringa è composta dall'etichetta di un nodo interno costituita da un suffisso; quindi il costo della MQ crescerà linearmente con la dimensione del suffisso.

La strategia più semplice è quella che effettua una ricerca lineare in ordine discendente cioè partendo da $i = m - 1$ che termina quando un valore i tale che $\alpha(i) = 0$

³All'interno di un controesempio possono esistere più suffissi discriminatori, cioè molteplici indici i che permettono una decomposizione

è incontrato. Questo metodo assicura di trovare il suffisso più breve ma nel caso peggiore richiede $m-1$ MQ . Anche se un costo lineare alla dimensione del controesempio sembra accettabile negli scenari reali non sempre lo è. In un contesto reale spesso capita di non avere la possibilità di effettuare un EQ che va approssimata con un certo numero di MQ nell'ambito del *PAC-learning*. In questo scenario il controesempio tornato è una stringa di lunghezza non ottimale che può avere una lunghezza significativa. Esistono dei metodi che permettono di diminuire il numero di MQ anche se spesso bisogna rinunciare alla lunghezza minima del controesempio ed accontentarsi di una lunghezza ottima.

Algoritmo 8: Binary-Search	Algoritmo 9: Exponential-Search
Input: A counterexample w with $ w = m$ Output: Index $i : \alpha(i) \neq \alpha(i+1)$ $low \leftarrow 0$ $high \leftarrow m$ while $high - low > 1$ do $mid \leftarrow \lfloor \frac{low+high}{2} \rfloor$ if $\alpha(mid) = 0$ then $low \leftarrow mid$ else $high \leftarrow mid$ end if end while return low	Input: A counterexample w with $ w = m$ Output: Index $i : \alpha(i) \neq \alpha(i+1)$ $low \leftarrow 0, high \leftarrow m, ofs \leftarrow 1, found \leftarrow \text{false}$ while $high - ofs > 0$ and $\neg found$ do if $\alpha(high - ofs) = 0$ then $low \leftarrow high - ofs$ $found \leftarrow \text{true}$ else $high \leftarrow high - ofs$ $ofs \leftarrow 2 \cdot ofs$ end if end while return $Binary\text{-}Search(\alpha, low, high)$

Binary search

Il metodo descritto nell'algoritmo 8 è suggerito in [36]. Esso impiega la ricerca binaria per trovare una decomposizione valida. Il numero di MQ necessarie è $\lceil \log_2(m) \rceil$ sempre, cioè non esiste un caso migliore ma il numero di MQ è fisso perchè è necessario testare il valore di $\alpha()$ per due indici i contigui e ciò avviene solo alla fine della ricerca. La dimensione del suffisso trovata può anche essere molto più grande di quella minima.

Exponential Search

Il metodo descritto qui e tutti quelli a seguire sono descritti in [43]. La ricerca binaria ha lo svantaggio evidente che può essere tornato un controesempio relativamente lungo: se il primo valore per mid testato è tale che $\alpha(mid) = 1$ il suffisso risultante sarà di lunghezza almeno $\lceil m/2 \rceil^4$. Con *exponential search* si testano $\alpha(m - 2^0), \alpha(m - 2^1), \alpha(m - 2^2)$ eccetera, finchè non si trova un intervallo $[l, h)$ per cui $\alpha(l) = 0$ e $\alpha(h) = 1$ ed allora si chiamerà il metodo che usa la ricerca binaria descritto nell'algoritmo 8 sui due indici l ed h . Nel caso peggiore (*exponential search*

⁴La funzione $\alpha()$ non è necessariamente monotona quindi anche se $\alpha(mid) = 1$ ci può essere un indice $i > m$ per il quale $\alpha(i) = 0$ e quindi esserci un suffisso più breve

non riesce a restringere l'intervallo cioè l resta 0 ed h resta m) questo metodo richiede $2\lfloor \log_2(m) \rfloor$ MQ , $\lfloor \log_2(m) \rfloor$ per *exponential search* e altrettante per la ricerca binaria. Nella maggior parte dei casi l'algoritmo termina molto prima e nel caso migliore ($\alpha(m-1) = 0$) si effettua una singola MQ . Per come funziona quest algoritmo favorisce il ritrovamento di suffissi più brevi rispetto alla ricerca binaria.

Exponential Search è presentato in dettaglio nell'algoritmo 9.

Partition Search

Exponential search può terminare velocemente e individuare suffissi molto brevi ma nel caso che anche poche posizioni di $\alpha(m-2^i) = 1$ può essere svantaggiosa per via della rapida (anche per i piccolo), esponenziale, crescita dell'intervallo. Un approccio più bilanciato è quello di partizionare α in $\lceil \log_2(m) \rceil$ intervalli, ognuno di lunghezza $s = \lfloor \frac{m}{\log_2 m} \rfloor$. Poi i valori testati saranno $\alpha(m-s), \alpha(m-2s)$ eccetera, finchè un intervallo $[l, h)$ soddisfacente $\alpha(l) = 0$ e $\alpha(h) = 1$ è trovato. Quest intervallo sarà poi sottoposto al metodo di ricerca binaria per trovare un indice i in esso. In *exponential search* a causa del passo esponenziale questo intervallo poteva risultare molto grande, in *partition search* è di dimensione s . Quindi il numero di MQ da effettuare nel caso peggiore con *partition search* è $\log_2(s) = \log_2(\lfloor \frac{m}{\log_2 m} \rfloor)$ per via della ricerca binaria da eseguire sull'intervallo trovato più $\lfloor \log_2(m) \rfloor$ (il numero di partizioni) MQ per trovare l'intervallo. Quindi sono necessarie $\mathcal{O}(\log_2(m))$ MQ . *Partition Search* è presentato in dettaglio nell'algoritmo 10. Si osservi come il costo della ricerca binaria sia fisso (cioè è presente anche nel caso migliore) e dipendente da m . Quindi ci si aspetta che questo metodo funzioni meglio per controesempi non troppo grandi (m piccolo).

Eager Search

Eager Search è una variante del metodo di ricerca binaria. Quest ultimo richiede sempre — cioè non c'è un caso migliore o medio ma il numero di MQ è sempre lo stesso — $\log_2(m)$ MQ . Come accennato in precedenza il motivo è che il solo valore $\alpha(i)$ da solo non è sufficiente ma è necessario testare anche $\alpha(i+1)$ ⁵. La soluzione proposta in *Eager Search* è di testare ogni volta il valore di α sia per i che per $i+1$ e vagliare se differiscono o detto in maniera più succinta che il valore di β (vedasi B.1.2) sia uguale ad 1. Nel caso peggiore siccome ogni valutazione di β richiede 2 MQ e il numero di valutazioni da fare è lo stesso della ricerca binaria (nel caso peggiore) sono necessarie $2\log_2(m)$ MQ . Tuttavia nel caso migliore solo 2 MQ sono sufficienti e la ricerca può terminare molto prima di quella binaria. Questa strategia è affetta dallo stesso problema della ricerca binaria per quanto riguarda la dimensione dei suffissi tuttavia è possibile utilizzare *Eager Search* in luogo della ricerca binaria sia in *exponential search* che in *partition search*.

⁵perchè dal teorema 4.2 si deve trovare un indice i per cui $\alpha(i) \neq \alpha(i+1)$

Algoritmo 10: Partition-Search	Algoritmo 11: Eager-Search
Input: A counterexample w with $ w = m$ Output: Index $i : \alpha(i) \neq \alpha(i+1)$ $step \leftarrow \lfloor \frac{m}{\log_2(m)} \rfloor$, $low \leftarrow 0$, $high \leftarrow m$ $found \leftarrow \text{false}$ while $high - step > low$ and $\neg found$ do if $\alpha(high - step) = 0$ then $low \leftarrow high - step$ $found \leftarrow \text{true}$ break else $high \leftarrow high - step$ end if end while return $Binary\text{-}Search(\alpha, low, high)$	Input: A counterexample w with $ w = m$ Output: Index $i : \beta(i) = 1$ $low \leftarrow 0$, $high \leftarrow m - 1$ while $high > low$ do $mid \leftarrow \lfloor \frac{low+high}{2} \rfloor$ if $\beta(mid) = 1$ then return mid else if $\beta(mid) = 0$ then $low \leftarrow mid + 1$ else $high \leftarrow mid - 1$ end if end while return low

4.4 L'algoritmo

4.4.1 Funzionamento

ObP nella fase d'inizializzazione crea il componente corrispondente allo stato iniziale $C_\epsilon = \langle \Sigma \cup \{\epsilon\}, \epsilon, \epsilon, \emptyset \rangle$ ed il DT è costituito solo dalla radice quindi $DT = \langle \{n_\epsilon\}, n_\epsilon, \emptyset, \tau(n_\epsilon) = \epsilon, \{n_\epsilon\} \rangle$ come si può vedere nell'algoritmo 15. Dopodichè si chiama la funzione $closePack()$ (vedasi algoritmo 14) che ha lo scopo di rendere chiusi e completi C_I e modificare il DT in modo da rappresentare la stessa ipotesi rappresentata da C_I . Si completano i C_I e poi si ricerca un componente C_u (questo in generale e non solo nella fase di inizializzazione dove l'unico componente è C_ϵ) e un prefisso $u' \in C_u$ per cui $row(u) \neq row(u')$. Si seleziona il suffisso v per cui $OT[u][v] \neq OT[u'][v]$ e si divide C_u chiamando la funzione $split$ (algoritmo 13) che genererà un nuovo componente $C_{u'}$ e lo ritornerà a $closePack()$. In $split()$ alcuni dei prefissi $U \in C_u$, che indichiamo con $x \in U$, ed esattamente quelli per cui $OT[x][v] \neq OT[u][v]$ vengono fatti migrare in $C_{u'}$ che nel frattempo è stato creato (cioè eliminati dal componente C_u ed immessi in $C_{u'}$). Si procede poi a modificare di conseguenza anche il DT : si individua il nodo foglia con etichetta u e lo si splitta nel senso che questo nodo foglia diventa un nodo interno con etichetta v (il suffisso, cioè il discriminatore) ed i suoi figli saranno due nodi foglia uno con etichetta u' e l'altro con etichetta u come si può apprezzare in figura⁶ 4.5b (si stabilisce qual è il figlio sinistro e quale il destro in base al risultato della $MQ \lambda^A(uv)$ nel target A , se questa fa zero u è il figlio sinistro del nuovo nodo con etichetta v altrimenti è il figlio destro). Si puntualizza che lo $split$ non necessita di MQ aggiuntive e che l'insieme V del nuovo componente creato con lo $splitting$ è lo stesso dell'insieme V del componente da cui ha origine. A questo punto $split()$ ritorna il componente in

⁶Per coerenza con il discorso fatto si consideri $v = v$, $b = u, b' = u'$

questione a `closePack()` che memorizza il componente trovato $C_{u'}$ in W^7 . Finchè W non è vuoto si deve estrarre ed eliminare da W un componente, nella fattispecie $C_{u'}$, e concatenare l'access sequence del componente u' ad ogni simbolo di Σ e per ogni stringa ottenuta effettuare il *sift* (algoritmo 12). Questo serve per assicurare in ogni caso la possibilità di costruire una nuova ipotesi H in modo che per ogni nuovo componente aggiunto per ogni simbolo dell'alfabeto sia ben definito lo stato che viene raggiunto. Adesso si descrive in dettaglio come avviene il sift di una stringa x nel DT : si parte dalla radice e si effettua la query nel target $A \lambda^A(\tau(n_0) \cdot x)$, se da esito 0 si procede verso il sottoalbero sinistro altrimenti verso quello destro. Si continua in questa maniera finchè due situazioni possono presentarsi:

- Un nodo foglia $n_{x'}$ è incontrato. Significa che la stringa x in H porta nello stato rappresentato dallo foglia in cui si è arrivati: detto x' lo short prefix di questa foglia si ha che $x \in [x']_{\sim_{OT}}$. Quindi si dovrà anche provvedere ad aggiungere x all'insieme U del componente $C_{x'}$. L'assegnazione della stringa come nuovo prefisso a un componente non è necessariamente definitiva perchè successivamente può accadere che la scoperta di un nuovo suffisso renda non chiuso un componente e per assicurare la chiusura si debba effettuare uno split che divide il componente in due parti e causando così possibilmente anche lo split di alcuni prefissi.
- Un nodo interno n_z con un solo figlio e con etichetta z è incontrato ma $\lambda^A(xz)$ suggerisce di andare verso il percorso dove n_z non ha figli. In questo caso deve avvenire la creazione di una nuova foglia n_x con etichetta x come figlio del nodo n_z . Conseguentemente deve essere aggiunto C_x a C_I . L'insieme di suffissi V di C_x sarà inizializzato in `OneLocally` con i suffissi trovati lungo il percorso nel DT per arrivare alla nuova foglia e con `OneGlobally` e `AllGlobally` con i suffissi globali dell'algoritmo.

Nel caso in cui `sift()` torna un nuovo componente a `closePack()` quest ultimo va aggiunto in W . Si ripete il procedimento finchè W non è vuota. In ultima analisi l'algoritmo termina quando C_I è completo (la non completezza è generata dal *sifting* e anche l'eventuale non chiusura tranne alla prima iterazione dove è causata dal suffisso trovato nella decomposizione del controesempio). Si procede poi alla generazione dell'ipotesi H come visto nell'algoritmo 7 e si effettua un *EQ* cui il *teacher* può rispondere dato che si assume che appartenga alla classe dei *MAT*. Se il target A e l'ipotesi H sono equivalenti l'algoritmo termina garantendo che H sia il DFA minimo e l'equivalenza di A e H altrimenti verrà tornato un controesempio che verrà sfruttato per trovare un suffisso discriminante due prefissi appartenenti allo stesso componente (e con uno dei prefissi, diciamo x , : $x \in Sp$). Se si usa `OneLocally` si aggiunge il suffisso all'insieme V di C_x , con `OneGlobally` si aggiunge il suffisso all'insieme V che sarà globale per tutte le componenti. Con la strategia `AllGlobally` non

⁷ (solo quando `closePack()` viene chiamato per la prima volta in assoluto, immediatamente dopo la fase di inizializzazione, a W deve essere aggiunto anche C_ϵ (per esempio una coda))

è necessario effettuare la decomposizione del controesempio in quanto si aggiungeranno tutti i suffissi del controesempio all'insieme di suffissi V globale e comune a tutte le componenti ma è chiaramente una strategia controproducente. L'aggiunta del suffisso v garantisce la non chiusura ad ogni “ generazione ” e quindi l'aggiunta di almeno un nuovo componente, e quindi stato, mediante lo *split*.

Algoritmo 12 OBP-SIFT

Input: a $DT = \langle N, n_0, E, \tau, L \rangle$, C_I , new prefix $u \in \Sigma^*$

Output: A new component or “OK”

```

1:  $n = n_0$ 
2: while  $n \notin L$  do
3:    $v \leftarrow \tau(n)$ 
4:    $o \leftarrow MQ(uv)$   $\triangleright MQ(uv) = \lambda^A(uv)$ 
5:   if  $\exists(n, n', o) \in E$  then  $\triangleright$  Se  $n$  ha un figlio nella direzione indicata da  $o$ 
6:      $n \leftarrow n'$ 
7:   else  $\triangleright$  Il nodo  $n$  non ha figli nella direzione indicata da  $o$ 
8:     Create new node  $n_u$ 
9:      $N \leftarrow N \cup \{n_u\}$ ,  $E \leftarrow E \cup \{(n, n_u, o)\}$ 
10:     $\tau(n_u) = u$ 
11:    Create component  $C_u$ 
12:     $\triangleright$  Aggiungi a  $C_u$  lo short prefix  $u$  e i suffissi secondo la strategia usata
13:    return  $C_u$ 
14: end while  $\triangleright$  Se si è qui significa che si è arrivati a una foglia
15:  $u' = \tau(n)$   $\triangleright$  Si prende lo short prefix del nodo  $n$ 
16: add  $u$  to  $C_{u'}$   $\triangleright$  aggiungere il prefisso al componente solo se il prefisso non è già presente
17: return “OK”
```

Inoltre a differenza di L^* in ObP è possibile sfruttare più volte lo stesso controesempio. In L^* tutti i prefissi del controesempio compreso il controesempio stesso vengono aggiunti alla tabella di osservazione e la nuova ipotesi generata è consistente con essi e quindi alla successiva “ generazione ” il controesempio precedente non è più riutilizzabile perchè difatti non è più in $\mathcal{L} \oplus L(H)$. In ObP invece viene aggiunto un solo suffisso del controesempio e quindi potrebbe accadere che alla successiva “ generazione ” sia ancora un controesempio utilizzabile per trovare un altro suffisso che produca la non chiusura. Ciò può fare risparmiare molte EQ al costo di una MQ aggiuntiva per ogni “ generazione ” (perchè è necessario testare se il controesempio è ancora tale).

4.4.2 Correttezza

La correttezza dell' ObP scaturisce dal mantenimento di tre *invarianti d'apprendimento* :

Algoritmo 13 OBP-SPLIT

Input: a $DT = \langle N, n_0, E, \tau, L \rangle$, C_I , a component $C_{u_0} = \langle U, u_0, V, OT \rangle$, a prefix $u \in U$, a suffix $v \in V : OT[u_0][v] \neq OT[u][v]$

Output: A new component

```

1: Create component  $C_u = \langle \emptyset, u, V, \emptyset \rangle$ 
2: for  $u' \in U$  do
3:   if  $OT[u_0][v] \neq OT[u'][v]$  then
4:     Transfer  $u'$  from  $C_{u_0}$  to  $C_u$             $\triangleright$  Trasferire significa eliminare da  $C_{u_0}$ 
5:   end for
    $\triangleright$  Adesso a seguire le modifiche da apportare al discrimination tree
6: Let  $n \in L$  where  $\tau(n) = u_0$             $\triangleright$  Seleziona la foglia con etichetta  $u_0$ 
7:  $\tau(n) = v$             $\triangleright$  Modifica l'etichetta del nodo con quella del suffisso discriminante
8: Create new node  $n_u$ 
9: Create new node  $n_{u_0}$ 
10:  $N \leftarrow N \cup \{n_u, n_{u_0}\}$ 
11:  $\tau(n_u) = u$ 
12:  $\tau(n_{u_0}) = u_0$ 
13:  $E \leftarrow E \cup \{(n, n_u, OT[u][v])\} \cup \{(n, n_{u_0}, OT[u_0][v])\}$ 
14: return  $C_u$ 
```

Algoritmo 14 OBP-CLOSEPACK

Input: a observation pack $\langle DT, C_I \rangle$

Output: ipotesi H

```

1:  $W \leftarrow \emptyset$  (only in first call ever  $W \leftarrow \{C_\epsilon\}$ )
2: while  $C_I$  is unclosed or incomplete do
3:   Complete  $C_I$ 
4:   Let  $C_{u_0} = \langle U, u_0, V, OT \rangle$  with  $u \in U, v \in V : OT[u_0][v] \neq OT[u][v]$ 
5:    $C_u = \text{OBP-SPLIT}(DT, C_I, C_{u_0}, u, v)$ 
6:    $W \leftarrow W \cup \{C_u\}$ 
7:   while  $W \neq \emptyset$  do
8:      $C_u \leftarrow \text{poll}(W)$ 
      $\triangleright$  Estrai un componente secondo una qualche politica ad esempio FIFO
9:     for  $a \in \Sigma$  do
10:       $C = \text{OBP-SIFT}(DT, C_I, ua)$ 
11:      if  $C \neq \text{"OK"}$  then
12:         $W \leftarrow W \cup C$ 
13:      end for
14:   end while
15: end while
16:  $H = \text{OBP-BUILDAUTOMATON}(C_I)$ 
17: return  $H$ 
```

Algoritmo 15 OBSERVATION PACK

Input: alfabeto Σ **Output:** minimal DFA $H : L(H) = \mathcal{L}$

```

1:  $C_\epsilon = \langle \Sigma \cup \{\epsilon\}, \epsilon, \epsilon, \emptyset \rangle$ 
2:  $C_I = C_\epsilon$ 
3:  $DT = \langle \{n_\epsilon\}, n_\epsilon, \emptyset, \tau(n_\epsilon) = \epsilon, \{n_\epsilon\} \rangle$ 
4: loop
5:    $H = \text{OBP-CLOSEPACK}(DT, C_I)$ 
6:    $w = \text{EQ}(H)$ 
7:   if  $w = \text{"OK"}$  then
8:     return  $H$ 
9:   end if
10:  if AllGlobally then
11:    Add all suffixes of  $w$  to  $V$  of all components in  $C_I$ 
12:    continue
13:  end if
14:  Split  $w$  with a decomposition method in  $uav : \lambda^A(\underbrace{\lfloor u \rfloor_H a}_p v) \neq \lambda^A(\underbrace{\lfloor ua \rfloor_H}_{u'} v)$ 
      tale che  $p \in C_{u'}$ 
15:  if OneGlobally then
16:    Add  $v$  to  $V$  of all components  $\in C_I$ 
17:  end if
18:  if OneLocally then
19:    Add  $v$  to  $V$  of  $C_{u'}$ 
20:  end if
21: end loop

```

- (I1) $u \neq u' \in Sp$ corrispondono a stati differenti nel *DFA* target A cioè $A[u] \neq A[u']$.
- (I2) Ogni stato q in H è accettante se e solo se “parsando” $\lfloor q \rfloor_H$ nel target A si termina pure in uno stato accettante. In simboli: $\forall q \in Q^H : q \in F_{\mathbb{A}}^H \Leftrightarrow f_{Sp}(q) \in F_{\mathbb{A}}^A$
- (I3) Transizioni in H puntano allo stato corretto nel target, se quest ultimo è già stato scoperto dal *learner*: $\forall q \in Q^H, a \in \Sigma$ si ha $\delta^A(f_{Sp}(q), a) \in A[Sp] \implies f_{Sp}(\delta^H(q, a)) = \delta^A(f_{Sp}(q), a)$

E' evidente che la scoperta di nuovi short prefix in Sp mantenendo la condizione (I1) porterà alla scoperta di tutti gli stati nel target A (dato che sono finiti per il teorema di Myhill-Nerode descritto in A.1). Le condizioni (I2) ed (I3) garantiscono che f_{Sp} è un isomorfismo. In L^* vi è una violazione della condizione (I1) perchè può accadere che più di uno short prefix (più di uno stato RED) rappresentino lo stesso stato nel target. Il requisito di consistenza tuttavia garantisce che uno qualsiasi di questi può essere scelto come rappresentativo dello stato target.

Si dimostra che le tre *invarianti* sono possedute dall'algoritmo *ObP*:

- (I1) Siano u e $u' \in Sp$ e $u \neq u'$, allora essendo in due componenti diversi esiste un suffisso v che distingue u e u' cioè tale che $\lambda^A(uv) = OT[u][v] \neq \lambda^A(u'v) = OT[u'][v]$. Quindi si ha anche $\lambda_{A[u]}^A(v) \neq \lambda_{A[u']}^A(v)$ e quindi $A[u] \neq A[u']$
- (I2) Sia $u = \lfloor q \rfloor_H$ l'access sequence di uno stato $q \in Q^H$. Si ha allora che $q \in F_{\mathbb{A}}^H \iff$ ⁸ $OT[u][\epsilon] = 1$. Dato che $OT[u][\epsilon] = \lambda^A(u \cdot \epsilon) = \lambda_{A[u]}^A(\epsilon)$ si può concludere che $q \in F_{\mathbb{A}}^H : u = \lfloor q \rfloor_H \Leftrightarrow A[u]$ ⁹ $\in F_{\mathbb{A}}^A$
- (I3) Sia dato uno stato $q \in Q^H$ tale che $u = \lfloor q \rfloor_H$, il successore di q per il simbolo $a \in \Sigma$ è determinato con il *sifting* di ua nel *DT*. Sia lo stato con access sequence u' il risultato di questa operazione di *sifting*, si definisce allora $\delta^H(q, a) = H[u']$. Se però nel target A questa transizione è errata cioè $\delta^A(A[u], a) \neq A[u']$, si sa per certo che il successore reale sul simbolo a cioè $A[ua]$ non è ancora stato scoperto, quindi (I3) è preservata: si noti che *siftando* ua nell'albero, arrivando ad u' si escludono definitivamente gli altri stati scoperti fino a quel punto $A[Sp \setminus \{u'\}]$ come possibili successori sul simbolo a di $A[u]$.

Ciò dimostra la correttezza dell' *ObP* ma tramite quanto detto sopra si dimostra solo che H ed A sono isomorfi senza assumere la canonicità per H . Infatti in generale A non è un *DFA* minimo e secondo quanto detto finora non si può dedurre che

⁸Nel caso della strategia OneGlobally è lampante capire che in ogni componente ci sarà sempre il suffisso ϵ essendo questo già presente in fase d'inizializzazione. Utilizzando OneLocally accade lo stesso perchè i suffissi da aggiungere ad un nuovo stato (rappresentato da una access sequence e da un componente) sono quelli incontrati durante il *sifting* dell'access sequence nel discrimination tree e quindi si passa sempre dalla radice che contiene il suffisso ϵ

⁹è uguale a $f_{Sp}(q)$

H sia minimo ma solo isomorfo ad A . Inoltre a causa del meccanismo di gestione del controesempio non vi è la garanzia che l'insieme di suffissi sia *suffix-closed* dato che viene aggiunto solo un suffisso del controesempio. Quanto detto causa anche la generazione di ipotesi intermedie non minime. Tuttavia applicando l'euristica di utilizzare più volte lo stesso controesempio finchè da esso non è più possibile estrarre un suffisso discriminante è garantito che l'ipotesi finale è un *DFA* canonico [42, p. 25]. Esiste un'ottimizzazione che tramite il concetto di *semantic suffix closdness*, sempre in [42], assicura che anche le ipotesi intermedie prodotte siano canoniche ed il meccanismo che permette di scoprire dei nuovi suffissi da quelli esistenti in modo da ottenere la *semantic suffix closdness* permette di risparmiare anche delle *EQ* e *MQ* perchè permette di scoprire nuovi suffissi discriminanti e nuovi stati senza costi aggiuntivi in termini di *EQ* ed *MQ* (vi è però il tempo di esecuzione aggiuntivo dell'algoritmo per garantire la *semantic suffix closdness*).

4.4.3 Complessità computazionale

Il tempo di esecuzione degli algoritmi di *active learning* è quasi sempre un polinomio di grado piccolo dipendente dalla dimensione dell'alfabeto k , il numero di stati del *DFA* canonico equivalente ad \mathcal{L} che qui si indica con n , e la lunghezza del controesempio m con cui si indica la lunghezza del più lungo controesempio tornato dal *teacher*. Il tempo di esecuzione è quasi sempre dominato dal tempo speso nell'effettuare *MQ* ed *EQ*¹⁰ e quindi contare quest'ultime può essere sufficiente per analizzare le prestazioni dell'algoritmo. In quest'ottica in [19, p. 20] si trova un'analisi dell'*ObP* nelle sue varie forme per le Mealy machines confrontando i risultati con L^* . Questi risultati vengono qui applicati ai *DFA* e riportati nella tabella 4.1. Dato che per tutti gli algoritmi il numero di *EQ* è limitato da $\mathcal{O}(n)$ l'analisi delle *EQ* viene omessa. Infine si noti come l'analisi venga effettuata nel caso peggiore. Per tutti gli approcci il numero di suffissi necessari per distinguere tutti gli stati è limitato da n dato che ogni aggiunta di un suffisso determina almeno uno *split* e l'individuazione di almeno un nuovo stato (stati che sono al massimo n). Il numero di prefissi in tutte le componenti per *ObP* è al più $n \cdot k$ perchè al più si hanno n componenti (n stati), se da ogni stato si hanno k transizioni il numero di transizioni totali sarà $n \cdot k$ (i prefissi di uno stato sono le transizioni che finiscono in quello stato). La dimensione della tabella di osservazione o meglio la somma delle dimensioni di tutte le tabelle di osservazione di ogni componente è allora $nk \cdot n$ (numero prefissi \cdot numero suffissi). Per *AllGlobally* si aggiungono tutti gli m suffissi di ogni controesempio, e lo si fa n volte quindi si avranno $n \cdot m$ suffissi con una tabella di dimensione $nk \cdot nm$. Per *OneLocally* e *OneGlobally* vi è da aggiungere il numero di query fatte durante la ricerca del suffisso che nel caso della ricerca binaria è $\log_2(m)$ effettuate n volte. Per la dimensione della tabella di L^* si faccia riferimento alla sottosezione 3.2.2.

¹⁰Talvolta si conta anche il numero di simboli contenuto in tutte le stringhe per cui si effettua una *MQ* per pesare il costo di una *MQ* dato che è lineare con la lunghezza

Algoritmo	Dimensione tabella	Membership queries
L^*	$(k + 1) \cdot (n + m(n-1)) \cdot n$	$\mathcal{O}(n^2 km)$
AllGlobally	$nk \cdot nm$	$\mathcal{O}(n^2 km)$
OneLocally	$nk \cdot n$	$\mathcal{O}(n^2 k)$
OneGlobally	$nk \cdot n$	$\mathcal{O}(n^2 k)$

Tabella 4.1: Complessità delle membership queries per le differenti varianti di ObP

Tuttavia i risultati evidenziati nella tabella 4.1 ed anche quelli omessi per le EQ costituiscono solo un limite superiore, il lavoro sperimentale in [19, p. 22-23] mette meglio in evidenza le differenze tra i vari algoritmi. OneLocally è l'algoritmo con il minore numero di MQ dato che il suffisso discriminante è aggiunto solo ad un componente e quindi sarà necessario completare solo la tabella di osservazione di questo componente, e nonostante OneLocally e OneGlobally abbiano lo stesso ordine di grandezza per il numero di MQ fatte al crescere dei parametri la differenza in termini di MQ è notevole. In OneLocally tuttavia come detto in [19, p. 23] il numero delle EQ aumenta drasticamente rispetto a OneGlobally anche se in numero pur sempre limitato dal numero di stati del DFA minimo equivalente ad \mathcal{L} . L^* effettua un numero di EQ quasi sempre minore (seppur di poco) di OneGlobally ma un numero di MQ sempre molto maggiore sia a OneLocally che a OneGlobally. AllGlobally consente di effettuare un numero di EQ quasi sempre leggermente inferiore anche ad L^* ma il numero di MQ è sempre molto elevato anche rispetto ad L^* .

4.4.4 Discrimination tree vs Tabella di Osservazione localizzata

In figura 4.4a vi è la rappresentazione della tabella di osservazione per l'algoritmo L^* per il DFA in figura 4.4b. I prefissi RED distinti tra di loro $\{\epsilon, a, b\}$ (cioè con $\text{row}()$ distinte tra di loro) sono gli short prefix delle classi di equivalenza che hanno una corrispondenza con gli stati del DFA . I prefissi BLUE sono invece delle stringhe appartenenti ad una delle classi di equivalenza (un prefisso BLUE x termina nello stato rappresentato da uno stato RED r ed appartiene alla sua classe di equivalenza se $\text{row}(r) = \text{row}(x)$). Il DT è una rappresentazione della tabella di osservazione scevra da ridondanze come si può apprezzare in figura 4.5a. Infatti a parte lo short prefix superfluo bb , nella tabella di osservazione di L^* non tutti i suffissi sono necessari per distinguere le varie classi di equivalenza (gli stati RED). Ad esempio il singolo suffisso ϵ da solo è sufficiente per distinguere $[\epsilon]$ dalle altre classi di equivalenza. Lo scopo di un DT è di eliminare queste ridondanze ed organizzare le osservazioni delle passate MQ in una maniera efficiente in modo da consentire efficientemente il *sifting* di una stringa. Nella tabella 4.2 vi è l'insieme di componenti di ObP corrispondente

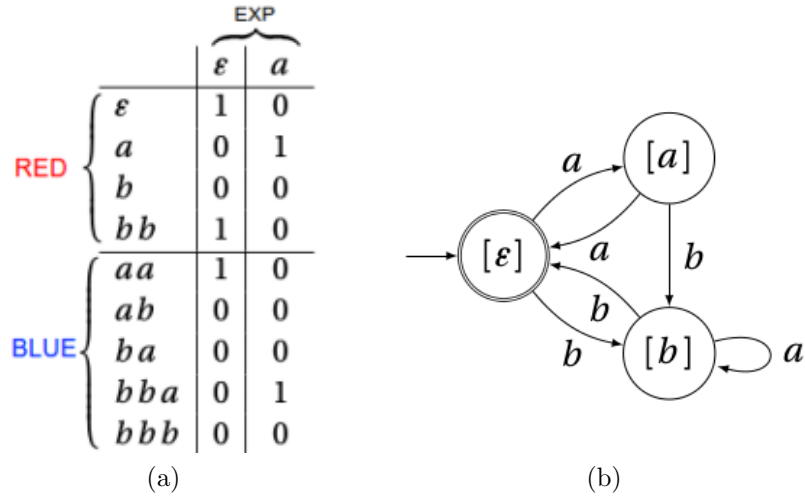
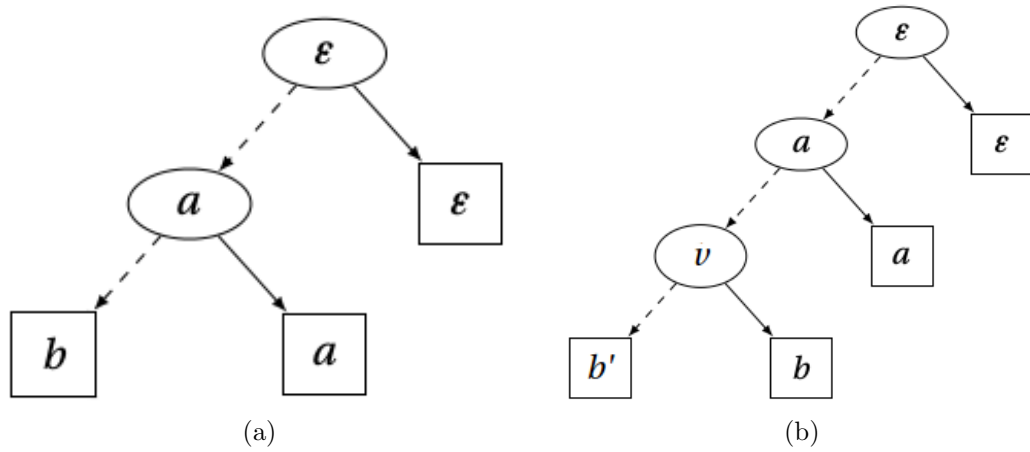
Figura 4.4: DFA ipotesi e corrispondente tabella di osservazione in L^* 

Figura 4.5: Discrimination Tree e split di uno stato

alla tabella di osservazione per OneGlobally anche se è solo un esempio e molti dei prefissi presenti in L^* potrebbero non essere presenti in ObP .

C_ϵ	ϵ	a
ϵ	1	0
aa	1	0
bb	1	0

C_a	ϵ	a
a	0	1
bba	0	1

C_b	ϵ	a
b	0	0
ab	0	0
ba	0	0
bbb	0	0

Tabella 4.2: Insieme di componenti

Sia il DT che C_I sono rappresentativi dell'ipotesi e quindi vi deve essere in ogni momento coerenza anche tra DT e C_I oltre che con l'ipotesi. Infatti per ogni foglia nell'albero c'è un corrispondente componente in C_I , l'etichetta della foglia corrisponde all'access sequence di quel componente. Entrambe le strutture dati sono rappresentative dell'ipotesi. A questo punto ci si potrebbe chiedere perchè utilizzare sia un DT che C_I per rappresentare l'ipotesi. Le considerazioni da fare differiscono tra OneLocally e OneGlobally. Quando si fa il sift di una stringa che termina in un nodo foglia si aggiungerà quella stringa al componente corrispondente a quel nodo foglia come detto nella sottosezione 4.4.1. Tuttavia in OneGlobally l'insieme V di suffissi è globale e non coincide con i suffissi (che costituiscono un sottoinsieme di tutti i suffissi globali V), etichette dei nodi interni, incontrati durante la navigazione del DT per arrivare alla foglia summenzionata. Quindi vi è l'evenienza che tramite il *sift* di una stringa venga introdotta un'ulteriore non chiusura (ulteriore perchè sicuramente la non chiusura viene prodotta in prima istanza dal suffisso estrapolato dal controesempio) e conseguente *split*. Se non avessimo l'insieme di componenti sarebbe arduo esaminare la non chiusura nello scenario appena descritto da cui l'esigenza di C_I . Si noti inoltre che quanto appena descritto è il motivo per cui il numero di EQ non coincide ma è minore del numero degli stati del DFA minimo equivalente ad \mathcal{L} ; infatti ad ogni “ generazione ” si possono avere più di uno *split* (ogni *split* consente di determinare un nuovo stato ed avvicinarci più velocemente alla soluzione) proprio per il motivo appena descritto. In OneLocally invece i suffissi di un componente C_x coincidono esattamente con i suffissi incontrati durante il *sifting* di x nel DT . Quando si effettua il *sifting* di un'altra stringa che tramite il DT si scopre essere in $[x]_{\simeq_{OT}}$, dato che giunge nel nodo foglia che ha $\tau(n_x) = x$, i suoi suffissi sono esattamente quelli incontrati durante la navigazione del DT e quindi non può essere introdotta non chiusura. Quindi in OneLocally si ha esattamente uno *split* ad ogni “ generazione ” ed il numero di EQ coincide con il numero di stati del DFA target minimizzato. In realtà non è così per via dell'ottimizzazione descritta in 4.4.1 che consente di riutilizzare più volte lo stesso controesempio e risparmiare delle EQ , ma comunque il numero di EQ in OneLocally sarà maggiore del numero di EQ in OneGlobally. Va detto che il controllo sulla non chiusura che si effettua in CLOSEPACK alla riga 14.2 può essere eliminato in OneLocally (il controllo va fatto solo la prima volta in assoluto che CLOSEPACK è chiamato, per le restanti generazioni la non chiusura si verificherà solo per via del suffisso del controesempio).

Riassumendo in OneLocally si potrebbe fare a meno dell'insieme di componenti ed utilizzare esclusivamente il *DT*. Tuttavia utilizzare anche l'insieme di componenti in ogni caso comporta dei vantaggi prestazionali per alcune operazioni da fare in *ObP*. La costruzione di *H* prevede di trovare lo short prefix associato ad una dato prefisso (ottenuto concatenando un altro short prefix con un simbolo di Σ), quest'operazione è più efficiente tramite C_I dato che nel *DT* comporta il *sifting* del prefisso e quindi un numero di MQ nel caso medio logaritmico da moltiplicare per la dimensione media dei suffissi incontrati. E ancora nella decomposizione del controesempio vi è l'esigenza di trovare dato un prefisso, lo si chiami p , il corrispondente short prefix di p ma può accadere che p non sia mai stato visto o che facendone il *sift* nel *DT* non termini in una foglia già esistente ma invece provochi la creazione di un nuovo nodo foglia. Quindi non riusciamo a trovare lo short prefix associato a p senza l'ausilio di C_I , anche se in realtà è pur sempre possibile effettuare il “ parsing ” della stringa x in *H* e tornare lo short prefix associato allo stato cui si arriva in *H*. In realtà lo sforzo computazionale richiesto per mantenere un'ipotesi anche tramite l'insieme di componenti potrebbe essere maggiore dei vantaggi prestazionali ottenuti rispetto ad un'implementazione che non fa uso che del *DT* per rappresentare *H* nel caso di OneLocally. Si ribadisce invece che nel caso di OneGlobally (e anche AllGlobally) ,per i motivi suddetti, C_I è necessario per testare la chiusura e garantire un corretto funzionamento.

4.4.5 Teacher

Tutte le considerazioni effettuate nella sottosezione inerenti il *teacher* di L^* rimangono valide anche per l'*ObP* e ad esse si rimanda.

4.5 Scelte Progettuali

Si è implementato in C++11 l'algoritmo *ObP* utilizzando la versione OneGlobally (si è implementato anche OneLocally ma la versione di *ObP* inclusa nella libreria Gi-learning è OneGlobally) ed interfacciandosi con la libreria preesistente Gi-learning. L'esposizione e lo pseudocodice riportato nella sezione 4.4 per l'*ObP* fanno riferimento a Howar [19] tranne qualche piccola modifica. Diversamente alcune delle scelte progettuali per il codice si discostano in parte da quanto esposto in Howar. Qui saranno illustrate le differenze principali e le ragioni da cui tali scelte sono scaturite. In prima analisi viene effettuata una preliminare minimizzazione del *DFA* target al fine di permettere un'eventuale¹¹ velocizzazione del *testing* dell'equivalenza tra *H* ed il *DFA* target, dato che le *performances* dell'algoritmo d'equivalenza *table-filling* dipendono in maniera quadratica dal numero di stati.

E' stata inserita l'ottimizzazione che permette di sfruttare più volte lo stesso controesempio finchè non lo è più. Come detto ciò consente di ridurre il numero di

¹¹perchè il *DFA* può essere già minimo

EQ. L'ottimizzazione è presente anche nell'implementazione dell'*ObP* nella **LearnLib**¹².

Non è stata implementata invece l'ottimizzazione *semantic suffix closdness* (vedasi [42]) che consente di ottenere delle ipotesi intermedie minime (che consentono di velocizzare le *EQ*) e di ridurre eventualmente il numero di *EQ*. L'ottimizzazione è invece presente nell'implementazione dell'*ObP* nella **LearnLib**.

Si è scelto di completare le componenti nel momento stesso che l'incompletezza è introdotta dato che i punti dove avviene sono ben circostanziati:

- dopo l'individuazione del suffisso discriminante, nell'algoritmo e alla riga 15.16, e la sua aggiunta all'insieme globale di suffissi che avviene in una nuova funzione chiamata UPDATE-FROM-COUNTEREXAMPLE. Inoltre in UPDATE-FROM-COUNTEREXAMPLE dato che — in corrispondenza dei prefissi discriminati dal suffisso tornato dal metodo di decomposizione del controesempio — si conosce già l'esito della *MQ*, perchè già effettuate nel metodo di decomposizione del controesempio, si risparmiano 2 *MQ*. Detto n il numero di stati del *DFA* target minimo ciò consente di risparmiare fino a un massimo di $2 \cdot n$ *MQ*.
- in OBP-SIFT(), l'algoritmo 12. Sia se durante il *sifting* il prefisso termini in un componente esistente oppure in uno nuovo è necessario effettuare delle *MQ* per completare il componente esistente oppure il nuovo componente rispettivamente sull'insieme di suffissi globale. In questo modo durante il *sifting* sarà possibile evitare di eseguire nuovamente le *MQ* effettuate durante la navigazione del *DT* con quel dato prefisso per tutti i suffissi incontrati durante il *sifting* nel *DT*. Resta inteso che utilizzando la strategia OneGlobally non tutti i suffissi contenuti nell'insieme di suffissi globale saranno incontrati e per i restanti alla fine sarà necessario effettuare una *MQ* esplicita per assicurare la chiusura del componente.

OBT-SPLIT non introduce incompletezza.

La summenzionata gestione della completezza oltre a consentire di risparmiare delle *MQ* implica anche una migliore efficienza dell'algoritmo dato che alla riga 14.2 l'algoritmo originale OBT-CLOSEPACK deve controllare se C_I è completo e ciò comporta un controllo su tutte le componenti, controllo non più necessario.

Un'altra modifica significativa rispetto all'algoritmo OBT-CLOSEPACK originale (algoritmo 14) sta nell'individuazione del suffisso che determina la non chiusura, alla riga 4. Infatti il metodo di decomposizione del controesempio consente di determinare quali sono i due prefissi ed il suffisso che determina la non chiusura. Quindi ogni volta che viene chiamato OBT-CLOSEPACK non è necessario spendere del tempo di esecuzione nel cercare dove non si verifica la non chiusura. Questo è vero ad ogni prima chiamata di OBT-CLOSEPACK, può poi accadere che venga generata ulteriore non chiusura all'interno dell'algoritmo OBT-CLOSEPACK stesso che

¹²www.learnlib.de in cui si può trovare sotto la nomenclatura *Discrimination Tree* un'implementazione in Java della algoritmo *ObP* di Howar

in questo caso va individuata. C'è da precisare che quanto detto non è valido per la prima chiamata in assoluto di OBT-CLOSEPACK dato che la prima chiamata in assoluto non è preceduta da una chiamata al metodo di gestione del controesempio (che come detto permette di individuare esattamente in quale componente e per quale coppia di prefissi e quale suffisso accade la non chiusura).

Inoltre esistono adesso due versioni del metodo di decomposizione del controesempio BINARY-SEARCH, di cui una è uguale a quella descritta nell'algoritmo 8, che è usata dagli altri metodi di decomposizione del controesempio, e l'altra invece consente di scovare la decomposizione del controesempio *on the fly* cioè durante l'esecuzione dell'algoritmo stesso (cioè all'interno dell'algoritmo di decomposizione del controesempio e quindi non verrà tornato un indice ma la decomposizione stessa). Nell'appendice, ed esattamente nella sezione B.2 sono inseriti i dettagli implementativi più significativi.

Capitolo 5

SVM

La tesi è volta ad investigare lo scenario in cui si utilizzi un classificatore come base per costruire un Oracolo. Da quest esigenza nasce la necessità di utilizzare uno dei tradizionali metodi statistici di *machine learning*. Nella fattispecie si deve risolvere un problema di **classificazione binaria** dato che il modello, una volta avvenuto l’addestramento, ha lo scopo di predire come accettante o rigettante , cioè appartenente o meno ad \mathcal{L} , il campione sotto esame.

Tra i moltissimi metodi statistici esistenti forse i più noti sono *Random Forest*, *Recurrent Neural Network*, *Convolutional Neural Network* e *SVM*. Tra questi un metodo che è stato molto utilizzato nell’apprendimento di linguaggi è una riadattazione delle *Reti Neurali Ricorrenti*, che si sono dimostrate adeguate allo scopo. In queste sede si è scelto di usare le *SVM* perchè rappresentano un classificatore molto potente, e sebbene esistano dei lavori inerenti il tema [23] non sono stati contestualizzati nell’ambito dell’*active learning* per *IIR* oppure sono limitati all’apprendimento di alcune specifiche classi di linguaggi [22] [9] [8].

5.1 Overview teorica

Il problema che si tenta di risolvere con le *SVM* , che è la radice da cui nascono anche altri modelli , appare sotto diversi nomi come il compromesso bias-varianza, controllo della capacità e dell’*overfitting* dei dati, ma l’idea è la stessa: dato un problema di **apprendimento supervisionato**, cioè con un insieme di addestramento di cardinalità finita che contiene i dati etichettati con la rispettiva classe di appartenenza (il *training set*) , le migliori *performances* di generalizzazione¹ del classificatore saranno ottenute dal raggiungimento del giusto equilibrio tra l’*accuracy* sul training set del classificatore e la capacità del modello. La capacità di un modello di classificazione statistico rappresenta la complessità, la potenza espressiva, la ricchezza piuttosto che la flessibilità della famiglia di funzioni $f(x, \alpha)$:

$$f : X \rightarrow Y \quad \text{con } X = \{x_1, x_2, \dots, x_l\}$$

¹Cioè una migliore capacità di predire correttamente la classe di appartenenza di dati mai visti, cioè non contenuti nel *training set*. Per questo motivo si parla di classificazione.

X contiene i campioni e rappresenta il *training set* e Y rappresenta i possibili valori delle etichette di ciascun campione e nel caso di **classificazione binaria** $Y = \{0, 1\}$. Inoltre si parla di famiglia di funzioni perchè *SVM* (come gli altri modelli) ha una serie di iperparametri, rappresentati da α , che identificano i diversi classificatori². Una capacità alta implica che le funzioni $f(x, \alpha)$ sono complesse cioè di alto grado ad esempio: il discorso è analogo a ciò che accade in una feedback-forward con tante unità nascoste. Per il principio del *Rasoio di Occam* (sezione 2.2) è bene selezionare il classificatore con la capacità minima che contemporaneamente si adatta ai dati del *training set* ma come si vedrà i due aspetti sono in contrapposizione e sarà necessario trovarne il giusto compromesso. Questo assunto più avanti sarà approfondito e giustificato. Per il momento basti dire che un classificatore con troppa capacità è come un botanista con una memoria fotografica che quando vede un albero mai visto — cioè appartenente a quello che formalmente viene identificato come *test set* — conclude che non è un albero perchè ha un numero di foglie diverso dagli alberi visti finora: situazione detta di *overfitting* in cui il classificatore si è adattato esclusivamente ai dati del *training set* ma non generalizza (analogo della rete neurale con troppe unità nascoste rispetto alla cardinalità del *training set*). D’altro canto una macchina con bassa capacità è come il fratello pigro del botanista che classifica qualunque cosa sia verde come un albero. In nessuno dei due casi si avrà una buona generalizzazione.

5.1.1 Rischio Atteso

Supponiamo di avere l osservazioni nel *training set*. Ogni osservazione è una coppia: un vettore $x_i \in \mathbb{R}^n$, $i = 1, \dots, l$ e l’etichetta corretta associata y_i . Per semplicità $y_i \in \{-1, 1\}$. Si assume che le coppie (x_i, y_i) siano estratte da una distribuzione di probabilità cumulativa (CDF) che si indica con $P(x, y)$, e con $p(x, y)$ la corrispondente densità di probabilità (PDF). Supponiamo che il modello stia provando ad imparare il mapping $x_i \rightarrow y_i$ per $i = 1, \dots, l$. Il modello è definito da una serie di possibili mapping $f(x, \alpha)$ tali che $x \rightarrow f(x, \alpha)$. Il modello rappresenta la classe di funzioni $f(x, \alpha)$, si parla di classe perchè più funzioni possono essere imparate dal modello cambiando gli *iperparametri* α . Fissare gli α (che possono essere più di uno) per un modello si concretizza in un modello “trained”, cioè in uno specifico classificatore. Ad esempio se il modello è una rete neurale gli *iperparametri* α sono tipicamente i pesi e il bias.

Seguendo il riferimento [46], si può definire il **rischio atteso** per un classificatore (α fissato) come:

$$R(\alpha) = \int \frac{1}{2} |y - f(x, \alpha)| dP(x, y) = \int \frac{1}{2} |y - f(x, \alpha)| p(x, y) dx dy \quad (5.1)$$

²Classificatore e modello non sono termini interscambiabili. Il modello è rappresentato dalle funzioni $f(x, \alpha)$ con α generico, un classificatore invece è una singola funzione che si ottiene dal modello per una specifica istanza degli *iperparametri* α .

Il rischio atteso è anche detto **true mean error** dato che è calcolato su tutti i possibili valori di x e y ($X \times Y$) cioè tiene conto di tutte le combinazioni sia sulle coppie nel *training set* sia di tutte quelle mai osservate. Inoltre nell'equazione (5.1) $1/2|y - f(x, \alpha)|$ è una **funzione di loss**, ma se ne poteva scegliere un'altra infatti in generale si ha $V(f(x, \alpha), y)$. La specifica funzione di loss scelta nell'equazione (5.1) può assumere solo valori in \mathbb{B} . Tuttavia $R(\alpha)$ così definito non è utile in quanto quasi mai si conosce $P(x, y)$ o una sua stima, allora si definisce il **rischio empirico** per un classificatore:

$$R_{emp}(\alpha) = \frac{1}{2l} \sum_{i=1}^l |y - f(x_i, \alpha)|$$

e rappresenta il tasso di errore medio sul *training set*. $R(\alpha) - R_{emp}(\alpha)$ è l'errore di generalizzazione. Si dice che un modello generalizza se

$$\lim_{l \rightarrow \infty} R(\alpha) - R_{emp}(\alpha) = 0$$

cioè al crescere degli elementi nel *training set* gli elementi mal predetti nel *test set* diminuiscono. Ma come già detto il rischio atteso non è quasi mai calcolabile per come è stato definito, allora con un'impostazione molto simile al *PAC-learning* introdotto in 2.1 Vapnik ha dimostrato in [46] che:

Definiti

$$\begin{aligned} \eta : 0 \leq \eta \leq 1 \\ h : h > 0 \end{aligned} \tag{5.2}$$

$$\varepsilon = \sqrt{\left(\frac{h(\log(2l/h) + 1) - \log(\eta/4)}{l} \right)} \tag{5.3}$$

allora si ha che:

$$R(\alpha) \leq R_{emp}(\alpha) + \varepsilon \quad \text{con probabilità } 1 - \eta \tag{5.4}$$

dove h è detta **Vapnik Chervonenkis (VC) dimension** e ε è detto **learning rate** o **VC confidence**. La *VC dimension* è una misura della capacità e sarà approfondita nella sottosezione 5.1.2. $R_{emp}(\alpha) + \varepsilon$ è talvolta detto **risk bound** dato che è un limite superiore del rischio atteso $R(\alpha)$. Il risultato dell'equazione (5.4) ci consente di trovare con probabilità $1 - \eta$ il classificatore che minimizza $R_{emp}(\alpha) + \varepsilon$. Tuttavia calcolare questo minimo è molto difficile come è spiegato nella sottosezione 5.1.3. Prima di parlarne si spiega cosa è la *VC dimension*.

5.1.2 VC dimension

La *VC dimension* è una misura della capacità di un insieme di funzioni $\{f(x, \alpha)\}$ che possono essere apprese da un modello statistico, ed è definita come la cardinalità del

più largo insieme di punti che un modello può **shatter**. Per *shatter* si intende che una delle funzioni è in grado di etichettare correttamente i punti o meglio di separare punti (che sarebbero dei campioni, delle osservature) con etichettature diverse. Ci si pone nel caso della classificazione binaria e si fissa il codominio di $\{f(x, \alpha)\}$ in $\{-1, 1\} \forall x, \alpha$. Se un insieme X di l punti viene etichettato in tutti i 2^l possibili modi, e per ognuna delle 2^l combinazioni, può essere trovata una funzione (con α specifico cioè un classificatore) dell'insieme $\{f(x, \alpha)\}$ che separa (o assegna) correttamente queste etichette, si dice che l'insieme di punti X è “*shattered*” dall'insieme di funzioni. Quindi la *VC dimension* dell'insieme di funzioni $\{f(x, \alpha)\}$ è definita come il **massimo** numero di punti che possono essere “*shattered*” da $\{f(x, \alpha)\}$. Si osservi che avere per esempio una *VC dimension* pari a tre significa che esiste almeno un insieme fatto da tre punti che può essere “*shattered*”, ma non è detto (tipicamente non lo è) che tutti gli insiemi di tre punti lo siano³. Si fornisce come esempio il calcolo delle *VC dimension* dell'insieme costituito da tutte le rette in \mathbb{R}^2 identificate dall'equazione $y = mx + q$ in cui i parametri α sono rappresentati da m e q . I punti possono essere etichettati positivamente o negativamente, quindi per essere “*shattered*” da una retta devono essere separati da quest'ultima in base all'etichettatura. Inoltre si rimarca che i punti possono essere collocati in qualunque maniera, ma una volta collocati le varie etichettature devono essere effettuate mantenendo fissa quella collocazione scelta. Con tre punti, si riesce a trovare una collocazione dei tre punti (qualsiasi tranne tre punti allineati) tale che esiste una retta (valori specifici di m e q) che separa i punti positivi da quelli negativi e si riesce a fare ciò per ciascuna delle $2^3 = 8$ etichettature diverse⁴ come si può apprezzare in figura 5.1.

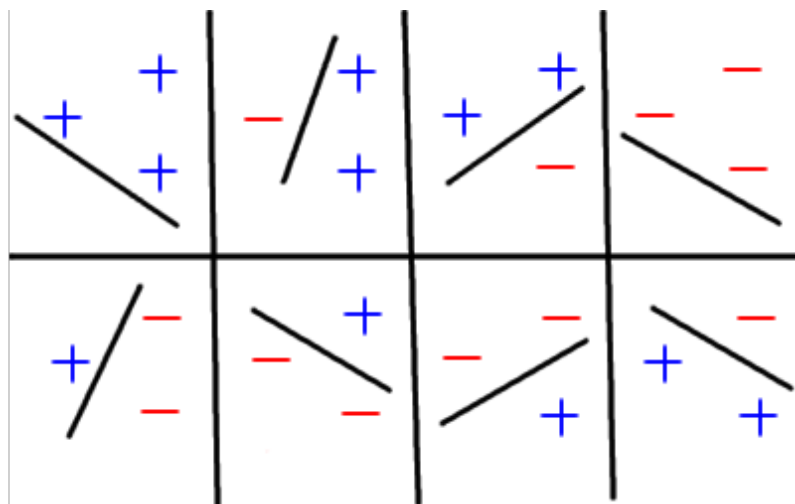


Figura 5.1: Tre punti in \mathbb{R}^2 , shattered da rette

³In questo caso si può solo concludere che non esiste nessun insieme di quattro punti che è “*shattered*”

⁴Si noti che in queste 8 etichettature la collocazione dei 3 punti deve restare costante ma si può scegliere un'altra funzione (retta) da un'etichettatura all'altra

Quattro punti non possono essere “*shattered*” quindi la *VC dimension* è tre. Più in generale la *VC dimension* dell’insieme di iperpiani in \mathbb{R}^n è $n + 1$. Una dimostrazione di questo risultato si può trovare in [6, p. 37].

5.1.3 Structural Risk Minimization

La *VC dimension* di un modello riveste un ruolo molto importante perchè come si evince dai risultati dell’equazione (5.4), fissati η e l , si ha che la *VC confidence* ε aumenta all’aumentare della *VC dimension* h . Quindi per diminuire il rischio atteso $R(\alpha)$ sembra sufficiente diminuire h ma in realtà non è così. Innanzitutto si precisa che un numero di parametri (α) maggiore nel modello non implica una *VC dimension* maggiore infatti esistono dei modelli con un solo parametro e *VC dimension* infinita. Inoltre possedere un valore di h più piccolo non comporta necessariamente di avere un rischio atteso più piccolo e quindi un classificatore migliore infatti un valore di h più piccolo significa che è stato ristretto l’insieme delle funzioni $\{f(x, \alpha)\}$ e può accadere che è stata eliminata proprio la funzione che minimizzava il rischio empirico. Quindi diminuendo h la *VC confidence* ε diminuisce ma il rischio empirico può aumentare e quindi diminuire h non implica che il rischio atteso $R(\alpha)$ diminuisca⁵. Il motivo di questo comportamento è che la *VC confidence* dipende dalla classe di funzioni $\{f(x, \alpha)\}$ invece il rischio empirico dipende dalla scelta degli *iperparametri* e quindi da una specifica funzione.

Al fine di minimizzare $R(\alpha)$ si deve trovare il giusto compromesso tra due quantità che manifestano un andamento opposto al variare di h : il rischio empirico (che diminuisce all’aumentare della complessità di $\{f(x, \alpha)\}$ cioè della capacità del modello cioè all’aumentare di h) e la *VC confidence* (che diminuisce al diminuire di h). Vapnik in [45] ha proposto una procedura per affrontare il problema appena delineato detta **Structural Risk Minimization (SRM)** che consiste nel:

1. Dividere la famiglia di funzioni $\{f(x, \alpha)\}$ in sottoinsiemi autoincludenti come in figura 5.3 in modo che i sottoinsiemi abbiano una *VC dimension* (che è un valore intero) crescente. Ciò significa escludere alcune funzioni da $\{f(x, \alpha)\}$ in modo da trovare la classe di funzioni h_1 con *VC dimension* più piccola e così via per $h_2, h_3 \dots$
2. Per ogni classe di funzioni trovate al punto 1. ($h_1, h_2 \dots$) trovare quella con il rischio empirico minimo: cioè equivale a una selezione dei parametri. Ad esempio per la classe h_1 significa trovare la funzione contenuta in $\{h_1(x, \alpha)\}$ che minimizza il rischio empirico (ciò equivale a trovare i parametri α che fanno ciò).
3. Selezionare il classificatore tra quelli trovati al punto 2. che minimizza $R(\alpha)$

SRM garantisce un compromesso tra la qualità dell’approssimazione dei dati nel *training set* e la complessità della funzione approssimante come illustrato in figura 5.2

⁵Esistono modelli che hanno buoni riscontri pratici nonostante abbiano $h = \infty$

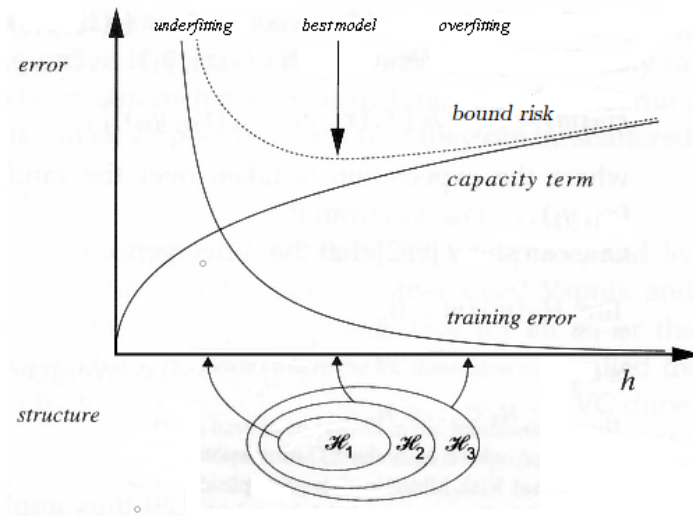


Figura 5.2: Il *risk bound* è la somma del rischio empirico e la *VC confidence*. Il più piccolo *risk bound* è raggiunto su qualche elemento della struttura.

SRM non è quasi mai applicabile perchè è molto complicato riuscire a calcolare la *VC dimension* delle “sottofunzioni” e anche se ciò fosse possibile la difficoltà computazionale per calcolare il rischio empirico, a causa della spesso grande dimensionalità dello spazio degli *iperparametri* del modello, è insostenibile. Si vedrà nelle sottosezioni 5.2.2 e 5.2.3 che il principio di funzionamento delle *SVM* ricalca concettualmente da vicino quello della *SRM*.

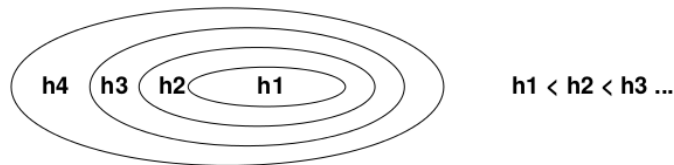


Figura 5.3: Famiglia di funzioni del modello suddivise in base alla *VC dimension*

5.2 SVM

Le Support Vector Machines (*SVM*) sono un metodo d’apprendimento supervisionato, introdotte per la prima volta da Vapnik e Chervonenkis nel 1963. Nel corso degli anni sono state introdotte varie versioni di *SVM* tra cui ne sono rimarcabili quattro:

1. Quella originale: Il *Maximal Margin Classifier*.

2. La versione con il *kernel*.
3. La versione detta *soft-margin*.
4. La versione *soft-margin* con *kernel* che combina i tre punti precedenti.

La letteratura sull'argomento è sterminata e [34] [6] [31] sono solo alcuni dei riferimenti esistenti. Da essi si è tratto gran parte del materiale presentato in questa sezione. Le *SVM* consentono di affrontare essenzialmente tre tipi di problemi:

- Classificazione binaria
- Classificazione con più classi
- Regressione lineare

La classificazione binaria è naturale con *SVM* ed è adatta a quei problemi in cui i dati possono appartenere a due classi distinte (etichettate di solito con 1 o -1).

Nella classificazione con più classi i dati possono appartenere a più classi. Nella regressione lineare lo scopo è determinare una funzione lineare che meglio approssimi un insieme di dati.

Il problema affrontato in questa tesi attiene ai problemi di classificazione binaria.

5.2.1 Classificazione binaria

Un problema di classificazione per molti versi è simile a un problema di inferenza induttiva (capitolo 1). Da una serie di osservazioni cioè di elementi del *training set* X si deve estrarre il migliore classificatore dallo spazio delle ipotesi $f(x, \alpha)$ secondo qualche criterio di preferenza. Gli elementi del training set in un problema di classificazione binaria supervisionato sono del tipo (x_i, y_i) con $i = 1, \dots, l$ cioè $|X| = l$, $x_i \in \mathbb{R}^n$ cioè ogni singolo elemento del *training set* ha dimensionalità n , e $y_i \in Y = \{-1, 1\}$ (o \mathbb{B} in alcuni casi). La dicotomia delle etichette dell'insieme Y rende la classificazione di tipo *binaria*. Nel caso delle *SVM* le funzioni sono del tipo:

$$f : X \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$$

Da un punto di vista geometrico la classificazione binaria nelle *SVM* consiste nel trovare l'iperpiano ottimo, secondo qualche criterio, nello spazio \mathbb{R}^n che separi i dati del *training set* etichettati positivamente da quelli etichettati negativamente. Se almeno un iperpiano siffatto esiste i dati del *training set* sono detti essere **linearmente separabili**. Un esempio in figura 5.5

Da un punto di vista analitico è necessario una funzione lineare che classifichi correttamente il *training set*. Una funzione lineare, cioè un iperpiano, è nella forma:

$$f(x) = w \bullet x + b = \left(\sum_{i=1}^n w_i x_i \right) + b$$

Quindi la dipendenza dai parametri α si riconduce alla dipendenza da w — che è un vettore nello spazio \mathbb{R}^n che rappresenta la normale all'iperpiano — e b uno scalare che consente all'iperpiano di muoversi parallelamente a se stesso.

Una volta scelto il classificatore dallo spazio delle ipotesi, l'ingresso $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ del *test set* (cioè di un insieme di elementi non sottoposti in fase di addestramento al modello) sarà classificato in base all'esito della funzione $\text{sign}(f(x))$ cioè associato alla classe positiva se $f(x) \geq 0$, altrimenti sarà associato alla classe negativa.

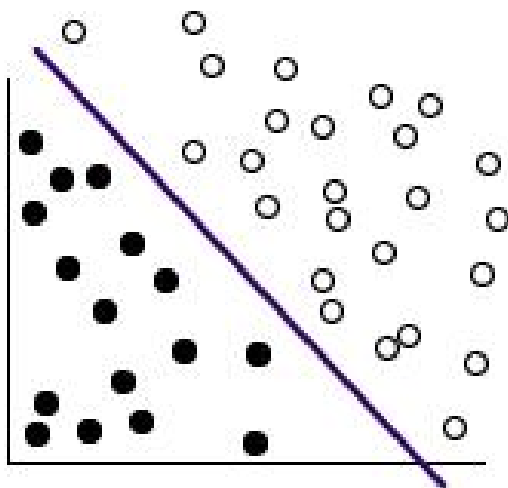


Figura 5.4: Dati in \mathbb{R}^2 linearmente separabili

5.2.2 Classificatore a margine massimo

Il *Maximal Margin Classifier* rappresenta la versione iniziale di *SVM* e spesso in letteratura questa tecnica è nota anche come **hard margin**. Si applica quando i dati sono **linearmente separabili**. Come accennato nella sottosezione 5.2.1 è necessario trovare il “migliore” iperpiano che separa linearmente i dati nel *training set*. Ai nostri scopi per lineare separabilità si intende che si può trovare una coppia (w, b) tale che i seguenti vincoli sono rispettati:

$$\begin{aligned} w \bullet x_i + b &\geq 1 && \text{per } y_i = +1 \quad \forall i \\ w \bullet x_i + b &\leq -1 && \text{per } y_i = -1 \quad \forall i \end{aligned}$$

I due vincoli possono essere convenientemente combinati insieme in modo da ottenere un unico vincolo più compatto:

$$y_i(w \bullet x_i + b) - 1 \geq 0 \quad \forall i \quad (5.5)$$

Il vincolo (5.5) deriva dalla constatazione che la **decision function** $\text{sign}(w \bullet x + b)$, cioè l'iperpiano separatore, rispettante il vincolo (5.5), che viene selezionato come

migliore, è tale che se w e b sono scalati⁶ per la stessa quantità scalare $\alpha \in \mathbb{R}^+$ il vincolo (5.5) è ancora rispettato. Dunque per eliminare questa ridondanza, e per rendere ogni *decision function* corrispondente ad un'unica coppia (w, b) , viene imposto il seguente vincolo:

$$\min_{i=1, \dots, l} |w \bullet x_i + b| = 1 \quad (5.6)$$

che è un modo equivalente di scrivere il vincolo (5.5). Nel gergo tecnico delle *SVM* si suole dire che si è scelto un parametro α tale che il *margin funzionale dell'iperpiano*⁷ è pari a 1 cioè la valutazione della **decision function** nei punti del *training set* più vicini all'iperpiano separatore è tale che⁸

$$w \bullet x_i + b = 1 \quad \text{per } y_i = +1 \quad (5.7)$$

$$w \bullet x_i + b = -1 \quad \text{per } y_i = -1 \quad (5.8)$$

L'insieme di iperpiani che soddisfano (5.5) sono detti **Iperpiani Canonici**⁹. Per un'iperpiano canonico in cui il margine geometrico e il *margin funzionale dell'iperpiano* coincidono si può dare una definizione intuitiva di **margin**.

Definizione 5.1. Si indichi con d_+ la più breve distanza dell'iperpiano separatore dal più vicino esempio positivo del *training set* e con d_- la più breve distanza dall'esempio negativo più vicino del *training set*. Allora:

$$\text{margin} = d_+ + d_-$$

Si può dimostrare che la distanza di un generico punto x da un iperpiano $w \bullet x + b$ è pari a:

$$d = \frac{|w \bullet x + b|}{\|w\|}$$

In accordo alla normalizzazione definita in 5.6 la distanza tra l'iperpiano canonico e il più vicino degli elementi del *training set* è $\frac{1}{\|w\|}$. Quindi il margine di un iperpiano separatore canonico secondo la definizione 5.1 è allora $\frac{2}{\|w\|}$. L'immagine 5.5 può essere chiarificatrice.

Lo scopo di una *SVM* è:

1. classificare correttamente il *training set*
2. e selezionare tra quelli che rispettano il punto 1 quello che generalizza meglio.

Detto succintamente il goal di una *SVM* è trovare l'iperpiano canonico ottimo che separa il *training set*, dove per ottimo si intende quello che massimizza il margine.

⁶Per scalati si intende moltiplicati

⁷Informalmente il *margin funzionale dell'iperpiano* è la distanza minima tra tutti i punti del *training set* e l'iperpiano separatore

⁸Si può dimostrare che l'esistenza di tali punti è assicurata

⁹In molte trattazioni si definisce il margine geometrico come il margine funzionale rispetto all'iperpiano normalizzato rispetto a $\|w\|$ e poi si dimostra che margine funzionale e margine geometrico coincidono imponendo il vincolo (5.5)

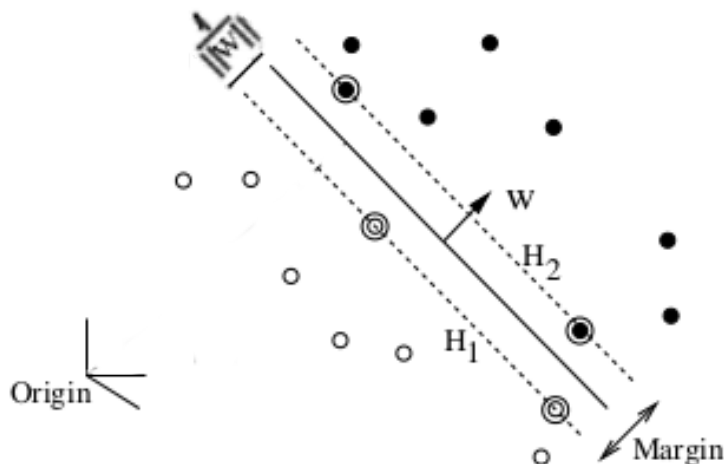


Figura 5.5: Iperpiano separatore per dati linearmente separabili. H_1 e H_2 sono paralleli dato che hanno la stessa normale w come si apprezza nelle equazioni 5.7 e 5.8

Legame con SRM

In questa sottosezione si vedrà come la tecnica **hard margin** di *SVM* è in stretta relazione con *SRM* introdotto nella sottosezione 5.1.3. Si ha infatti che essendo i dati linearmente separabili la rispondenza con il training set è totale quindi $R_{emp} = 0$. Quindi il rischio atteso dipende unicamente dalla *VC confidence* che a sua volta dipende dalla *VC dimension* h . Quindi il classificatore migliore nel caso di *SVM* sarà quello con *VC dimension* h minima. La *SRM* in questo caso diventa una ricerca del classificatore con *VC dimension* minima. Si consideri inoltre il seguente teorema:

Teorema 5.1. *Sia X un insieme di punti x di uno spazio n -dimensionale che contiene tutti gli esempi di apprendimento. Sia R il diametro della più piccola “palla” (da pensare n -dimensionale) centrata nell’origine che contiene tutti i punti di X . Allora la *VC dimension* h , dell’insieme di iperpiani $w \bullet x + b = 0$ aventi margine γ è limitata superiormente da:*

$$h \leq \min\left(\left\lceil \frac{R^2}{\gamma^2} \right\rceil, n\right) + 1$$

Siccome il margine è $\gamma = 2/\|w\|$ la *VC dimension* h più piccola (che abbiamo detto minimizza la *VC confidence* e avendo il R_{emp} nullo minimizza anche il rischio atteso) si ottiene per la $\|w\|$ minima cioè per il margine (pari a $2/\|w\|$) massimo. Da quanto detto segue che le *SVM* ricercano l’iperpiano col margine massimo per ottenere il classificatore migliore che da ciò più garanzie di generalizzazione secondo il risultato dell’equazione (5.4) e della *SRM*. Il discorso è analogo, ma leggermente differente, nel caso in cui i dati non sono linearmente separabili come nel **soft-margin** (sottosezione 5.2.3): in questo caso l’errore empirico non è nullo e le *SVM* nell’ottica di minimizzare

il *risk bound* cercano per il migliore compromesso tra gli errori nel *training set* e la massimizzazione del margine $R(\alpha)$.

Formulazione matematica

Dalla sottosezione 5.2.2 si evince che *SVM* deve risolvere un problema di programmazione lineare infatti il goal è massimizzare il margine soggetto a dei vincoli lineari cioè un problema di massimizzazione con vincoli. Ricapitolando dato il *training set* X è necessario trovare tra tutti gli iperpiani che separano i dati (i quali si assume siano linearmente separabili) quello che massimizza il margine, che è pari a $\frac{2}{\|w\|}$. Matematicamente si ha:

$$\begin{aligned} &\text{massimizzare} && \frac{2}{\|w\|} \\ &\text{soggetto a} && y_i(w \bullet x_i + b) - 1 \geq 0 \quad \forall i \end{aligned}$$

Osservando che $\|w\|^2 = w \bullet w$ si può dare una formulazione alternativa ma equivalente che cambia leggermente la natura del problema rendendolo quadratico ma è più conveniente come si vedrà più avanti:

$$\begin{aligned} &\text{minimizzare} && \frac{1}{2}(w \bullet w) \end{aligned} \tag{5.9}$$

$$\text{soggetto a} \quad y_i(w \bullet x_i + b) - 1 \geq 0 \quad \forall i \tag{5.10}$$

Per risolvere un problema di **minimizzazione vincolato** si usano i **moltiplicatori di Lagrange**. Ad esempio si ha da $\underset{x,y}{\text{minimizzare}} f(x,y)$ col vincolo $g(x,y) = 0$. Si ha inoltre che $g(x,y) = y + x - 1$ allora si ha che $y = 1 - x$ costituisce il cosiddetto **feasible set** cioè il luogo dei punti dove la soluzione può venire a trovarsi. Lagrange ha dimostrato che la soluzione si ha laddove il gradiente¹⁰ di $f(x,y)$ e quello di $g(x,y)$ puntano nella stessa direzione cioè

$$\nabla f(x,y) = \lambda \nabla g(x,y) \tag{5.11}$$

La quantità scalare λ si chiama **moltiplicatore di Lagrange** e si rende necessaria per il fatto che $\nabla f(x,y)$ e $\nabla g(x,y)$ devono avere la stessa direzione ma non necessariamente lo stesso modulo, λ è quindi un fattore moltiplicativo che ne tiene conto in modo da eguagliare anche i moduli. Il metodo dei moltiplicatori di Lagrange è valido solo per vincoli di uguaglianza ($g(x,y) = 0$) e in questo caso nelle condizioni per la risoluzione non ci sarà alcun vincolo su λ . Si definisce la funzione di Lagrange:

$$L(x,y,\lambda) = f(x,y) - \lambda g(x,y)$$

allora

$$\nabla L(x,y,\lambda) = \nabla f(x,y) - \lambda \nabla g(x,y)$$

¹⁰Il gradiente è una quantità vettoriale, cioè un vettore espresso tramite le sue componenti. Per i nostri scopi le singole componenti sono formate facendo le derivate parziali della funzione rispetto a ogni singola variabile

e dall'equazione (5.11) si deduce che $\nabla L(x, y, \lambda) = 0$ cioè:

$$\begin{cases} \frac{\partial L}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial L}{\partial y} = 0 \\ \frac{\partial L}{\partial \lambda} = 0 \end{cases}$$

Per trattare casi in cui sono presenti anche dei vincoli di inuguaglianza come nel caso delle *SVM* (vedasi vincoli (5.5)) si utilizzano le **Karush-Kuhn-Tucker (KKT)** condizioni che consistono nell'imporre — oltre alle condizioni del metodo dei moltiplicatori di Lagrange per i vincoli di uguaglianza che permangono — che il moltiplicatore relativo ad ogni vincolo di ineguaglianza venga posto maggiore uguale a 0, e le condizioni di complementarità che consistono nell'imporre che il prodotto tra un moltiplicatore e il corrispondente vincolo sia uguale a zero. Il metodo dei moltiplicatori di Lagrange è un caso speciale (sono presenti solo vincoli di uguaglianza) delle KKT condizioni che invece hanno validità generale. Ad esempio se avessimo due vincoli $g_1(x, y) \geq 0$ e $g_2(x, y) \geq 0$ si avrebbe che $L(x, y, \lambda_1, \lambda_2) = f(x, y) - \lambda_1 g_1(x, y) - \lambda_2 g_2(x, y)$ da cui si calcola il gradiente come fatto nell'esempio precedente ottenendo:

$$\begin{cases} \frac{\partial L}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial L}{\partial y} = 0 \\ \frac{\partial L}{\partial \lambda_1} = 0 \\ \frac{\partial L}{\partial \lambda_2} = 0 \\ \lambda_1 \geq 0 \\ \lambda_2 \geq 0 \end{cases}$$

I vincoli di complementarità $\lambda_1 g_1(x, y) = 0$ e $\lambda_2 g_2(x, y) = 0$ non sono presenti perché già posseduti in questo caso.

Adesso, alla luce di quanto è stato esposto, si risolverà il problema matematico posto da *SVM* e delineato nelle equazioni (5.9) e (5.10). Siccome si hanno l vincoli (tanti quanti gli elementi nel *training set*) si deve introdurre un moltiplicatore α_i con $i = 1, \dots, l$ per ognuno degli l vincoli d'ineguaglianza ottenendo il seguente lagrangiano:

$$L_p = \frac{1}{2} \|w\|^2 - \sum_{i=1}^l \alpha_i y_i (w \bullet x_i + b) + \sum_{i=1}^l \alpha_i \quad (5.12)$$

dove l'ultima sommatoria scaturisce dal -1 dei vincoli in (5.10). Adesso si deve imporre pari a zero ∇L_p , e siccome è un vettore imporre pari a zero le singole derivate parziali, e imporre le KKT condizioni ottenendo:

$$\begin{cases} \frac{\partial L_p}{\partial w} = 0 \\ \frac{\partial L_p}{\partial b} = 0 \\ \frac{\partial L_p}{\partial \alpha_i} = 0 \quad \forall i \\ \alpha_i \geq 0 \quad \forall i \\ \alpha_i [y_i(w \bullet x_i + b) - 1] = 0 \quad \forall i \end{cases}$$

che svolgendo le derivate parziali diventa:

$$\begin{cases} w - \sum_{i=1}^l \alpha_i y_i x_i = 0 \end{cases} \quad (5.13a)$$

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^l \alpha_i y_i = 0 \end{cases} \quad (5.13b)$$

$$\begin{cases} y_i(w \bullet x_i + b) - 1 = 0 \quad \forall i \\ \alpha_i \geq 0 \quad \forall i \\ \alpha_i [y_i(w \bullet x_i + b) - 1] = 0 \quad \forall i \end{cases} \quad (5.13c)$$

Il problema appena impostato è un problema di programmazione quadratica dato che la funzione obiettivo ($\frac{1}{2}\|w\|^2$) è quadratica, ma è anche un **problema convesso di programmazione quadratica** perchè la funzione obiettivo è anche convessa essendo un paraboloide, ed i punti che soddisfano i vincoli cioè il *feasible set* è pure un insieme convesso¹¹. Questo sta a significare che si otterrà lo stesso risultato affrontando il problema **duale** (quello descritto finora è il problema **primario**) : anzichè minimizzare rispetto alle variabili w e b soggetto a vincoli che coinvolgono i moltiplicatori lagrangiani α , si massimizza rispetto alle variabili α (variabili duali) soggetto alle relazioni ottenute prima per w e b cioè le equazioni (5.13a) e (5.13b) oltre che ad $\alpha_i \geq 0$. Alla formulazione duale si possono aggiungere le KKT condizioni della forma primaria che ci forniscono ulteriori informazioni per comprendere la struttura della soluzione. La condizione (5.13c) :

$$\alpha_i [y_i(w \bullet x_i + b) - 1] = 0 \quad \forall i$$

ci dice che solo i punti del *training set* x_i per i quali $y_i(w \bullet x_i + b) = 1$, cioè i punti più vicini all'iperpiano separatore (quelli doppiamente cerchiati in figura 5.5 sugli iperpiani H_1 e H_2), hanno valori α_i non nulli. Pertanto solo tali punti contribuiranno al calcolo dei pesi w e per tale motivo sono chiamati **vettori di supporto**.

¹¹Qualsiasi vincolo lineare definisce un insieme convesso, e un insieme di N vincoli lineari simultanei definisce l'intersezione di N insiemi convessi, che è ancora un insieme convesso.

La formulazione duale del problema è detta **Wolf duale**, vediamo come si ottiene. Si sostituiscono i vincoli di eguaglianza (5.13a) e (5.13b) riguardanti b e w ($\frac{\partial L_p}{\partial w} = 0$ e $\frac{\partial L_p}{\partial b} = 0$) nella formulazione primaria cioè nell'equazione (5.12). Si ha:

$$\begin{aligned}
 L_p &= \frac{1}{2} \|w\|^2 - \sum_{i=1}^l \alpha_i y_i (w \bullet x_i + b) + \sum_{i=1}^l \alpha_i = \frac{1}{2} (w \bullet w) - \sum_{i=1}^l \alpha_i y_i (w \bullet x_i) - \\
 &- \sum_{i=1}^l \alpha_i y_i b + \sum_{i=1}^l \alpha_i \quad \text{Si sostituisce l'equazione (5.13a)} = \frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^l \alpha_i y_i x_i \bullet \sum_{i=1}^l \alpha_i y_i x_i \right) - \\
 &- \left(\sum_{i=1}^l \alpha_i y_i \left(x_i \bullet \sum_{j=1}^l \alpha_j y_j x_j \right) \right) - b \sum_{i=1}^l \alpha_i y_i + \sum_{i=1}^l \alpha_i \quad b \text{ scompare per l'equazione (5.13b)} = \frac{1}{2} \\
 &\sum_{i,j=1}^l \alpha_i \alpha_j y_i y_j (x_i \bullet x_j) - \sum_{i,j=1}^l \alpha_i \alpha_j y_i y_j (x_i \bullet x_j) + \sum_{i=1}^l \alpha_i = \\
 &= -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^l \alpha_i \alpha_j y_i y_j (x_i \bullet x_j) + \sum_{i=1}^l \alpha_i
 \end{aligned} \tag{5.14}$$

quindi si è trovato che la formulazione duale da massimizzare è:

$$L_d = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^l \alpha_i \alpha_j y_i y_j (x_i \bullet x_j) + \sum_{i=1}^l \alpha_i \tag{5.15}$$

soggetta ai vincoli :

$$\sum_{i=1}^l \alpha_i y_i = 0 \quad \forall i \tag{5.16}$$

$$\alpha_i \geq 0 \quad \forall i \tag{5.17}$$

Si procede come per la forma primale, cioè imponendo che il lagrangiano della forma duale L_d sia pari a zero. Si risolve il sistema, in cui la dipendenza da w e b è sparita (visionare equazione (5.15)), e si trovano gli α_i .

L'obiettivo finale è trovare l'iperpiano $f(x) = w \bullet x + b$ con i w e b cioè la coppia (w, b) , che massimizzano il margine. Mediante la formulazione duale si trovano gli α_i che garantiscono i "migliori" (w, b) e vengono sostituiti nell'equazione (5.13a) per calcolare il vettore w ricordando che soltanto i *vettori di supporto*, che hanno $\alpha_i \neq 0$,

contribuiscono al calcolo di w . Quindi si ha:

$$\begin{aligned}
 f(x) &= w \bullet x + b = \left(\sum_{i=1}^l \alpha_i y_i x_i \right) \bullet x + b = \\
 &= \left(\sum_{i=1}^l \alpha_i y_i (x_i \bullet x) \right) + b = \\
 &= \left(\sum_{i \in sv} \alpha_i y_i (x_i \bullet x) \right) + b
 \end{aligned} \tag{5.18}$$

Per calcolare b si sostituisce in 5.18 un elemento x del *training set* — ed anche la corrispondente etichetta y — che rappresenta un vettore di supporto, ed i valori ottenuti vengono poi mediati quindi:

$$b = \frac{1}{|sv|} \sum_{i \in sv} \left(y_i - \left(\sum_{j \in sv} \alpha_j y_j (x_i \bullet x_j) \right) \right) \tag{5.19}$$

Fase di Test

Una volta trovati w e b , e quindi una volta che la *SVM* è stata *trained* come si usa il classificatore trovato? Immaginiamo di avere un campione n -dimensionale del *test set* m allora si usa l'iperpiano $w \bullet x + b$ per classificare il campione *unseen* m in base all'esito di $\text{sign}(w \bullet m + b)$ (l'etichetta di m è 1 oppure -1 in base a $\text{sign}(w \bullet m + b)$)

5.2.3 Soft Margin

L'esposizione della sottosezione 5.2.2 è valida per un *training set* linearmente separabile. Nella maggiore parte dei casi reali i dati tipicamente non sono linearmente separabili cioè non ci sarà una “*feasible region*” perchè non esisterà nessun valore (w, b) , cioè nessun iperpiano, per cui i vincoli 5.7 e 5.8 siano rispettati. L'idea, in [10], è di rilassare tali vincoli mediante l'introduzione delle **variabili slack** così definite:

Definizione. Detta f la funzione caratteristica un classificatore, che ha come dominio il training set X , e un campione $\in X(x_i, y_i)$, si definisce variabile slack del campione, rispetto alla funzione f e al margine γ , la quantità :

$$\xi((x_i, y_i), f, \gamma) = \xi_i = \max(0, \gamma - y_i f(x_i))$$

e il vettore *slack* di X come:

$$\xi = \langle \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_l \rangle$$

Si noti che $\xi_i > \gamma$ indica un'errata classificazione del campione x_i . Quindi i vincoli 5.7 e 5.8 sul *training set* vengono riformulati definendo:

$$w \bullet x_i + b \geq 1 - \xi_i \quad \text{per } y_i = +1 \quad (5.20)$$

$$w \bullet x_i + b \leq -1 + \xi_i \quad \text{per } y_i = -1 \quad (5.21)$$

$$\xi_i \geq 0 \quad \forall i \quad (5.22)$$

Un errore in (5.20) e (5.21) occorre quando il corrispondente ξ_i eccede l'unità, ne consegue che $\sum_{i=1}^l \xi_i$ è un limite superiore al numero di errori sul *training set*. Allora la funzione obiettivo da minimizzare diventa:

$$\frac{1}{2} \|w\|^2 + Cf \left(\sum_{i=1}^l \xi_i^k \right) \quad (5.23)$$

soggetta ai vincoli (5.20) (5.21) e (5.22). Il problema appena formulato è convesso per qualunque k ma si sceglie sempre $k = 1$ perchè assicura l'unicità della soluzione (con $k = 1$ ne le ξ_i ne i moltiplicatori di Lagrange del problema primale appaiono nel Wolf duale problema come sarà accennato). La soluzione di questo problema di ottimizzazione è chiamato iperpiano **soft margin**. Inoltre la scelta maggiormente adottata è di approssimare¹² $f \left(\sum_{i=1}^l \xi_i \right)$ con $\left(\sum_{i=1}^l \xi_i \right) = \|\xi\|_1$ per questo talvolta si parla d'iperpiano soft margin norma-1.¹³ Il problema originale delineato in (5.23) minimizza il numero di errori di classificazione sull'insieme di addestramento, e quindi minimizza il rischio empirico, ma è un problema NP-completo. Invece con l'approssimazione fatta si minimizza la norma di ξ che non equivale più a minimizzare il numero di errori sui campioni del *training set* ma consiste nel minimizzare gli scostamenti dei punti misclassificati dal nostro iperpiano mentre determina l'iperpiano con margine massimo per i restanti punti di X . E questo non è più un problema NP-completo. Ricapitolando la formulazione del problema di minimizzazione soft margin¹⁴ è :

$$\text{minimizzare} \quad \frac{1}{2} (w \bullet w) + C \sum_{i=1}^l \xi_i \quad (5.24)$$

$$\text{soggetto a} \quad y_i (w \bullet x_i + b) \geq 1 - \xi_i \quad (5.25)$$

$$\xi_i \geq 0 \quad (5.26)$$

La scelta di definire la funzione obiettivo (5.24) tramite la norma risulta ottima dal punto di vista dell'errore di generalizzazione perchè si può dimostrare che quest ultimo è limitato superiormente da una quantità direttamente proporzionale alla norma dello *slack vector* ξ , per cui minimizzare la norma consente di minimizzare anche l'errore di generalizzazione.

¹²Si definisce la norma-1 di un vettore x a l componenti come $\|x\|_1 = \sum_{i=1}^l |x_i|$

¹³Esiste anche la formulazione norma-2 ma non ci interessa approfondirla

¹⁴Si intende da ora in avanti sempre norma-1

Formulazione matematica

Si procede alla stessa maniera di hard margin ,cioè per dati linearmente separabili, su dati non linearmente separabili con la differenza che la funzione obiettivo e anche i vincoli sono cambiati (equazioni (5.24) (5.25) (5.26)) per tollerare degli errori di classificazione del *training set* e al contempo cercare di massimizzare il margine. Il problema primale diventa:

$$L_p = \frac{1}{2} \|w\|^2 + C \sum_{i=1}^l \xi_i - \sum_{i=1}^l \alpha_i \{y_i(x_i \bullet w + b) - 1 + \xi_i\} - \sum_{i=1}^l \mu_i \xi_i \quad (5.27)$$

Imponendo $\nabla L_p = 0$ e le KKT condizioni si ha:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial L_p}{\partial w} = w - \sum_{i=1}^l \alpha_i y_i x_i = 0 \\ \frac{\partial L_p}{\partial b} = \sum_{i=1}^l \alpha_i y_i = 0 \\ \frac{\partial L_p}{\partial \alpha_i} = y_i(w \bullet x_i + b) - 1 + \xi_i = 0 \quad \forall i \\ \frac{\partial L_p}{\partial \xi_i} = C - \alpha_i - \mu_i = 0 \quad \forall i \\ \xi_i \geq 0 \quad \forall i \\ \alpha_i \geq 0 \quad \forall i \\ \mu_i \geq 0 \quad \forall i \\ \mu_i \xi_i = 0 \quad \forall i \\ \alpha_i \{y_i(w \bullet x_i + b) - 1 + \xi_i\} = 0 \quad \forall i \end{array} \right. \quad (5.28a)$$

Con dei calcoli analoghi a quanto fatto per il caso linearmente separabile si perviene alla forma duale che consiste nel:

$$\text{massimizzare} \quad L_d = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^l \alpha_i \alpha_j y_i y_j (x_i \bullet x_j) + \sum_{i=1}^l \alpha_i \quad (5.29)$$

$$\text{soggetto a} \quad 0 \leq \alpha_i \leq C \quad (5.30)$$

$$\sum_{i=1}^l \alpha_i y_i = 0 \quad (5.31)$$

Come per hard margin imponendo $\nabla L_d = 0$ e risolvendo si trovano gli α_i che sono usati in 5.28a per calcolare il vettore dei pesi w , cui come prima contribuiranno solo i vettori di supporto in quanto unico con $\alpha_i \neq 0$:

$$w = \sum_{i \in sv} \alpha_i y_i x_i \quad (5.32)$$

Il valore di b può essere ricavato come in (5.19). Si osservi come la formulazione duale soft margin sia uguale, fatta eccezione per il vincolo sugli α_i , alla formulazione duale del problema del margine massimo.

Parametro C e legami con SRM

Nella funzione obiettivo della formulazione soft margin (5.24) compare il parametro C , talvolta detto parametro **trade-off**, che è essenzialmente un parametro di **regolarizzazione** che regola il compromesso tra raggiungere un basso errore sul *training set* e minimizzare $\|w\|$ (cioè massimizzare il margine, che è $2/\|w\|$ ed avere presumibilmente un minore errore di generalizzazione). Infatti nella forma duale l'unica dipendenza da C è negli α_i nell'equazione (5.40) ed avere un valore di C piccolo limita il valore degli α_i e a sua volta del vettore w che come si vede dall'equazione (5.32) aumenta all'aumentare degli α_i . Quindi quando C è più piccolo w è pure più piccolo, e quindi il margine è più grande e di conseguenza per il teorema 5.1 si avranno migliori performances di generalizzazione tuttavia un C piccolo comporta una minore *accuracy* sul *training set*. Viceversa, per gli stessi motivi, un valore di C più grande classifica meglio il *training set* ma avrà presumibilmente un maggiore errore di generalizzazione. Quindi la regolazione del parametro C è uno step vitale perchè *SRM* è parzialmente implementato tramite la regolazione di questo parametro dato che l'incremento di C incrementa la complessità della classe delle ipotesi, perchè in ultima analisi aumentare C comporta l'aumento della *VC dimension* h . Molto spesso per trovare il migliore valore per C si usa la validazione incrociata su vari valori del parametro. Quindi l'implementazione di *SRM* nel soft margin è approssimata tramite la regolazione del parametro C .

5.2.4 Kernels

L'approccio soft margin per addestrare dati non linearmente separabili non garantisce usualmente ottime prestazioni. Un'alternativa molto potente è quella introdotta in [5]. L'idea per gestire dati non linearmente separabili è quella di mappare questi dati in uno spazio di maggiore dimensionalità \mathcal{H} detto **spazio delle features** o **spazio delle caratteristiche** in cui i dati diventano linearmente separabili in questo spazio e poi applicare la tecnica hard margin. Questo mapping può essere fatto tramite una funzione ϕ siffatta:

$$\phi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathcal{H}$$

L'immagine 5.6 illustra quanto appena detto.

Inoltre $(x_i \bullet x_j)$ nella formulazione duale in (5.15) diventa $(\phi(x_i) \bullet \phi(x_j))$. Tuttavia utilizzando il **kernel trick** è possibile pensare di usare una **kernel function** k tale che

$$k(x_i, x_j) = \phi(x_i) \bullet \phi(x_j) \quad (5.33)$$

che consente di usare il *kernel* K nelle *SVM* senza esplicitamente conoscere ϕ . Una puntualizzazione su ϕ è doverosa. Se \mathcal{H} è di dimensione M ϕ può essere una funzione

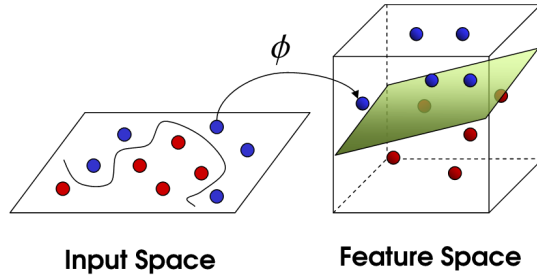


Figura 5.6: Dati in \mathbb{R}^2 resi linearmente separabili, dalla funzione ϕ , nello spazio di Hilbert di dimensione tre

che per calcolare ciascuna delle M coordinate del generico campione $x \in \mathbb{R}^d$ nello spazio H utilizza M differenti funzioni cioè:

$$\phi(x) = [\phi_1(x), \dots, \phi_M(x)]$$

e allora il kernel diventa:

$$k(x_i, x_j) = \phi(x_i) \bullet \phi(x_j) = \sum_{d=1}^M \phi_d(x_i) \phi_d(x_j) \quad (5.34)$$

Un esempio è il kernel gaussiano nella tabella 5.1 in cui si dimostra che \mathcal{H} è di dimensione infinita così sarebbe complicato lavorare con ϕ esplicitamente. Usando il *kernel trick* si aggira il problema, infatti non vanno più svolti nè il prodotto scalare nè le due valutazioni della funzione $\phi()$ per ogni coppia (x_i, x_j) ma solo la più semplice ed efficiente valutazione del kernel, il quale se rispetta delle determinate condizioni assicura che implicitamente si sta svolgendo un prodotto scalare (ma senza svolgerne il calcolo esplicito che con alte o infinite dimensionalità di \mathcal{H} , come per il kernel gaussiano in tabella 5.1, è impossibile). Un altro esempio chiarificatore in cui i campioni x del *training set* appartengono allo spazio \mathbb{R}^2 è il seguente. Dato il *kernel*:

$$k(x_i, x_j) = (x_i \bullet x_j)^2$$

è facile trovare una funzione $\phi : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathcal{H}$ tale che si ha:

$$K(x, y) = (x \bullet y)^2 = \phi(x) \bullet \phi(y) \quad \text{con } x, y \in \mathbb{R}^2$$

Infatti se $x = \langle x_1, x_2 \rangle$ e $y = \langle y_1, y_2 \rangle$ si ha che

$$(x \bullet y)^2 = (x_1 y_1 + x_2 y_2)^2 = x_1^2 y_1^2 + x_2^2 y_2^2 + 2x_1 y_1 x_2 y_2 \quad (5.35)$$

e scegliendo $\mathcal{H} = \mathbb{R}^3$ si può avere

$$\phi(x) = \begin{pmatrix} x_1^2 \\ \sqrt{2} x_1 x_2 \\ x_2^2 \end{pmatrix}$$

quindi:

$$\phi(x) \bullet \phi(y) = \begin{pmatrix} x_1^2 \\ \sqrt{2} x_1 x_2 \\ x_2^2 \end{pmatrix} \bullet \begin{pmatrix} y_1^2 \\ \sqrt{2} y_1 y_2 \\ y_2^2 \end{pmatrix} = x_1^2 y_1^2 + x_2^2 y_2^2 + 2x_1 y_1 x_2 y_2$$

che coincide con quanto ottenuto in (5.35). Inoltre fissato un *kernel* non sono univoci nè i mapping ϕ nè la dimensionalità dello spazio \mathcal{H} . Per esempio per il *kernel* precedente si sarebbe potuto scegliere $\mathcal{H} = \mathbb{R}^3$ e

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} (x_1^2 - x_2^2) \\ 2x_1 x_2 \\ (x_1^2 + x_2^2) \end{pmatrix}$$

oppure $\mathcal{H} = \mathbb{R}^4$ e

$$\phi(x) = \begin{pmatrix} x_1^2 \\ x_1 x_2 \\ x_1 x_2 \\ x_2^2 \end{pmatrix}$$

Per quanto riguarda \mathcal{H} questo è uno spazio di Hilbert che generalizza lo spazio euclideo classico, e ha intrinsecamente un *inner product* definito. Comunque non ci si soffermerà su di esso piuttosto è importante comprendere in quali circostanze dato un *kernel* esiste una coppia (\mathcal{H}, ϕ) con la proprietà (5.33).

Teorema 5.2 (Teorema di Mercer). *Dato un kernel continuo e simmetrico¹⁵ nell'intervallo chiuso $\vec{a} \leq \vec{x} \leq \vec{b}$ e $\vec{a} \leq \vec{y} \leq \vec{b}$. Allora $k(x,y)$ può essere espanso come*

$$k(\vec{x}, \vec{y}) = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i \phi_i(\vec{x}) \phi_i(\vec{y}) \quad (5.36)$$

con $\lambda_i > 0$. Condizione necessaria e sufficiente affinché tale espansione sia valida e la sua convergenza assoluta e uniforme è:

$$\int_{\vec{b}}^{\vec{a}} \int_{\vec{b}}^{\vec{a}} g(\vec{x}) k(\vec{x}, \vec{y}) g(\vec{y}) d\vec{x} d\vec{y} \geq 0$$

$$\text{per } \forall g(\cdot) : \int_{\vec{b}}^{\vec{a}} g^2(\vec{x}) d\vec{x} < \infty$$

Quindi una funzione *kernel* che soddisfa le condizioni del teorema di Mercer rappresenta un prodotto scalare in uno spazio delle features (\mathcal{H}) generato da una qualche trasformazione non lineare. Si noti che tale spazio delle features \mathcal{H} può essere infinito e il fatto che $\forall i \lambda_i > 0$ implica che il kernel K è semidefinito positivo. Si ha che un kernel simmetrico K semidefinito positivo soddisfa le condizioni del Teorema di Mercer quindi condizione necessaria e sufficiente affinché un Kernel rappresenti

Tipo di Kernel	$k(x, y)$
Polinomiale	$(x \bullet y + 1)^p$
Gaussiano	$e^{-\frac{\ x-y\ ^2}{2\sigma^2}}$
Iperbolico	$\tanh(kx \bullet y - \delta)$

Tabella 5.1: Tipi di kernels più conosciuti

un prodotto scalare in qualche spazio di Hilbert \mathcal{H} è che il kernel sia simmetrico semidefinito positivo.¹⁵

Nella tabella 5.1 si annoverano i kernel predefiniti più noti e maggiormente adottati. Un kernel di per sè non ci dice niente su ϕ e la dimensione di \mathcal{H} (spazio delle caratteristiche). Tuttavia è stato dimostrato che il *kernel* polinomiale ha per \mathcal{H} una dimensione di $\binom{n+p-1}{p}$ dove si ricorda che n è la dimensionalità di ogni campione del *training set*. Invece il *kernel* gaussiano ha una dimensionalità di \mathcal{H} infinita. Il suo funzionamento è molto simile alle classiche *Radial Basis Function* infatti il numero di centri ($|sv|$), i centri stessi (cioè i vettori di supporto) ed i pesi (gli α_i) sono prodotti automaticamente da *SVM*. La quantità $\|x - y\|$ rappresenta la distanza euclidea quadrata e quindi una misura di similarità e il parametro $\gamma = 1/2\sigma^2$ decide il peso di y (se questo è un vettore di supporto) nell'influenzare la classificazione di x . Un γ piccolo significa un gaussiano con una grande varianza e quindi y (si sottintende che y è un vettore di supporto) avrà un'influenza rilevante su x anche se la distanza tra x e y è grande, al contrario se γ è grande la varianza del gaussiano è piccola e y non avrà una influenza molto significativa su x (specie se molto distanti). Le prestazioni del *gaussiano* danno risultati eccellenti paragonate alle classiche RBF. Il *kernel* iperbolico è detto anche neurale perchè ricalca da vicino una rete neurale ed in particolare un'unità sigmoideale a due strati. Il primo strato consiste in $|sv|$ insiemi di pesi, ed ogni insieme consta n_l (la dimensionalità dei campioni) pesi, e il secondo strato consiste di $|sv|$ pesi (gli α_i) cosicché una valutazione richiede di prendere una somma pesata dei sigmoidi, essi stessi valutati sul prodotto scalare dei dati nel *test set* con i vettori di supporto. Il *kernel* iperbolico-neurale è poco utilizzato perchè solo per alcuni specifici valori di k, δ e dei dati x le condizioni del teorema di Mercer sono soddisfatte ed è stato dimostrato che molte combinazioni dei parametri ci si riconduce al *kernel* gaussiano.

La ragione per mappare i campioni dallo spazio originario in uno spazio a dimensione molto superiore (*feature space* che come visto per il *kernel* gaussiano può essere

¹⁵Simmetrico significa che $k(x,y) = k(y,x)$.

¹⁶Ad essere simmetrica semidefinita positiva è la matrice associata al kernel. I valori della matrice sono calcolati sulle possibili coppie dei vettori del *training set* cioè su $K(x_i, x_j)$ con $i, j = 1, \dots, l$ e quindi possono essere raccolti in una matrice $K \in \mathbb{R}^l \times \mathbb{R}^l$ denominata matrice del kernel. E' questa matrice che deve essere simmetrica semidefinita positiva affinché siano rispettate le condizioni del teorema di Mercer

anche infinita) è il **teorema di Cover sulla separabilità** [12]:

Teorema 5.3. *Un problema di classificazione complesso, formulato attraverso una classificazione non lineare dei dati ad alta dimensionalità, ha maggiore probabilità di essere linearmente separabile che in uno spazio a bassa dimensionalità.*

Formulazione matematica

Come indicato dal teorema 5.3 nello spazio \mathcal{H} si avrà presumibilmente una lineare separazione dei dati e questo consente di utilizzare la formulazione hard margin in (5.15) che resta pressochè invariata. L'unica sostituzione da fare è nell'utilizzo del mapping nel prodotto scalare. Quindi la nuova formulazione con kernel diventa:

$$L_d = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^l \alpha_i \alpha_j y_i y_j (\phi(x_i) \bullet \phi(x_j)) + \sum_{i=1}^l \alpha_i = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^l \alpha_i \alpha_j y_i y_j k(x_i, x_j) + \sum_{i=1}^l \alpha_i \quad (5.37)$$

soggetta ai vincoli :

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^l \alpha_i y_i &= 0 \quad \forall i \\ \alpha_i &\geq 0 \quad \forall i \end{aligned}$$

Anche in fase di test non ci sono problemi dato che la classificazione del campione di test x scaturisce dalla valutazione di $\text{sign}(w \bullet \phi(x) + b)$ ma $w = \sum_{i=1}^{|sv|} y_i \alpha_i \phi(x_i)$ dove gli x_i sono i vettori di supporto. Quindi sostituendo si ha:

$$\text{sign}\left(\sum_{i=1}^{|sv|} \alpha_i y_i \phi(x_i) \bullet \phi(x) + b\right) = \text{sign}\left(\sum_{i=1}^{|sv|} \alpha_i y_i k(x_i, x) + b\right) \quad (5.38)$$

quindi anche in fase di test non abbiamo la necessità di calcolare ϕ che comporterebbe l'effettuazione di prodotti scalari di vettori con un numero di componenti elevato se non addirittura infinito (come il *kernel* gaussiano). E' proprio questo il vantaggio che apporta il **kernel trick**.

Prodotto scalare come misura di similarità

Il motivo per cui si predilige la formulazione duale rispetto a quella primaria è da ricercare nel fatto che in essa compare il prodotto scalare che come visto conduce alla tecnica dei *kernels*. Un altro motivo è che il prodotto scalare è una **misura di similarità** e quindi trascendendo i *kernels* classici della tabella 5.1 ,se si rivelano inappropriati, è possibile definire un *kernel* su misura che implicitamente definisce una misura di similarità *customizzata* tra i campioni. Riferendoci ,senza perdere di

generalità, alla formulazione duale hard margin in (5.15) ¹⁷ si cerca di interpretare più in dettaglio come funziona il prodotto scalare ricordando che L_d va massimizzato. Assumendo che x_i e x_j sono due campioni si ha che:

1. Se x_i e x_j sono **completamente dissimili** come in figura 5.7 il prodotto scalare è zero e non contribuiscono a L_d (anche se non sono esattamente ortogonali ma quasi il prodotto scalare sarà piccolo ed anche il contributo a L_d).
2. Se x_i e x_j sono **completamente simili** (o quasi) cioè il loro prodotto scalare è uno (o quasi uno) si può fare un ulteriore distinguo:
 - y_i e y_j cioè le rispettive etichette sono uguali (cioè entrambe 1 o entrambe -1), allora siccome $\alpha_i, \alpha_j \geq 0$ $\alpha_i \alpha_j y_i y_j (x_i \bullet x_j)$ per quei due specifici campioni x_i, x_j è positivo (o nullo) ma moltiplicato per $-1/2$ è negativo quindi L_d diminuisce. Se ne deduce che campioni simili (prodotto scalare uguale o vicino a uno) con la stessa etichetta come in figura 5.9 sono ignorati da SVM (perchè altrimenti il margine diminuirebbe) e quindi SVM non li rende vettori di supporto.
 - y_i e y_j cioè le rispettive etichette sono opposte (cioè 1 e -1 o viceversa). Inoltre i vettori sono simili e il prodotto scalare è vicino a 1 come in figura 5.8 quindi $\alpha_i \alpha_j y_i y_j (x_i \bullet x_j) \leq 0$ e moltiplicato per $-1/2$ diventa positivo e quindi contribuisce ad incrementare il margine. Quindi SVM renderà tali elementi del *training set* vettori di supporto (perchè fanno aumentare il margine)

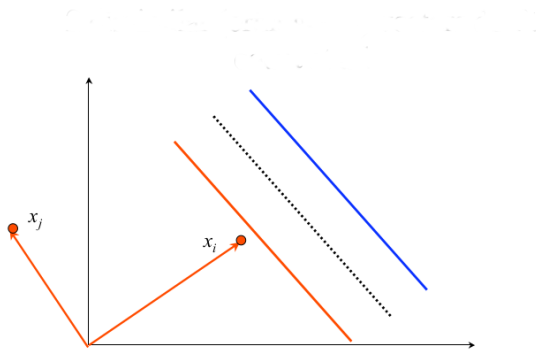


Figura 5.7: Due campioni dissimili(ortogonali), indipendentemente dall'etichetta, non contano affatto.

¹⁷Per la formulazione con kernels la misura di similarità è relativa ai campioni trasformati cioè a $\phi(x_i) \bullet \phi(x_j)$

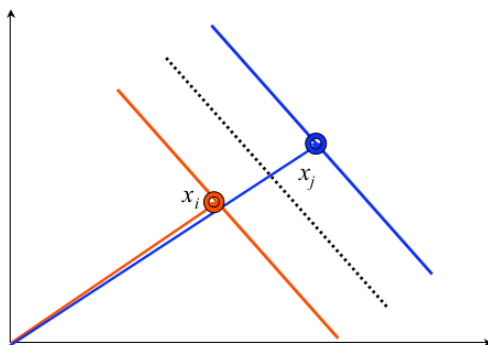


Figura 5.8: Due campioni molto simili, x_i e x_j , con etichette diverse, tendono a massimizzare il margine e sono resi vettori di supporto.

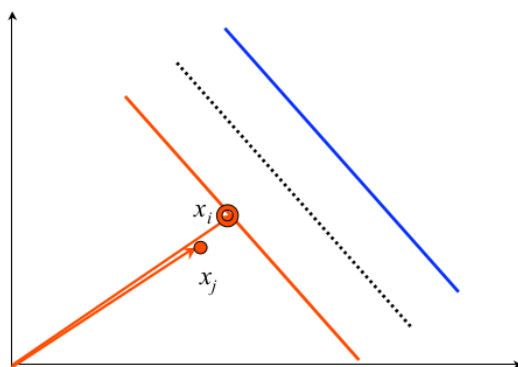


Figura 5.9: Due campioni molto simili, x_i e x_j , con etichette uguali, tendono a minimizzare il margine e quindi non vanno resi vettori di supporto. Oppure se uno di loro è un vettore di supporto (perchè con altri campioni contribuisce ad aumentare il margine) l'altro non va reso un vettore di supporto (in modo da avere coefficiente nullo) in modo da non influenzare negativamente il margine.

String kernels

Come accennato in precedenza in 5.2.4 determinati ambiti è possibile definire un *kernel* che rappresenta una misura di similarità adatta allo specifico problema da affrontare o in cui gli elementi del *training set* sono strutturati, come ad esempio stringhe ed alberi. Un esempio molto importante, e rilevante ai fini della tesi, è quello dei **string kernels**, dei quali è possibile trovare un'introduzione in [13, p. 60]. In questa sede a titolo esemplificativo se ne descriveranno un paio che saranno menzionati più avanti. In generale l'obiettivo di uno *string kernel* è quello di rappresentare o estrapolare delle features delle stringhe che possono essere rilevanti per un problema specifico in termini di similarità o dissimilarità. Uno dei più semplici è il **Parikh kernel** che associa ad ogni stringa un vettore di numeri naturali dove ogni componente è il numero di occorrenze di un simbolo dell'alfabeto nella stringa. La dimensione del *feature space* dipende dal numero di elementi nell'alfabeto. Si consideri l'esempio nella tabella 5.2 in cui si hanno quattro elementi del *training set* $\{bac, baa, cab, bad\}$ e i quattro simboli dell'alfabeto $\{a, b, c, d\}$ che rappresentano le funzioni $\phi_1, \phi_2, \phi_3, \phi_4$ che mappano gli elementi nel *feature space*. Si ha allora che la valutazione del *kernel* tra gli elementi *bad* e *baa* è

$$k(bad, baa) = 1 \cdot 2 + 1 \cdot 1 + 0 \cdot 0 + 1 \cdot 0 = 3$$

Un altro *string kernel* molto noto è **all k-subsequences kernel** che calcola il prodotto scalare di due vettori in cui ogni componente è il numero di occorrenze di sottosequenze (che si ricorda possono essere contigue o non contigue) di lunghezza al più k in una stringa. Nella tabella 5.3 vi è un esempio di *All 2-subsequences kernel*.¹⁸ Si ha allora che la valutazione del *kernel* nell'esempio tra gli elementi *bad* e *baa* è

$$k(bad, baa) = 6$$

All k-subsequences kernel ha sempre almeno valore 1 per la presenza della *feature* λ cioè la stringa vuota che è sottosequenza di ogni stringa. Anche per i *string kernels* tipicamente non si calcolano le funzioni ϕ e i relativi prodotti scalari ma si usa il *kernel trick* che viene realizzato tramite tecniche di programmazione dinamica. Per un'implementazione di molti dei più noti *string kernels* compresi quelli esposti in questa sede si veda [39]. I kernel non sono solo un escamotage per renderne efficiente il calcolo, che comunque in alcuni casi come uno spazio delle caratteristiche enorme o infinito sarebbe impossibile, ma hanno due pregi notevoli che rendono *SVM* molto versatile ed applicabile nei più svariati contesti:

1. Consentono di trattare con elementi del *training set* che non sono in forma vettoriale ma che sono strutturati come ad esempio alberi e grafi
2. Consentono di trattare con elementi del *training set* che hanno lunghezza differente infatti finora si è sottaciuto che le *SVM* nella loro formulazione senza

¹⁸Dalla tabella nell'esempio per motivi di spazio sono omesse le *features*, cioè le sottosequenze, per le quali tutti i campioni hanno valore zero come ad esempio la sottosequenza *cc*

kernel possono funzionare solo con elementi della stessa lunghezza. Una trasformazione ϕ , implicitamente indotta da un kernel che rispetta le condizioni di Mercer, uniforma le stringhe alla stessa lunghezza M (M è la dimensione dello spazio di Hilbert \mathcal{H}) e quindi permette di trattare anche campioni di lunghezza diversa.

Dati	ϕ_1	ϕ_2	ϕ_3	ϕ_4
	a	b	c	d
bac	1	1	1	0
baa	2	1	0	0
cab	1	1	1	0
bad	1	1	0	0

Tabella 5.2: *Parikh kernel su quattro stringhe e su un alfabeto quaternario*

Dati	ϕ_1	ϕ_2	ϕ_3	ϕ_4	ϕ_5	ϕ_6	ϕ_7	ϕ_8	ϕ_9	ϕ_{10}	ϕ_{11}	ϕ_{12}	ϕ_{13}	ϕ_{14}
	λ	a	b	c	d	aa	ab	ac	ad	ba	bc	bd	ca	cb
bac	1	1	1	1	0	0	0	1	0	1	1	0	0	0
baa	1	2	1	0	0	1	0	0	0	2	0	0	0	0
cab	1	1	1	1	0	0	1	0	0	0	0	0	1	1
bad	1	1	1	0	1	0	0	0	1	1	0	1	0	0

Tabella 5.3: *All 2-subsequences kernel su quattro stringhe e su un alfabeto quaternario*

5.2.5 Versione soft margin kernelized

Le tecniche espone nelle sottosezioni 5.2.4 e 5.2.3 sono combinate insieme per ottenere la versione delle *SVM* di riferimento maggiormente adottata. Infatti sebbene i *kernels* rendano presumibilmente il *training set* linearmente separabile non c'è alcuna garanzia che questo avvenga realmente. Inoltre anche se i dati vengono resi linearmente separabili è consigliabile utilizzare ugualmente la tecnica soft margin anziché quella del classificatore a margine massimo (hard margin) perchè può accadere che a causa della presenza di alcuni **outliers**¹⁹ ci sia *overfitting*, cioè eccessivo adattamento al *training set* e scarsa capacità di generalizzare, che potrebbe essere scongiurato scegliendo un **decision boundary**²⁰ con soft margin che anche se ignora gli *outliers* misclassificandoli porta alla scelta di un iperpiano separatore con un

¹⁹Sono delle anomalie cioè degli elementi del *training set*, tipicamente in numero esiguo, che si discostano nettamente dal resto dei campioni

²⁰cioè un iperpiano separatore

marginale più grande e quindi con migliori capacità di generalizzare. Per questa ragione anche se la scelta di un kernel rendesse i dati linearmente separabili (asserzione che comunque non è sempre verificata) si predilige soft margin ad hard margin per cui usualmente la versione di riferimento di *SVM* combina i *kernels* con soft margin e la formulazione matematica del problema duale da risolvere diventa:

$$\text{massimizzare} \quad L_d = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^l \alpha_i \alpha_j y_i y_j k(x_i, x_j) + \sum_{i=1}^l \alpha_i \quad (5.39)$$

$$\text{soggetto a} \quad 0 \leq \alpha_i \leq C \quad (5.40)$$

$$\sum_{i=1}^l \alpha_i y_i = 0 \quad (5.41)$$

5.2.6 Globalità e unicità della soluzione

Uno dei vantaggi delle *SVM* rispetto alle reti neurali è che assicurano una soluzione deterministica nel senso che dato un *training set* la soluzione non dipende da elementi aleatori cosa che accade nelle reti neurali dove l'inizializzazione casuale dei pesi può condurre a una soluzione differente da un'esecuzione all'altra. Un altro vantaggio delle *SVM* è che essendo un problema di programmazione quadratica convessa con vincoli lineari assicura di trovare una soluzione globale mentre nelle reti neurali si ha la certezza di trovare un minimo locale ma non è assicurato di trovare la soluzione migliore. Nelle *SVM* il rispetto delle KKT condizioni è una condizione necessaria per trovare un minimo o un massimo globale ma in generale non sono condizioni sufficienti cioè vi è solo la garanzia di un minimo locale. Tuttavia la natura convessa del problema, rende le condizioni KKT anche sufficienti, assicura che la soluzione trovata sia sempre quella globale e questo è il motivo per cui si usa la formulazione quadratica alternativa in 5.9. Ma è necessario garantire anche l'**unicità** della soluzione $\{w, b\}$ perchè potrebbero esistere delle altre coppie $\{w, b\}$ che siano pure soluzione (esistenza più minimi globali equivalenti) oppure la stessa soluzione, ma con una diversa espansione di $w = \sum_{i=1}^{|sv|} \alpha_i y_i x_i$ e questo è pure rilevante perchè potrebbe essere un'espansione migliore con meno vettori di supporto²¹. E' garantito che la soluzione sia unica se la formulazione duale 5.15 o la formulazione duale con *kernel* 5.37 è strettamente convessa. Anzichè le formulazioni 5.15 e 5.37 si può definire l'**Hessiano** del problema che è una formulazione matriciale ottenuta come descritto nella nota 16. Si ha che:

Teorema. *Un problema quadratico è strettamente convesso se e solo se l'Hessiano associato è definito positivo.*

Quando l'Hessiano non è definito positivo la natura convessa del problema assicura che l'Hessiano sia comunque almeno semidefinito positivo cosa che assicurerà la glo-

²¹Una soluzione con tanti vettori di supporto vicino al numero di elementi nel *training set* è indice di *overfitting*.

balità della soluzione ma non l'unicità. Riassumendo la globalità della soluzione è sempre garantita. L'unicità è garantita solo se l'Hessiano è definito positivo.

5.2.7 Dati non bilanciati

Una situazione che merita un approfondimento è quando i dati del *training set* sono sbilanciati cioè i dati con un'etichetta positiva superano significativamente i dati con etichetta negativa o viceversa. Il quesito cui si deve rispondere è se un *training set* sbilanciato influenza o meno il funzionamento di *SVM*. Innanzitutto si ricorda che nella formulazione soft margin e anche quella soft margin combinata con l'uso di un *kernel* minimizzare la funzione obiettivo significa minimizzare l'errore sul *training set* (errore empirico) e massimizzare il margine (cioè minimizzare $\|w\|$) simultaneamente e il parametro C controlla il compromesso tra queste due quantità. Ponendoci, a titolo esemplificativo, nel caso in cui i campioni positivi sono molto meno di quelli negativi si ha che l'iperpiano separatore si muoverà nella direzione opposta a dove sono la maggior parte dei campioni negativi al fine di produrre un margine più grande col prezzo da pagare che è quello di incrementare gli errori di classificazione degli esempi positivi. Ma dato che i campioni positivi sono in minoranza l'errore di classificazione dei campioni positivi non sarà particolarmente significativo e complessivamente il valore della funzione obiettivo sarà minimizzato, che è il goal di *SVM*. Questo comporta un *overfitting* al *training set* che poi avrà delle ripercussioni negative in fase di generalizzazione dato che il classificatore ottenuto si comporterà in maniera simile a un classificatore *majority class*²². Esistono diversi approcci per affrontare questo problema ad esempio quello proposto in [48]²³ in cui si assegna un peso σ_i ad ogni variabile slack ξ_i . Si impone un bilanciamento sull'errore accumulativo (su tutte le variabili slack) tra campioni positivi e negativi (cioè si impone che il contributo all'errore globale dei campioni positivi sia uguale al contributo di quelli negativi cioè che:

$$\sum_{y_i=1} \sigma_+^2 \xi_i^2 = \sum_{y_i=-1} \sigma_-^2 \xi_i^2$$

usando la formulazione soft-margin norma-2) e assumendo che l'errore è uguale su ogni campione si ottiene un valore globale (slegato dal singolo campione) del peso degli errori e si può scrivere $N_+ \sigma_+^2 = N_- \sigma_-^2$ dove N_+ e N_- sono rispettivamente il numero di campioni positivi e di quelli negativi. Imponendo $\sigma_- = 1$ si ottiene $\sigma_+ = \sqrt{N_-/N_+}$ (anche se in realtà si utilizza una formulazione leggermente diversa) in modo da usare un unico parametro (perché $\sigma_- = 1$) per trattare con *training set* non bilanciati anziché due. Aggiungendo questo parametro e cambiando leggermente la formulazione di *SVM* (splittando la sommatoria per variabili slack positive e negative) si dovrebbe ottenere un classificatore che sulla carta riesce a ottenere risultati migliori a partire da *training set* non bilanciati.

²²E' un classificatore che assegna a tutti i campioni la stessa etichetta (o positiva o negativa)

²³La tecnica proposta in questo riferimento è applicata per una formulazione leggermente diversa di *SVM* detta WPSVM tuttavia è valida anche per le *SVM* classiche

5.2.8 Algoritmo di ottimizzazione

La rappresentazione matematica del problema che SVM intende risolvere — che nella sua espressione ultima è rappresentata dalla forma duale e dai relativi vincoli, nelle quattro formulazione precedentemente esposte — si approccia tipicamente con metodi numerici anzichè ricercare una soluzione analitica. In questa sede non interessa descrivere nel dettaglio i vari risolutori esistenti ma soltanto esporne le linee guida in modo da potere comprendere alcuni dei parametri dei *tools software* che implementano SVM .

L'approccio alla soluzione di questo tipo di problemi è iterativo: si parte da un punto all'interno della *feasible region* e ci si muove non lasciando tale regione e cercando di massimizzare il valore della funzione obiettivo, fino a che non risulta soddisfatto qualche criterio. I criteri per determinare la convergenza possono essere ottenuti sfruttando le caratteristiche dei sistemi convessi. Questi sono essenzialmente tre:

- **Controllare la crescita della funzione duale**

Tale funzione raggiunge il massimo nella soluzione. Controllare il valore della funzione e, specialmente il suo aumento ad ogni passo, fornisce un semplice criterio di convergenza. L'addestramento si ferma quando il rapporto di crescita scende sotto una certa soglia. Sfortunatamente, questo criterio si è dimostrato non sempre affidabile.

- **Gap di ammissibilità**

All'ottimo, la differenza tra il valore della funzione obiettivo del problema in forma primale e del problema duale è nulla. Di conseguenza, un possibile criterio è quello di monitorare tale differenza nota come *gap di ammissibilità*.

- **Monitorare il soddisfacimento delle condizioni KKT**

Esse sono condizioni necessarie e sufficienti (in caso di problemi convessi come quello delle SVM) per la convergenza, per cui ne forniscono un criterio naturale. Ovviamente questi criteri vanno verificati all'interno di un certo margine di tolleranza.

Molto importante, in ogni caso, è il livello di tolleranza utilizzato per verificare il criterio di convergenza scelto. Una accuratezza eccessivamente elevata potrebbe comportare un tempo di esecuzione dell'algoritmo altrettanto elevato ed ingiustificato dal punto di vista dei risultati ottenuti.

5.3 SVM^{light}

Questa tesi è volta a costruire un classificatore che approssimi un *Oracolo* a partire da un insieme di campioni labellati usando come modello le SVM . Quindi è stato necessario scegliere una delle tante implementazioni di SVM e tra le più note e utilizzate si hanno senz'altro **LIBSVM** e SVM^{light} . La scelta è ricaduta su SVM^{light} di Thorsten Joachims perchè è sembrato un tool più semplice da modificare e *customizzare* ed essendo un'implementazione di SVM in linguaggio C relativamente

semplice da includere all'interno della libreria GI-leraning che è scritta in C++. SVM^{light} è particolarmente adatto per problemi di *text classification* ma essendo un tool generico è adatto a tutti i problemi di classificazione binaria compreso la classificazione di stringhe che interessa in questa sede. Inoltre consente l'utilizzo di un *kernel* personalizzato come uno *string kernel*. Malgrado il porting in GI-leraning, la classificazione binaria, la definizione di un kernel personalizzato fosse possibile anche in LIBSVM la scelta è ricaduta su SVM^{light} perchè quest'ultima è sembrata più semplice da personalizzare ai propri fini. Il lato negativo della medaglia è stato che a causa dell'assenza nativa di strumenti predefiniti in SVM^{light} come la *cross validation*, lo *scaling*, metodi di ricerca dei parametri come *grid-search* ecc. è stato necessario implementare questi strumenti per fruirne. In questo modo si è però avuto pieno controllo di quello che si stesse facendo senza dovere usare implementazioni di terzi (escluso le SVM stesse), in alcuni casi poco documentate, a scatola chiusa. SVM^{light} mette a disposizione il calcolo di accuracy, precision e recall sul *test set*, un calcolo efficiente ma solo approssimativo di Leave-One-Out.

SVM^{light} è descritto alla pagina di riferimento: <http://svmlight.joachims.org/>. Qui sarà trattato solo il caso della classificazione binaria. SVM^{light} consiste di due eseguibili, *svm_learn* per addestrare il *training set* ed *svm_classify* per fare predizioni sui nuovi dati usando il modello precedentemente trovato. Tipicamente si avrà un *train_file* contenente il *training set* e un *test_file* contenente il *test set*. Entrambi i file devono rispettare un ben preciso formato.

Il primo step è addestrare una SVM ad esempio con il seguente comando:

```
svm_learn -c 1.5 -x 1 train_file model_file
```

che scrive il modello trovato alla fine dell'addestramento sul file *model_file*. *c* ed *x* sono dei parametri che saranno accennati più avanti. In *model_file* ci sarà il valore di *b* dell'iperpiano separatore e una riga per ogni vettore di supporto che inizierà con il corrispondente valore $\alpha_i y_i$. Per fare predizioni sul test set si usa il comando:

```
svm_classify test_file model_file prediction_file
```

Il comando legge il *test set* dal file di testo e l'iperpiano trovato in precedenza da *model_file* e scrive la predizione fatta tramite l'iperpiano su *prediction_file*. L'ordine delle linee in *prediction_file* corrisponde all'ordine in *test_file* (ad esempio la prima riga in *prediction_file* indica la predizione del primo campione in *test_file*). In *prediction_file* ci sono dei valori che indicano la distanza dall'iperpiano (dal modello) ed il segno determina la classe predetta.

5.3.1 Formato dei file

Sia *train_file* che *test_file* hanno il seguente formato:

```
< y > < numeroFeature > : < valore > ... < numeroFeature > : < valore >
```

<y> indica la classe del campione cioè può essere 1,-1,0. Il valore 1 indica un campione positivo, -1 un campione negativo, 0 un campione del *test set* di cui non si

conosce la classe di appartenenza e si vuole che sia SVM a predirla. Tuttavia nel caso in cui `test_file` contenga per ogni riga, cioè ogni campione, l'etichetta corretta anziché 0 saranno riportate in output varie misure (accuracy, precision, recall ecc.) che sono misure orientative sulle capacità di generalizzare del predittore trovato (l'iperpiano) (cioè si conoscono le corrette etichette dei campioni nel *test set* e si vuole capire se il modello trovato fa le corrette predizioni per questi campioni). Ogni coppia `<numeroFeature>:<valore>` indica il valore di una particolare *feature* (cioè componente) di un campione. Per esempio, `3:0.7 5:0.1` specifica il campione $x = (0, 0, 0.7, 0, 5)$ infatti le features non esplicitamente specificate sono pari a 0 per default. Le coppie devono essere ordinate per numero di feature crescente. Il più piccolo numero di una feature è 1.

5.3.2 Parametri

Saranno introdotti e spiegati solo i parametri utilizzati nel lavoro sperimentale di tesi:

- v Indica il livello di verbosità delle stampe in output. Il valore di default è 1.
- x Se impostato a 1 (default 0) calcola un'approssimazione di LOO.
- c E' il parametro *trade-off* C introdotto nella formulazione soft-margin. Il migliore valore di C dipende dai dati e va determinato empiricamente. Assume un valore decimale.
- j E' il parametro fattore di costo e scaturisce da un ragionamento del tutto analogo a quello fatto in 5.2.7 per tenere conto di dati non bilanciati. Joachims utilizza una formulazione soft margin (norma-1):

$$\frac{1}{2}\|w\|^2 + C_+ \sum_{i:y_i=1} \xi_i + C_- \sum_{j:y_j=-1} \xi_j$$

che impostando $j = N_-/N_+$ diventa:

$$\frac{1}{2}\|w\|^2 + C \left(j \sum_{i:y_i=1} \xi_i + \sum_{j:y_j=-1} \xi_j \right)$$

j quindi è statico nel senso che non va ricercato con questo escamotage con una validazione incrociata, a differenza di C . Quindi questo parametro funge da peso e se ad esempio i campioni negativi sono il doppio di quelli positivi $j=2$ ed i campioni positivi saranno pesati con un peso maggiore di quelli negativi.

- t Seleziona il tipo di kernel:

0: lineare(default)

1: polinomiale

- 2: gaussiano
- 3: sigmoidale
- 4: personalizzato

- g E' il parametro γ del kernel gaussiano.
- e E' un parametro di ottimizzazione. Imposta la tolleranza per il criterio di terminazione nell'algoritmo di risoluzione di SVM^{light} tra un'iterazione e l'altra. Di default è 0.001 Aumentare questo valore comporta a una fase di addestramento più veloce, ma aumentarlo troppo può condurre a trovare un iperpiano con scarse performances.

Capitolo 6

Observation Pack Approssimato

Appendice A

Preliminari

Lo scopo di quest'appendice è di stabilire una comune sintassi e semantica per concetti che sono rilevanti in tutta la tesi. Le definizioni e le notazioni qui introdotte sono essenziali per la maggior parte dei capitoli e quindi andrebbero lette.

L'appendice è divisa concettualmente in tre parti. Nella prima parte si introdurranno questioni puramente matematiche mentre nella seconda parte si definiranno grammatiche e linguaggi, infine nell'ultima parte si tratteranno in dettaglio gli automi a stati finiti.

A.1 Notazione matematica

L'obiettivo di questa sezione è di introdurre i concetti matematici propedeutici per questa tesi. Senza dubbio una conoscenza matematica di base è necessaria e chiaramente non può essere introdotto ogni singolo elementare concetto.

A.1.1 Insiemi

Con \mathbb{N} si indica l'insieme di numeri naturali interi non negativi incluso 0 (cioè $\mathbb{N} = 0, 1, 2, \dots$). L'insieme di interi positivi è denotato da \mathbb{N}^+ . Si definisce con $\mathbb{B} = \{0, 1\}$ l'insieme di valori booleani dove 0 è associato al valore logico *falso* ed 1 al valore logico *vero*.

Dato un generico insieme X , $|X|$ denota la sua cardinalità, cioè il numero di elementi che contiene.

A.1.2 Relazione d'equivalenza

Una relazione binaria riflessiva, simmetrica e transitiva $\approx \subseteq X \times X$ su un insieme X è detta una **relazione d'equivalenza**. Dato un insieme X ed un elemento $x \in X$ si denota con $[x]_{\approx} = \{x' \in X \mid x \approx x'\}$ la *classe di equivalenza* di x (rispetto alla relazione d'equivalenza \approx).

Una relazione d'equivalenza \approx su un insieme X si dice che *satura* un sottoinsieme $X' \subseteq X$ se e solo se X' è l'unione di alcune delle classi d'equivalenza di \approx . In simboli

si ha:

$$X' = \bigcup_{x \in X'} [x]_{\approx} ,$$

e ogni classe di equivalenza $[x]_{\approx}$ di \approx o è un sottoinsieme o è disgiunta da X' .

Il **quoziente** (o insieme quoziente) di X rispetto a una relazione d'equivalenza \approx è definito come l'insieme di tutte le classi d'equivalenza, ed è indicato da $X/\approx = \{[x]_{\approx} \mid x \in X\}$. L'**indice di una relazione d'equivalenza** \approx è definito come il numero di classi d'equivalenza, cioè è uguale a $|X/\approx|$. Una **partizione** di un insieme X è un insieme P i cui elementi, detti **blocchi** ed indicati con C , sono sottoinsiemi (disgiunti e non vuoti) dell'insieme X tali che:

1. se $C \in P$ allora $C \neq \emptyset$
2. se $C_1, C_2 \in P$ e $C_1 \neq C_2$ allora $C_1 \cap C_2 = \emptyset$
3. se $a \in X$ allora esiste $C \in P$ tale che $a \in C$ (è un altro modo di dire che l'unione di tutti gli insiemi C deve formare X)

Il **quoziente** di X forma una **partizione** di X

A.2 Linguaggi e grammatiche

A.2.1 Alfabeto, stringhe e linguaggi

Alfabeto

Si definisce l'**alfabeto** Σ un qualsiasi insieme finito e non vuoto di simboli.

Stringhe

Una **stringa** è definita come una sequenza di simboli presi da un alfabeto. Cioè una stringa s definita su Σ è una sequenza $s = a_1 \dots a_n$ tale che $a_i \in \Sigma$.

$|s|$ denota la lunghezza della stringa s .

La **stringa vuota** è indicata con ϵ e $|\epsilon| = 0$.

Con Σ^* si denota l'insieme di tutte le possibili stringhe ottenibili sull'alfabeto Σ .

Inoltre con Σ^+ si denota l'insieme $\Sigma^* - \{\epsilon\}$

I singoli simboli costituenti una stringa $w \in \Sigma^*$ sono indicati con w_i con $0 \leq i \leq |w|$ quindi $w = w_0 w_1 \dots w_{|w|-1}$. Per qualche intero nell'intervallo $I \subseteq [0, |w|]$, w_I è la stringa risultante prendendo solo le posizioni in w corrispondenti agli indici in I . Quindi $w_{[0,k)}$ è il prefisso di w di lunghezza k , e $w_{[k,|w|)}$ è il suffisso di w che inizia all'indice k (compreso). Si osservi che $w_{[0,0)} = w_{[|w|,|w|)} = \epsilon$ e $w_{[0,|w|)} = w$.

Un **prefisso** di una stringa $w \in \Sigma^*$ è una stringa $u \in \Sigma^*$ tale che esiste una stringa $v \in \Sigma^*$ soddisfacente $w = uv$. L'insieme di tutti i prefissi di una stringa w si indica con $\text{Pref}(w)$

Un **suffisso** di una stringa $w \in \Sigma^*$ è una stringa $v \in \Sigma^*$ tale che esiste una stringa

$u \in \Sigma^*$ soddisfacente $w = uv$. L'insieme di tutti i suffissi di una stringa w si indica con $\text{Suff}(w)$

Una **sottosequenza** di una stringa è una qualsiasi stringa ottenuta rimuovendo dalla stringa di partenza zero o più simboli non necessariamente consecutivi.

Linguaggi

Un linguaggio L su un alfabeto Σ è un qualsiasi sottoinsieme di stringhe di Σ^* . Si definisce l'insieme dei prefissi di un linguaggio L :

$$\text{Pref}(L) = \bigcup_{w \in L} \text{Pref}(w)$$

e l'insieme dei suffissi di L :

$$\text{Suff}(L) = \bigcup_{w \in L} \text{Suff}(w)$$

Un linguaggio L è detto essere **prefix-closed** se e solo se $\text{Pref}(L) = L$. Informalmente questa proprietà di un linguaggio L viene sfruttata per indicare che qualunque stringa appartenente ad L si prende, qualunque suo prefisso deve ancora appartenere ad L . Analogamente un linguaggio L è **suffix-closed** se e solo se $\text{Suff}(L) = L$.

La **differenza simmetrica** di due linguaggi L_1 e L_2 denotata con $L_1 \oplus L_2$ è tale che:

$$L_1 \oplus L_2 = \{x \in \Sigma^* : (x \in L_1 \wedge x \notin L_2) \vee (x \notin L_1 \wedge x \in L_2)\}$$

Un linguaggio può essere identificato mediante due tipi di descrizioni:

1. **Descrizione generativa**

Consiste nell'utilizzare un formalismo denominato **grammatica generativa**, introdotto da Noam Chomsky, che consiste in una serie di simboli e regole mediante le quali è possibile generare tutte e sole le stringhe del linguaggio.

2. **Descrizione descrittiva-identificativa**

Il linguaggio è identificato o tramite un'enumerazione delle stringhe che vi appartengono o tramite una descrizione che cattura le caratteristiche delle sentenze costituenti il linguaggio, ad esempio le espressioni regolari. Un altro sistema formale identificativo sono gli **automi**.

I linguaggi possono essere classificati in base ai due tipi di descrizioni. Infatti è possibile delineare una tassonomia di grammatiche cui si farà corrispondere una classe di linguaggi. Ad ogni classe di grammatiche corrisponderà una classe di linguaggi (tutti quelli che quella classe di grammatiche è in grado di generare). E' possibile effettuare un'analogia corrispondenza tra classi di automi e classi di linguaggi, e quindi anche tra la gerarchia di automi e quella di grammatiche. Si rimanda alla sottosezione A.2.2 per una formalizzazione di questa gerarchia.

A.2.2 Grammatiche

Definizione (Grammatica generativa di Chomsky). Una **grammatica generativa di Chomsky** è una quadrupla:

$$G = (\Sigma, V, S, P)$$

dove:

Σ è l'alfabeto, detto insieme di simboli terminali

V è l'insieme di simboli non terminali

S è il simbolo iniziale ed appartiene a V

P è l'insieme delle produzioni costituiti da una testa Ψ (il lato sinistro della produzione) e da una coda Ω aventi in generale questa forma:

$$\Psi \rightarrow \Omega \text{ con } \Psi \in (\Sigma \cup V)^* V (\Sigma \cup V)^* \text{ e } \Omega \in (\Sigma \cup V)^*$$

Si effettua una classificazione delle classi di grammatiche (e dei linguaggi ad esse associate) imponendo delle restrizioni sulle regole di produzione [7]:

- **Grammatiche di tipo zero - Unrestricted** E' la classe di grammatiche più in alto nella gerarchia e per la quale non vi sono regole di restrizione da applicare alle produzioni. Sono in grado di generare la classe di **linguaggi ricorsivamente enumerabili**. Mediante l'approccio identificativo l'automa che riconosce ed accetta questi linguaggi è la **Macchina di Turing**
- **Grammatiche di tipo uno - Context Sensitive** Le regole di produzione sono così definite:

$$\alpha_1 A \alpha_2 \rightarrow \alpha_1 \Omega \alpha_2 \text{ con } \alpha_1, \alpha_2, \Omega \in (\Sigma \cup V)^* \text{ e } A \in V$$

La classe di linguaggi che queste grammatiche sono in grado di generare è detta **context-sensitive**. Gli automi in grado di riconoscere ed identificare questi linguaggi sono detti **Linear Bounded Automata**

- **Grammatiche di tipo due - Context Free** Le regole di produzione sono così definite:

$$A \rightarrow \Omega \text{ con } \Omega \in (\Sigma \cup V)^* \text{ e } A \in V$$

La classe di linguaggi che queste grammatiche sono in grado di generare è detta **context-free**. Gli automi in grado di riconoscere ed identificare questi linguaggi sono detti **Push Down Automata**

- **Grammatiche di tipo tre - Regular** Le regole di produzione sono così definite:

$$A \rightarrow \alpha B \text{ oppure } A \rightarrow B \alpha \text{ con } A, B \in (V \cup \{\epsilon\}) \text{ e } \alpha \in \Sigma^+$$

I linguaggi che queste grammatiche generano sono detti **linguaggi regolari**. Gli automi in grado di riconoscere ed identificare questi linguaggi sono detti **Finite State Automata (FSA)**.

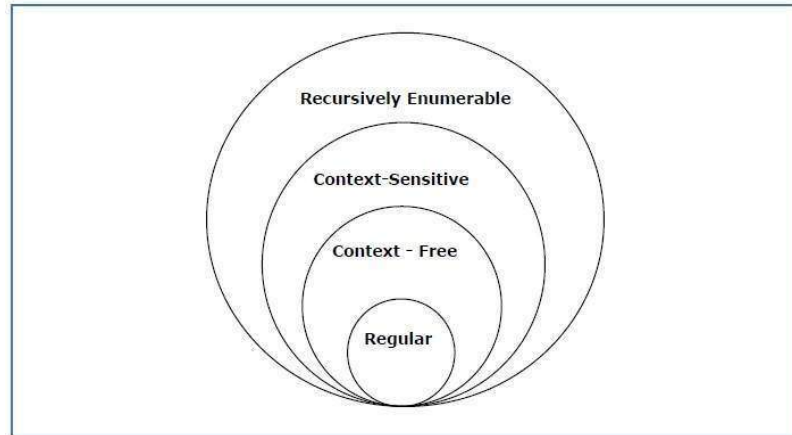


Figura A.1: Gerarchia di linguaggi secondo Chomsky

Le diverse classi di linguaggi, e quindi anche di grammatiche ed automi, si includono propriamente in maniera gerarchica come in figura A.1. Ad una grammatica si può associare un unico linguaggio. Adesso si definirà come avviene tale associazione:

Definizione. Il linguaggio generato da una grammatica \mathcal{G} è l'insieme di tutte le stringhe che possono essere derivate a partire dal simbolo iniziale S :

$$L(\mathcal{G}) = \{x \in \Sigma^* : S \xRightarrow{\mathcal{G}} x\}$$

E' rilevante notare che come detto una grammatica genera un unico linguaggio ma un linguaggio può essere generato da molteplici grammatiche.

Inoltre la tassonomia di Chomsky non è esaustiva di tutti i linguaggi possibili, infatti esistono dei linguaggi che non sono ricorsivamente enumerabili cioè non c'è nessuna macchina di Turing che li riconosce.

Infine esistono altre classi di linguaggi che non sono incluse nella classificazione appena esposta e che saranno adoperate nel corso della trattazione:

Definizione (Linguaggio Ricorsivo). Un linguaggio L è detto **ricorsivo** se è decidibile cioè esiste una macchina di Turing M che accetta ogni stringa in $x \in L$ e rigetta ogni stringa $x \notin L$.

I linguaggi regolari e context-free sono ricorsivi. Esistono invece linguaggi context-sensitive non ricorsivi, cioè non ne sono un sottoinsieme [26, p. 124]. Tutti i linguaggi ricorsivi sono ricorsivamente enumerabili (cioè sono linguaggi semidecidibili per i quali una stringa non appartenente al linguaggio può essere sia rigettata che andare in ciclo infinito rispetto a una macchina di Turing) ma non è sempre vero il viceversa.

Definizione (Linguaggio primitivo ricorsivo). Un linguaggio è **primitivo ricorsivo** quando la sua funzione caratteristica è primitiva ricorsiva.

Il concetto di funzione caratteristica è spiegato nella sezione A.3. Invece una funzione primitiva ricorsiva è una funzione definita come una delle funzioni di base

o combinando le funzioni di base con operazioni come composizione e ricorsione. Per una definizione formale si rimanda a [37]. I linguaggi primitivi ricorsivi sono un sottoinsieme dei linguaggi ricorsivi.

Definizione (Linguaggi superfiniti). La classe dei linguaggi superfiniti è tale se contiene tutti i linguaggi finiti ed almeno un linguaggio infinito.

A.3 Automi a stati finiti

Nella sottosezione A.2.2 sono stati introdotti gli automi e una loro classificazione. Qui ci si concentrerà sullo studio dei *FSA* in relazione ai linguaggi regolari, la classe dei linguaggi a cui questa tesi è rivolta. Come visto gli *FSA* sono un caso speciale di *macchina di Turing* e più nello specifico un caso speciale di **Finite State Machine (FSM)** che in questa sede non interessa definire. Qui basterà dire che una *FSM* è un *transiction system* costituita da un insieme finito di stati dove ogni transizione è innescata da un'azione tra un insieme finito di azioni (di solito denotato da Σ). Esistono diversi tipi di *FSM* come le *Mealy Machines* e gli *FSA*. Tra gli *FSA* si annoverano gli **Non-Deterministic Finite Automata (NFA)** strettamente correlati ai *DFA* su cui si focalizzerà l'attenzione.

Definizione A.1 (Automa a stati finiti deterministico). Un *DFA* A è una quintupla:

$$A = \langle \Sigma, Q^A, q_\epsilon^A, \delta^A, \mathbb{F}_A^A \rangle$$

dove:

Σ è un alfabeto

Q^A è un insieme finito di stati

$q_\epsilon^A \in Q^A$ talvolta indicato come q_λ^A è lo stato iniziale

$\delta^A : Q^A \times \Sigma \rightarrow Q^A$ è la funzione di transizione

$\mathbb{F}_A^A \subseteq Q^A$ è l'insieme degli stati accettanti

Inoltre nel corso della trattazione seguendo [13, p. 72] in alcuni casi è conveniente utilizzare anche un'altra definizione per i *DFA* uguale a quella appena data ma comprendente anche un nuovo insieme $\mathbb{F}_\mathbb{R}^A \subseteq Q^A$ che è l'insieme degli stati rigettanti. Quando si parlerà di *DFA* si farà sempre riferimento alla prima definizione, quella classica, a meno che non è specificato o l'utilizzo della seconda definizione risulta tacitamente evidente dall'utilizzo dell'insieme $\mathbb{F}_\mathbb{R}^A$. Si indica con $\|A\| = |Q^A|$. Inoltre in molti frangenti è conveniente utilizzare (questo è un discorso che esula dalla definizione di un *DFA*) una versione estesa della funzione di transizione a una stringa anzichè ad un solo simbolo dell'alfabeto. Si definisce allora $\hat{\delta}^A : Q^A \times \Sigma^* \rightarrow Q^A$ definendo induttivamente $\hat{\delta}^A(q, \epsilon) = q$ e $\hat{\delta}^A(q, aw) = \hat{\delta}^A(\delta^A(q, a), w)$ per $q \in Q^A$ e $aw \in \Sigma^+$ e $w \in \Sigma^*$. Per la funzione di transizione estesa nel corso della tesi sarà anche usata interscambiabilmente la definizione $A[w] = \hat{\delta}^A(q_\epsilon^A, w)$. Inoltre si estende quest'ultima notazione agli insiemi di stringhe: $W \subseteq \Sigma^* \mid A[W] = \{A[w] : w \in W\}$.

Una stringa x è detta essere accettata da un *DFA* A se e solo se $\hat{\delta}^A(q_\epsilon, x) = q'$ tale che $q' \in \mathbb{F}_A^A$ che significa che usando la funzione di transizione estesa $\hat{\delta}^A$ a partire dallo stato iniziale è possibile arrivare ad uno stato accettante. Il linguaggio individuato da un *DFA* A è allora:

$$L(A) = \{x \in \Sigma^* : \hat{\delta}^A(q_\epsilon, x) \in \mathbb{F}_A^A\}$$

Una relazione analoga a quanto visto tra linguaggi e grammatiche sussiste tra linguaggi e *DFA*: un *DFA* induce un solo linguaggio regolare, ma ad un linguaggio regolare corrispondono più *DFA*.

In molti contesti è utile riferirsi alla *funzione di output* di un *DFA* A , λ^A come:

$$\lambda^A : \Sigma^* \rightarrow \mathbb{B}, \quad \forall w \in \Sigma^* \quad \lambda^A(w) = \begin{cases} 1 & \text{se } w \in L(A) \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

La *funzione di output* è la *funzione caratteristica* di $L(A)$. Inoltre λ^A appena definita sopra può essere vista come un caso particolare, per $q = q_\epsilon^A$, di $\lambda_q^A(w)$ che assume valore 1 se $\hat{\delta}^A(q, w) \in \mathbb{F}_A^A$. Ancora, due *DFA* A e A' , sono **equivalenti** denotato da $A \cong A'$, se loro hanno la stessa funzione di output, cioè se $\lambda^A = \lambda^{A'}$, cioè se individuano lo stesso linguaggio. Il concetto di equivalenza è rilevante anche tra gli stati dello stesso *DFA* ed informalmente due stati sono equivalenti se non esiste nessuna stringa che li distingue, cioè che partendo da quei due stati porta a stati di arrivo che sono uno accettante e l'altro no.

Definizione (Stati equivalenti). Detto A essere un *DFA*, e q e $p \in Q^A$ stati di A . q e p sono *equivalenti*, denotato da $q \equiv p$, se $\lambda_q^A = \lambda_p^A$.

Una stretta correlazione tra l'equivalenza di stati e l'equivalenza di *DFA* è il seguente risultato: $A \cong A' \Leftrightarrow q_\epsilon^A \equiv q_\epsilon^{A'}$. Un altro concetto importante è quello di *isomorfismo* tra due *DFA*.

Definizione (Isomorfismo di *DFA*). Detti A ed A' due *DFA* definiti su Σ . A ed A' sono detti isomorfici se esiste un isomorfismo $f : Q^A \rightarrow Q^{A'}$, cioè una funzione soddisfacente le seguenti condizioni:

1. $f(q_\epsilon^A) = q_\epsilon^{A'}$
2. $\forall q \in Q^A : q \in F_A^A \Leftrightarrow f(q) \in F_{A'}^{A'}$
3. $\forall q \in Q^A, a \in \Sigma : f(\delta^A(q, a)) = \delta^{A'}(f(q), a)$

L'isomorfismo è un requisito più forte dell'equivalenza: *DFA* isomorfi sono pure equivalenti, ma in generale non è vero il contrario. Quindi dato un linguaggio L esistono più *DFA* in grado di riconoscerlo cioè con la stessa *funzione di output* λ . Tra questi di particolare interesse sono quelli con il minor numero di stati. Un *DFA* A è detto **minimo** se qualunque altro *DFA* A' tale che $A \cong A'$ (con la stessa *funzione di output*) soddisfa $|Q^{A'}| \geq |Q^A|$. Ovviamente in un *DFA* minimo né stati irraggiungibili né stati equivalenti possono essere presenti perchè potrebbero essere eliminati senza cambiare la funzione di output λ . Inoltre il *DFA* minimo è sempre unico a meno

di una possibile rinomina degli stati. Per motivi storici esiste anche la definizione di *DFA canonico* che è intercambiabile con quella di *DFA* minimo ma entrambe indicano lo stesso ente matematico e sono del tutto equivalenti. Formalizzando

Definizione (*DFA* minimo/canonico). Detto A essere un *DFA* su Σ . A è detto canonico se le seguenti condizioni sono verificate:

1. Tutti gli stati sono raggiungibili: $A[\Sigma^*] = Q^A$
2. Tutti gli stati sono a coppie separabili¹: $\forall q \neq p \in Q^A : \exists w \in \Sigma^* : \lambda_q^A(w) \neq \lambda_p^A(w)$

Per ogni *DFA* esiste sempre, ed è unico (a meno delle etichette degli stati) un *DFA* equivalente che è canonico.

A.3.1 FSA particolari

Alcuni *DFA* ed *NFA* sono particolarmente significativi e ricorreranno spesso nell'ambito di questa tesi. Inoltre è necessario conoscere per il proseguo della trattazione qual è la differenza principale tra *DFA* ed *NFA*. Un *NFA* è detto non deterministico perchè la sua funzione di transizione può avere più di una transizione per un dato simbolo dell'alfabeto (ed inoltre vi possono essere transizioni anche in corrispondenza di ϵ). Inoltre in un *NFA* non vi è necessariamente per ogni stato una transizione in corrispondenza di ogni simbolo dell'alfabeto.

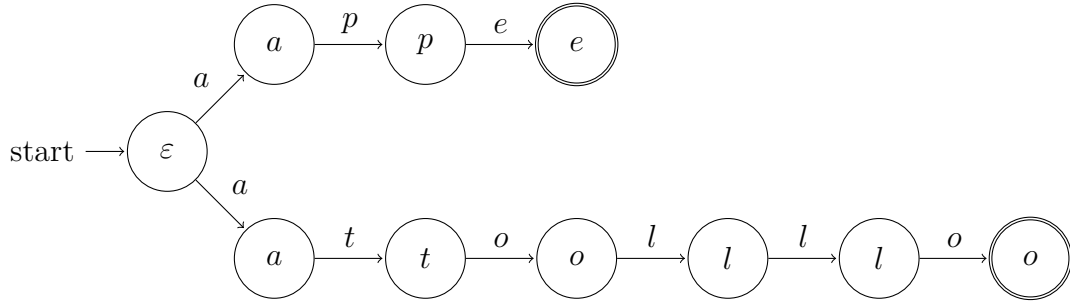
Maximal Canonical Automaton

Definizione A.2 (Maximal Canonical Automaton). Detto $I_+ = \{x_1, \dots, x_N\}$ un insieme di esempi positivi, si definisce **Maximal Canonical Automaton rispetto ad I_+** e si denota con $MCA(I_+)$ un *NFA* costituito da una quintupla $\langle \Sigma, Q, q_\epsilon, \delta, \mathbb{F}_\mathbb{A} \rangle$ dove:

$$\begin{aligned} \Sigma & \text{ è l'alfabeto su cui è definito } I_+ \\ Q & = \{q_u^i : u \in \text{Pref}(x_i) \wedge u \neq \epsilon\} \cup \{q_\epsilon\}, 1 \leq i \leq N \\ q_\epsilon & = \{q_\epsilon\} \\ \delta(q_u^i, a) & = \{q_{ua}^i : ua \in \text{Pref}(x_i)\}, \forall a \in \Sigma, 1 \leq i \leq N \\ \delta(q_\epsilon, a) & = \{q_a^i : a \in \text{Pref}(x_i)\}, \forall a \in \Sigma, 1 \leq i \leq N \\ 1 \leq i \leq N, q_{x_i}^i & \in \mathbb{F}_\mathbb{A} \\ \text{se } \epsilon \in I_+ & \text{ aggiungere } q_\epsilon \text{ ad } \mathbb{F}_\mathbb{A} \end{aligned}$$

Un $MCA(I_+)$ per ogni stringa di I_+ ha un percorso dedicato a partire dallo stato iniziale. Si noti che nella definizione data di δ accade che per molti simboli di Σ non c'è la corrispondente transizione per un dato stato. Inoltre se in I_+ sono presenti stringhe che hanno lo stesso simbolo iniziale si avrà indeterminismo sullo stato iniziale q_ϵ . Quindi in generale il $MCA(I_+)$ è un *NFA*. Un esempio è dato in figura A.2

¹due stati sono separabili o distinti se non sono equivalenti

Figura A.2: $MCA(I_+)$ per $I_+ = \{ape, atollo\}$

Automa quoziente

Sia A un DFA su Σ e sia $\approx \subseteq Q^A \times Q^A$ una relazione d'equivalenza sull'insieme Q^A soddisfacente le seguenti due condizioni:

- (i) \approx satura \mathbb{F}_A^A
- (ii) $\forall q, p \in Q^A : q \approx p \Rightarrow (\forall a \in \Sigma : \delta^A(q, a) \approx \delta^A(p, a))$

Allora da A tramite \approx è possibile ricavare il **DFA quoziente** A/\approx così definito:

1. Σ è lo stesso di A
2. $Q^{A/\approx} = Q^A/\approx$
3. $q_\epsilon^{A/\approx} = [q_\epsilon^A]_\approx$
4. $\mathbb{F}_A^{A/\approx} = \{[q]_\approx : q \in \mathbb{F}_A^A\}$
5. $\delta^{A/\approx}([q]_\approx, a) = [\delta^A(q, a)]_\approx \quad \forall q \in Q^A, a \in \Sigma$

L'automa quoziente A/\equiv , dove la relazione d'equivalenza utilizzata è quella di equivalenza tra gli stati, corrisponde al DFA canonico. Quindi banalizzando si può concludere dicendo che l'automa quoziente di un DFA è ciò che si ottiene fondendo insieme alcuni stati del DFA di partenza in base a una relazione d'equivalenza. Quando la relazione usata è quella di stati equivalenti si ottiene il DFA minimo: quindi $Q^{A/\approx}$ sarà una partizione in cui in ogni blocco (sottoinsieme) ci saranno stati equivalenti tra loro (in uno specifico blocco). Ogni blocco è una classe d'equivalenza.

Prefix Tree Acceptor

Si è visto che l'automa quoziente che si ottiene usando la relazione di equivalenza degli stati su un DFA A è il DFA minimo. Analogamente è possibile ottenere il **Prefix Tree Acceptor di I_+** indicato con $PTA(I_+)$ applicando la definizione di

automa quoziente al $MCA(I_+)^2$ con la relazione: *stati che identificano lo stesso prefisso*. Quindi verrà effettuata la fusione degli stati che condividono lo stesso prefisso. Si definisce la relazione d'equivalenza come:

$$p \approx q \Leftrightarrow \text{Prefix}(p) = \text{Prefix}(q)$$

allora:

$$MCA(I_+)/\approx = PTA(I_+)$$

In figura A.3 il PTA ricavato a partite dal MCA di figura A.2 .

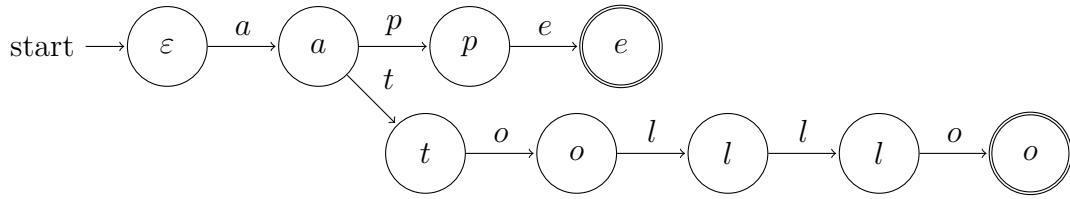


Figura A.3: $PTA(I_+)$ per $I_+ = \{ape, atollo\}$

Automa Universale

Si indica con **UA** *l'automa universale* che accetta tutte le stringhe definite su Σ . Si ha $L(UA) = \Sigma^*$. Ha un unico stato, che è accettabile, con un *self-loop* per ogni simbolo dell'alfabeto.

A.3.2 Funzioni di output regolari

In una sottosezione di A.3.1 si è visto che è possibile ottenere il DFA canonico minimo di un DFA A tramite A/\equiv (l'automa quoziente sulla relazione di stati equivalenti). In questa sezione invece si vedrà come ottenere il DFA canonico minimo non a partire da un DFA preesistente, ma semplicemente sfruttando le proprietà di una funzione di output $\lambda : \Sigma^* \rightarrow \mathbb{B}$ che è la funzione caratteristica di qualche linguaggio regolare.

Relazione di Nerode

Si possono caratterizzare le *funzioni di output regolare* come la classe di funzioni $\lambda : \Sigma^* \rightarrow \mathbb{B}$ per cui un DFA con quella *funzione di output* esiste³. Il famoso teorema *Myhill-Nerode* [30] fornisce una caratterizzazione alternativa delle *funzioni di output regolari*, che non fa affidamento sulla nozione di DFA . Come primo step si definisce la *relazione di Nerode* [30] sulle stringhe che definisce un'equivalenza sulle stringhe secondo λ :

²Anche se tecnicamente può essere un NFA la definizione di automa quoziente può essere applicata comunque

³L'insieme delle funzioni di output regolari identifica la classe dei linguaggi regolari

Definizione A.3 (Relazione di Nerode). Sia $\lambda : \Sigma^* \rightarrow \mathbb{B}$ una funzione di output a due valori arbitraria definita su Σ . Due stringhe $u, u' \in \Sigma^*$ sono equivalenti secondo \simeq_λ ⁴ denotato da $u \simeq_\lambda u'$ se e solo se:

$$\forall v \in \Sigma^* \quad \lambda(uv) = \lambda(u'v)$$

dove $\simeq_\lambda \subseteq \Sigma^* \times \Sigma^*$ è una relazione binaria detta *relazione di Nerode* o *congruenza di Nerode* che definisce l'equivalenza tra stringhe secondo λ

Teorema Myhill-Nerode

La *relazione di Nerode* \simeq_λ può essere vista come l'equivalente a livello di stringhe della relazione di equivalenza $\equiv_A \subseteq Q^A \times Q^A$, sugli stati di un *DFA* A . Dovrebbe essere osservato, tuttavia, che \simeq_λ può essere definito per *funzioni di output* arbitrarie, non solo regolari. Il teorema *Myhill-Nerode* fornisce una caratterizzazione delle *funzioni di output regolari* basata su \simeq_λ :

Teorema A.1 (Teorema Myhill-Nerode o di caratterizzazione). Sia $\lambda : \Sigma^* \rightarrow \mathbb{B}$ una funzione di output a due valori. λ è regolare se e solo se la relazione di Nerode \simeq_λ ha indice finito.

Una dimostrazione del teorema si trova in [42]. L'implicazione in uno dei due versi del teorema dice che se \simeq_λ ha indice finito, allora λ è una *funzione di output regolare* cioè esiste un *DFA* A con $\lambda^A = \lambda$. Questo *DFA* $A = \langle \Sigma, Q^A, q_\epsilon^A, \delta^A, F_\mathbb{A}^A \rangle$ è definito come:

- Σ è il dominio di λ
- $Q^A = \Sigma^* / \simeq_\lambda$
- $q_\epsilon^A = [\epsilon]_{\simeq_\lambda}$
- $F_\mathbb{A}^A = \{[u]_{\simeq_\lambda} \mid \lambda(u) = 1\}$
- $\delta^A([u]_{\simeq_\lambda}, a) = [u \cdot a]_{\simeq_\lambda}$

A è il *DFA* minimo corrispondente al linguaggio identificato da λ . Si osservi come la costruzione del *DFA* A è molto simile alla costruzione del *DFA* minimo usando la relazione di equivalenza sugli stati \equiv usando l'automa quoziente a partire da un *DFA*. Questo approccio alla costruzione degli automi è fondamentale nell'*active learning*.

⁴Si noti che per denotare l'equivalenza non si è usato il simbolo \equiv (equivalenza tra stati) perchè qui si parla di equivalenza tra stringhe

Appendice B

Preliminari e implementazione dell'Observation Pack

Qui si presentano delle ulteriori notazioni inerenti prevalentemente il capitolo 4 e vengono svelati alcuni dettagli implementativi dell'*ObP*.

B.1 Notazione specifica per l'ObP

In questa sezione vi è la delineazione di un'ulteriore notazione utilizzata principalmente nel capitolo 4 in congiunzione a quella introdotta in A, ma che essendo specifica dell'*ObP* viene presentata in quest'appendice. Inoltre vi è anche la presentazione della notazione utilizzata per presentare un framework introdotto in [43] che facilita la comprensione della correttezza e l'implementazione del metodo di gestione del controesempio in *ObP*.

B.1.1 Definizioni

L'*ObP* mantiene un insieme $Sp, prefix-closed$, di **short prefix** detti anche **access sequence**, che sono prefissi. Ogni short prefix identifica unicamente (cioè short prefix diversi identificano stati diversi in H e nel target) gli stati sia nel target A che nell'ipotesi H . Ogni stato $q \in Q^H$ corrisponde unicamente ad una stringa (lo short prefix) $u \in Sp$, ed è assicurato che $H[u] = q$. u è detta l'access sequence di q (in H), ed è denotata da $\lfloor q \rfloor_H$. Alternativamente quanto detto può essere formulato come $\forall q \in Q^H : H[\lfloor q \rfloor_H] = q$. Lo stato iniziale q_ϵ^H è lo stato con access sequence ϵ .

Si estende questa notazione a stringhe arbitrarie $w \in \Sigma^* : \lfloor w \rfloor_H = \lfloor H[w] \rfloor_H$ che significa che w raggiunge uno stato in H e questo stato ha un access sequence u cui w si associa. Quindi la funzione $\lfloor \cdot \rfloor_H : \Sigma^* \rightarrow Sp$ trasforma stringhe in access sequences.

Uno short prefix $u \in Sp$ corrisponde ad uno stato in A , cioè $A[u]$. Ci si riferisce ad $A[Sp]$ come gli stati scoperti (dal *learner*) di A . Gli short prefixes quindi stabiliscono una funzione f_{Sp} che collega stati nell'ipotesi e stati scoperti nel *DFA* target A come

segue:

$$f_{Sp} : Q^H \rightarrow Q^A, f_{Sp}(q) = A[\lfloor q \rfloor_H]$$

B.1.2 Definizioni per il framework

Prefix Transformation

Prefix transformation è una procedura che consente di trasformare un prefisso di un controesempio $w \in \Sigma^+$ in un access sequence in Sp .

Definizione (Prefix Transformation). Prefix transformation rispetto ad H , π_H , è definita come segue:

$$\pi_H : \Sigma^* \times \mathbb{N} \rightarrow \Sigma^*, \pi_H(w, i) = \lfloor w_{[0,i)} \rfloor_H \cdot w_{[i,|w|)}$$

Si osservi che, $\pi_H(w, 0) = w$ e $\pi_H(w, |w|) = \lfloor w \rfloor_H \in Sp$.

Altre definizioni

Sia $w \in \Sigma^{+1}$ un controesempio che differenzia il target A da H . Sia $m = |w|$ ed i un indice $0 \leq i \leq m$ allora si definisce la funzione α come:

$$\alpha : [0, m+1) \rightarrow \mathbb{B}, \alpha(i) = \begin{cases} 1 & \text{se } \lambda^A(\pi_H(w, i)) = \lambda^H(w) \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

Dalla funzione α può essere ricavato anche la definizione della funzione β :

$$\beta : [0, m) \rightarrow \{0, 1, 2\}, \beta(i) = \alpha(i) + \alpha(i+1)$$

B.2 Dettagli implementativi dell' ObP

Vengono ora riportati alcuni dettagli implementativi ritenuti più significativi senza pretesa di esaustività. Per la memorizzazione della funzione OT (definizione 4.2.1) di un componente si è utilizzata una map che tipicamente è nella forma chiave-valore dove nella fattispecie la chiave è una stringa (ottenuta dalla concatenazione di un prefisso con un suffisso) ed il valore è l'esito delle MQ nel target per quella stringa. Qui si è utilizzato per il valore un doppio campo oltre all'esito della MQ costituito da un contatore del numero di volte che quella stringa viene a formarsi in un dato componente (una stessa stringa può essere formata da coppie prefisso-suffisso diverse). Questo è dovuto al fatto che quando si effettua uno split di un componente alcuni dei prefissi del componente migrano nei prefissi del nuovo componente. Oltre all'insieme dei prefissi del componente splittato (che va decrementato) si può modificare anche il dominio della funzione OT restringendolo. Nel codice si è scelto di

¹In ObP ϵ non può essere un controesempio

eliminare la concatenazione del prefisso che migra nel nuovo componente con l'insieme di suffissi del componente splittato, restringendo il dominio di OT. Tuttavia per garantire la correttezza è necessario appurare se quella concatenazione di quel prefisso con un dato suffisso si venga a formare anche tramite altri prefissi perchè in questo caso l'eliminazione non deve avvenire ed è per questo motivo che si usa un contatore per ogni stringa (per ogni concatenazione) che va incrementato ad ogni inserimento di una stringa (anche una già esistente) e decrementato nel caso suddetto. Questa scelta è stata fatta nell'ottica di consentire velocemente di appurare se un componente è chiuso e in generale consentire una ricerca molto veloce di un prefisso in un componente. L'alternativa sarebbe stata quella di non utilizzare il contatore e non eliminare mai la stringa formata dalla concatenazione di un prefisso e di un suffisso ma solo il prefisso dal componente splittato. Ciò porterebbe ad una crescita del dominio di ricerca per la funzione OT che degraderebbe le prestazioni della ricerca di un prefisso in un componente (operazione effettuata sovente) anche se potrebbe comportare una diminuzione del numero delle *MQ* e l'eliminazione dell'*overhead* per tenere aggiornato il contatore: questa prospettiva diminuzione delle *MQ* con questa seconda scelta è però possibile soltanto se quando si completano le componenti, ad esempio nella funzione UPDATE-FROM-COUNTEREXAMPLE prima di effettuare una *MQ* su una stringa *x* si controlli se per *x* non si conosca già l'esito della *MQ* perchè contenuto già nel dominio della funzione OT² anche se nel caso vi fossero molti *miss* questa politica potrebbe essere addirittura controproducente. Anche quest'ulteriore strategia non è stata implementata ritenendo poco probabile un *hit* (per implementarla basta decommentare un *if* in UPDATE-FROM-COUNTEREXAMPLE e aggiungerne un altro nella funzione *sift*). Se si fossero fatte delle scelte opposte a quelle fatte e appena descritte senz'altro si sarebbe potuto abbassare ulteriormente il numero di *MQ* ma si è ritenuto che il gioco non vale la candela cioè che il prezzo da pagare in termini di tempo di esecuzione per ottenere ciò è maggiore del beneficio ottenuto.

Si sottolinea che diversamente dal metodo OBP-SPLIT (algoritmo 13) non viene ritornato il nuovo componente ottenuto perchè il chiamante OBP-CLOSEPACK ne è già a conoscenza, quindi il metodo non ritorna niente.

Infine si prende in esame l'implementazione del discrimination tree. Per quest'ultimo si è scelto di usare un *vector* di nodi e un insieme di archi. Per ogni nodo si memorizza l'etichetta e se è accettante o meno. Gli archi sono un *vector* di array bidimensionali. L'indice di un nodo nel *vector* di nodi è usato per accedere alla posizione nel *vector* di archi che contiene gli indici dei nodi figli (nell'array contenuto nel *vector* di nodi nella posizione individuata dall'indice del nodo). L'utilizzo di un insieme di nodi e di archi è tipico di un grafo piuttosto che di un albero binario. Si è scelta ugualmente questa implementazione essenzialmente per due ragioni:

- La *Standard Template Library* non mette a disposizione nessuna struttura dati per modellare un albero binario. Esistono delle librerie esterne che mettono a disposizione un albero n-ario ma l'*overhead* per gestire *n* figli ed altre

²più è grande il dominio e maggiore sarà la probabilità di ottenere un *hit* per *x*

operazioni inutili ai fini dell'*ObP* ha fatto propendere per il declinare il loro utilizzo. Un'altra possibilità sarebbe stata quella d'implementare un albero binario *ad hoc* nella maniera classica cioè tramite i puntatori ma essendo le prestazioni simili a quelle della soluzione adottata e descritta sopra non lo si è fatto. Inoltre si è supposto che chiamare un oggetto di una classe esterna (quella dell'eventuale implementazione dell'albero binario), dato che va fatto molte volte, sarebbe divenuto il costo preponderante. Il vantaggio principale nell'usare l'implementazione di un albero binario con i puntatori per il discrimination tree sta nel risparmio di memoria circa doppia ma comunque sempre lineare nella soluzione proposta, e che non avviene mai la riallocazione (operazione che accade quando le dimensioni del vettore superano la capacità dello stesso).

- Utilizzare un vettore indicizzato. Questa soluzione è da scartare perchè se il discrimination tree non è bilanciato e presenta un ramo molto più lungo degli altri sarebbe necessario rendere il vettore molto grande. Il vettore può crescere dinamicamente ed è molto più probabile con un vettore indicizzato superare la capacità totale del vettore (se l'inserimento del nodo avviene nello stesso ramo ciò avviene molto velocemente) che verrebbe quindi riallocato e ricopiato frequentemente degradando le prestazioni.

Appendice C

Conoscenze preliminari nell'addestramento dei classificatori

Questa appendice è propedeutica al capitolo 6 e descrive succintamente alcune tecniche basilari di *machine learning* nell'addestramento dei classificatori che saranno impiegate per la costruzione del classificatore che approssima un *Oracolo*. La trattazione non sarà esaustiva ma è volta a fare chiarezza su alcune delle scelte effettuate nel costruire l'*Oracolo approssimato*. Per comprendere appieno quest'appendice è consigliabile leggere prima il capitolo 5.

C.1 Bias-Varianza tradeoff

I concetti di modello, classificatore, classificazione, *training set* e *test set* sono stati introdotti nel capitolo 5. In breve, il compito di un modello è quello di selezionare la funzione tra la famiglia di funzioni $\{f(x, \alpha)\}$ (equazione (5.1)) che da migliori garanzie di predire campioni mai visti. Dati $X = x_1, \dots, x_l$ e le relative etichette $Y = y_1, \dots, y_l$ si assume che c'è qualche relazione tra i due insiemi che può essere espressa come:

$$Y = f(X) + \epsilon \quad (\text{C.1})$$

dove ϵ è un errore casuale a media zero, detto errore irriducibile. $f(\cdot)$ è una funzione ignota che rappresenta il mapping corretto tra ingressi ed etichette ed è necessario scovare la funzione $\hat{f}(\cdot) \in \{f(x, \alpha)\}$ che meglio approssima la reale relazione $f(\cdot)$ tra ingressi ed uscite (le etichette). Si ha inoltre che non si troverà mai $f = \hat{f}$ a causa dell'errore irriducibile. Si usa come misura l'errore quadratico medio (MSE) tra $f(x)$ e $\hat{f}(x)$ per campioni x appartenenti al *test set* dato che quello che interessa minimizzare è l'errore sulle predizioni (è possibile calcolare l'MSE anche su campioni appartenenti al *training set*). Allora seguendo [16] si può dimostrare che l'MSE atteso sul test set valutato per un dato valore x_i è:

$$E[(y_i - \hat{f}(x_i))^2] = \text{Var}(\hat{f}(x_i)) + [\text{Bias}(\hat{f}(x_i))]^2 + \text{Var}(\epsilon). \quad (\text{C.2})$$

dove

$$\begin{aligned} \text{Bias}(\hat{f}(x_i)) &= E[\hat{f}(x_i)] - f(x_i) \\ \text{Var}(\hat{f}(x_i)) &= E[(\hat{f}(x_i) - E[\hat{f}(x_i)])^2] \end{aligned}$$

E è il valore atteso e $E[(y_i - \hat{f}(x_i))^2]$ rappresenta la media degli errori quadratici medi (MSE) sul *test set* che si potrebbe ottenere stimando ripetutamente $f(\cdot)$ (quindi ottenendo varie $\hat{f}(\cdot)$) su tanti *training set* diversi, e valutato ognuno in x_i . Il **bias** rappresenta di quanto la media della nostra stima (in un punto del *test set*) differisce dal valore reale (in quel punto) e si parla di **ottimisticamente biased** se avviene una sovrastima (cioè il valore stimato è maggiore del valore reale) viceversa si parla di **pessimisticamente biased**. Questo concetto si può estendere ad un insieme cioè si dice ad esempio che l'accuracy predetta dal modello trovato sul *training set* è ottimisticamente biased se il nostro modello stima un'accuracy maggiore dell'accuracy reale. La **varianza** invece indica la quantità di cui $\hat{f}(\cdot)$ ci si attende che cambi se noi la stimassimo usando un *training set* differente. Riepilogando un bias alto indica che la predizione fatta dal modello è lontana dal valore corretto e un'alta varianza riferisce che anche piccoli cambiamenti nel *training set* producono grandi cambiamenti di \hat{f} cioè il modello è fortemente influenzato dalla specificità del *training set*. Quindi queste due quantità devono essere minimizzate ma sono in contrapposizione tra esse quando una cresce l'altra decresce ed inoltre sono in stretta relazione con la complessità del modello scelto, come si apprezza in figura C.1 quindi è necessario scegliere il modello che garantisce il giusto compromesso tra le due.

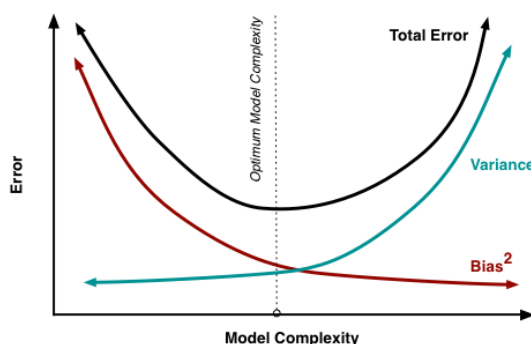


Figura C.1: *Bias-Varianza trade-off*

C.2 Model selection, Model evaluation, algorithm selection

Il workflow nella creazione di un classificatore che funga da predittore per un problema di classificazione supervisionato è tipicamente il seguente:

Algorithm selection E' necessario scegliere il modello¹. Spesso conoscendo pregi e difetti dei vari modelli la selezione avviene manualmente a secondo del modello che sembra più cofacente al problema da risolvere. E' possibile tuttavia effettuare la selezione usando delle tecniche per comparare i vari modelli tra di loro per stabilire quale esibisce le migliori perfomances in base a qualche misura.

Model selection Con l'intento di migliorare le perfomances di generalizzazione è necessario scegliere ,a partire dal *training set*, il classificatore² con le migliori performances, in base a qualche misura , dallo spazio delle ipotesi. A tal fine i modelli hanno uno o più *iperparametri* cioè delle manopole da regolare.

Model evaluation Si vogliono stimare le performances di generalizzazione, le performances predittive (in base a qualche misura) del nostro classificatore basandoci sul *test set*.

Per raggiungere gli obbiettivi suddetti diventa fondamentale stabilire una misura da utilizzare. Nella sezione C.5 vi è una breve panoramica delle misure più note che si possono adottare.

C.2.1 Holdout

Questa è una delle tecniche più semplici ma anche efficaci. Si parte dal caso semplice nel quale si vuole fare solo model evaluation e già si conoscono i parametri migliori e quindi non è neccessario fare model selection. Il principio ispiratore è che fare l'addestramento del classificatore e la sua valutazione sullo stesso insieme produce un'accuracy ottimisticamente biased. **Holdout** divide i campioni disponibili in un *training set* e un *test set* in maniera casuale di solito in maniera 2/3 1/3. Si fa l'addestramento sul *training set* e poi il classificatore ottenuto viene valutato sul *test set*. Infine si rieffettua l'addestramento su tutti i campioni inizialmente disponibili³. Questo metodo ha due grandi limiti:

1. La suddivisione casuale dei campioni in holdout può alterare le proprietà statistiche dei campioni. Questi sono assunti essere estratti dalla stessa distribuzione di probabilità ed essere statisticamente indipendenti. Questa proprietà può venire meno: ad esempio partendo da campioni bilanciati si potrebbero generare *training set* e *test set* non bilanciati.
2. Utilizzare un numero ridotto di campioni (2/3) per effettuare l'addestramento può produrre una stima delle performances pessimisticamente biased. Si ha

¹Malgrado in letteratura si parli di selezione dell'algoritmo e più corretto parlare di selezione di un modello perchè, ad esempio in un modello come *SVM* l'algoritmo rappresenta la specifica tecnica risolutiva utilizzata per affrontare il problema matematico delineato da *SVM*

²Malgrado in letteratura si parli di model selection è un classificatore che va selezionato.

³Riaddestrare alla fine del processo su tutti i campioni possibili è una tecnica valida solo se si è adottata la stratificazione(vedasi C.2.1) nello splitting dei campioni iniziali,perchè assicura che i campioni nei vari insiemi splittati restino statisticamente indipendenti

cioè che il classificatore non ha ancora raggiunto la sua capacità e si potrebbe apprendere un classificatore migliore utilizzando un numero di campioni più grande.

Il primo problema può essere superato usando una tecnica chiamata **stratificazione** che consiste nel suddividere l'insieme di campioni iniziale in due insiemi in modo che il bilanciamento delle classi di campioni con diverse etichette sia ancora rispettato nei risultanti sottoinsiemi. Il secondo problema invece è strutturale in quanto se si usassero tutti i campioni disponibili per l'addestramento poi si dovrebbero valutare le performances su questi stessi campioni producendo stime ottimisticamente biased. Inoltre lo scenario tipico è quello in cui si vuole fare sia model selection che model evaluation. In quest ultimo caso è necessario dividere l'insieme di campioni di partenza in (usando la stratificazione):

- un **training set**
- un **validation set**
- un **test set**

Prima si fa model selection effettuando l'addestramento sul *training set* nello spazio dei parametri. Ad esempio se si usa una tecnica come **grid-search** per ogni parametro vanno scelti i valori oppure il range in cui i valori possono variare e il passo di variazione e poi si deve effettuare l'addestramento per ogni istanza dei parametri. Alla fine ognuno di questi classificatori va valutato in base a qualche misura sui campioni del *validation set* e si seleziona il modello che massimizza tale misura. Quindi in questo modo si scelgono gli iperparametri migliori. A questo punto si riefetta l'addestramento del classificatore risultato migliore usando sia i campioni del *training set* che quelli del *validation set*. A questo punto si fa model evaluation, cioè il classificatore ottenuto viene valutato sul *test set*. Alla fine si riaddestra su tutti i campioni inizialmente disponibili (con l'istanza di parametri trovata). Avendo usato in fase di model evaluation un classificatore addestrato con meno campioni (*training set* e *validation set*) di quelli totali è molto probabile che le misure rilevate siano delle stime pessimisticamente biased.

C.2.2 Validazione incrociata

Con la *cross validation* (validazione incrociata) si supera il limite di holdout che è quello di produrre delle stime pessimisticamente biased. Il principio di funzionamento si basa sulla constatazione che usare un numero di campioni maggiore per l'addestramento tendenzialmente fa diminuire la varianza e anche il bias. Occorre sottolineare che con questa tecnica non otteniamo un predittore ma una misura della qualità del predittore nel generalizzare. Ne esistono molte varianti, una delle più note è **k-fold-validation** che consiste nel suddividere l'insieme di campioni in k folds (cioè insiemi) ed addestrare un classificatore sui campioni di k-1 folds ed usare il restante fold per effettuare la validazione ottenendo una misura d'accuracy. Poi si rifà

la stessa cosa usando però un altro insieme di validazione riaddestrando un predittore sugli altri $k-1$ folds. E così via finché tutti i k folds vengono usati esattamente una volta come insieme di validazione. Infine si fa la media dei k indici di errore ricavati (sono i valori di accuracy) ottenendo una stima della capacità di generalizzare. In questo modo si fanno k addestramenti. L'idea principale che vi sta dietro è che tutti gli elementi dell'insieme hanno l'opportunità di essere testati producendo una misura più attendibile. Un'altra tecnica è **LOO (Leave-one-out cross-validation)** che è uguale a k -fold-validation con k pari alla dimensione dell'insieme quindi l'insieme di validazione di volta in volta sarà composto da un solo elemento ma sarà necessario fare un numero di addestramenti pari al numero di campioni nell'insieme. LOO è da preferire quando l'insieme è particolarmente piccolo. LOO è quasi unbiased quindi ha un bias pessimistico anche minore di k -fold-validation ma esibisce una più grande varianza. Aumentando k il bias decresce (più accurato), la varianza aumenta (più variabilità), il costo computazionale aumenta.

Quindi dovendo fare model selection e model evaluation si suddividono i campioni iniziali in un *training set* e un *test set* (usando la stratificazione) e poi si applica k -fold-validation sul *training set* su ogni istanza degli iperparametri (usando grid-search ad esempio) e si seleziona il migliore classificatore (k -fold-validation assicura una misura più attendibile e quindi una scelta dei parametri e di conseguenza del classificatore presumibilmente migliore). In seguito si effettua l'addestramento sull'intero *training set* con gli iperparametri precedentemente ottenuti e si valuta il classificatore sul *test set* (in quest'ultimo step di solito non si usa l'accuracy ma una delle misure descritte nella C.5 ad esempio). In ultima analisi si effettua un addestramento su tutti i campioni inizialmente disponibili (*training set* e *test set*).

C.2.3 Algorithm selection

Oltre che la selezione del classificatore è possibile anche stabilire quale sia il modello più adatto per un problema specifico in maniera oggettiva. Queste tecniche non sono molto utilizzate perché spesso è il progettista che sceglie un modello piuttosto che un altro in anticipo, scegliendo in base alle caratteristiche del problema stesso il modello che sembra più idoneo. Ed in questa tesi è stato questo il caso dato che si è scelto di usare *SVM* quindi questa sottosezione non sarà approfondita più di tanto. Qui si precisa che si è optato per quest'ultima opzione in quanto il confronto dei vari modelli ne comporta comunque l'implementazione del modello per il problema in questione quindi avrebbe comportato un notevole sforzo implementativo. In questa sede si menziona solo che una delle tecniche più note in tal senso è **nested-cross-validation**.

C.2.4 Boosting

Esistono delle tecniche alternative che si basano sulla combinazione di classificatori e propongono di addestrare T classificatori diversi per lo stesso problema e di combinare i risultati. In generale la combinazione di classificatori, si applica a problemi

ritenuti difficili che danno risultati non soddisfacenti con le tecniche classiche, al fine di ridurre il rischio di *overfitting*. Una di queste tecniche è il **boosting**, il cui obiettivo principale è ridurre il bias, che si basa sull'addestramento sequenziale di un certo numero di classificatori detti deboli che combinati insieme producono un classificatore forte⁴. Per capirne in dettaglio il funzionamento si porta l'esempio di uno degli algoritmi di boosting più noto: AdaBoost descritto per la classificazione binaria. Ogni campione del training set ha un peso w e quei campioni classificati dai classificatori precedenti in modo errato avranno un peso maggiore (al primo passo i pesi sono assunti uniformi, ad esempio tutti pari ad $1/l$). Ad ogni passo t si seleziona il classificatore h_t che riduce l'errore pesato sui campioni del *training set* cioè che minimizza:

$$\epsilon_t = \sum_{\substack{i=1 \\ h_t(x_i) \neq y_i}}^l w_{i,t}$$

Poi si calcola il peso da usare per il classificatore corrente come $\alpha_t = \frac{1}{2} \ln\left(\frac{1-\epsilon_t}{\epsilon_t}\right)$. Invece i pesi per il *training set* da utilizzare al passo successivo a partire dai pesi al passo corrente si otterranno come:

$$w_{i,t+1} = w_{i,t} e^{-y_i h_t(x_i)}$$

Assumendo di usare T classificatori deboli il classificatore forte H_T e la classificazione di un campione del *test set* x , si ottengono come:

$$H_T(x) = \text{sign}\left(\sum_{i=1}^T \alpha_i h_i(x)\right)$$

C.3 Data Preprocessing

Nella maggior parte dei casi i campioni grezzi in input non possono essere usati direttamente. I campioni vanno manipolati al fine di avere delle migliori performance o perchè i campioni sono composti da attributi (gli attributi sono le singole componenti dei campioni) categorici ed il modello presuppone in ingresso attributi numerici.

C.3.1 Codifiche

L'esigenza di adottare una codifica dei campioni deriva quasi sempre dal fatto che il modello adottato richiede in ingresso attributi numerici invece i campioni si compongono di attributi categorici⁵. Qui si descrivono due tipi di codifiche.

⁴Per classificatore debole e forte si intende rispettivamente con scarsa capacità di generalizzare (accuracy leggermente superiore al 50%) e con ottime capacità di generalizzazione

⁵Un esempio di attributo categorico è un componente di un campione che può assumere solo i valori rosso, verde, giallo

Integer Encoding

Per ogni attributo categorico di ogni campione, si associa una specifica categoria ad un numero dell'insieme \mathbb{N} . Ad esempio per l'attributo categorico che rappresenta i colori del semaforo una possibile codifica è:

$$verde \rightarrow 0 \quad (C.3)$$

$$giallo \rightarrow 1 \quad (C.4)$$

$$rosso \rightarrow 2 \quad (C.5)$$

In questo modo il campione $\langle verde, 9 \rangle$ che è composto da due attributi che indicano il colore del semaforo e l'ora viene codificato come $\langle 0, 9 \rangle$ e si osservi che il secondo attributo essendo già numerico non viene codificato.

One Hot Encoding

One Hot Encoding (OHE) (One Hot Encoding) assegna un bit ad ogni classe di un attributo. La lunghezza di questa codifica è quindi il numero di classi dell'attributo. Riproponendo l'esempio della sottosezione C.3.1 una possibile codifica per le classi dell'attributo categorico semaforo è:

$$verde \rightarrow 001 \quad (C.6)$$

$$giallo \rightarrow 010 \quad (C.7)$$

$$rosso \rightarrow 100 \quad (C.8)$$

Se il numero di classi non è troppo grande questa codifica può essere più stabile rispetto a *integer encoding*. Nel caso di campioni codificati con *OHE* non è necessario fare lo **scaling** o la **normalizzazione** (sottosezione C.3.2).

C.3.2 Scaling

Lo **scaling** o **normalizzazione** si rende necessaria quando esistono attributi che variano in un range di valori molto diversi gli uni dagli altri. Infatti se si usa un modello che calcola una distanza, come la distanza euclidea, tra i campioni si ha che l'attributo che ha i valori più grandi domina questa misura rendendo influente il contributo degli altri attributi. Per evitare che ciò avvenga si può riscalare il range degli attributi in modo che varino in $[0,1]$ o in $[-1,1]$. Lo scaling va effettuato per tutti gli attributi ma procedendo per singolo attributo: sia x il vettore associato a uno specifico attributo formato dal valore per quell'attributo di tutti i campioni del *training set*, si che ha un possibile vettore normalizzato x' in $[0, 1]$ si ottiene con:

$$x' = \frac{x - \min(x)}{\max(x) - \min(x)}$$

Questo calcolo va effettuato per tutti gli attributi. Un'altra tecnica di scaling è la **standardizzazione** che calcola la media \bar{x} e la deviazione standard σ del vettore

attributo x ed ottiene il vettore standardizzato x' come:

$$x' = \frac{x - \bar{x}}{\sigma} \quad (\text{C.9})$$

x' sarà a media zero e a varianza unitaria. Questo calcolo va effettuato per ogni attributo. La standardizzazione riduce il range di variazione ma a differenza del precedente non assicura che i dati varino esattamente nel range $[0 \ 1]$. Il pregio della standardizzazione consiste nel fatto che a differenza del primo metodo illustrato è in grado di gestire gli *outliers* cioè un valore di un attributo molto grande rispetto agli altri valori dello stesso attributo. In generale un altro vantaggio di effettuare lo scaling è che rende più veloci alcuni modelli come le *SVM* ad esempio. Inoltre nel caso in cui i dati fossero precedentemente stati codificati con *OHE* lo scaling non si effettua perchè gli attributi avranno valori binari (0 oppure 1 quindi valori già normalizzati). Nei casi pratici per impedire di effettuare una divisione per zero quando la deviazione standard è nulla è necessario aggiungere un valore piccolo. Infine è molto importante scalare i campioni del *test set* con gli stessi valori con cui sono stati scalati i campioni del *training set* in altre parole per scalare il *test set* si devono utilizzare gli stessi valori di media e varianza calcolati e salvati precedentemente per il *training set* invece che calcolarli dal *test set*.

C.3.3 Feature extraction

Feature extraction consiste nell'estrarre dai campioni delle *features*, ossia delle informazioni rilevanti. In alcuni casi accade che i dati originali, o anche sottoposti a codifica o scaling, sono inappropriati per risolvere un determinato problema. In molti frangenti delineare delle *features* idonee al problema consente di ottenere risultati migliori. Analogo è il concetto di *feature selection* in cui una *feature* diventa un sottoinsieme degli attributi originali, mentre in *feature extraction* si applica una qualche trasformazione agli attributi selezionati. Un altro vantaggio insito in questa tecnica è la diminuzione della dimensionalità dello spazio di input individuando e rimuovendo attributi non necessari o ridondanti. Ciò dovrebbe produrre dei modelli meno complessi ed aumentare l'accuracy del predittore.

C.4 Addestrare una SVM

Per incrementare le prestazioni del modello *SVM* esistono delle regole d'oro che andrebbero seguite. Rifacendosi a [20] e [24] si ha che le linee guida per utilizzare le *SVM* al meglio sono le seguenti:

Preprocessing dei campioni *SVM* esige che i campioni da presentare in ingresso siano sotto forma di vettori di numeri reali. Quindi è necessario effettuare:

- **Codifica** Nel caso di attributi categorici ad m classi con m piccolo è conveniente utilizzare una codifica come *OHE* anzichè Integer Encoding. Integer Encoding può essere adottata nel caso in cui m sia grande.

- **Scaling** Lo scaling dei campioni è molto importante con *SVM* non solo per i motivi delineati nella sottosezione C.3.2 (che restano validi) ma anche perchè se si usano alcuni tipi di *kernel* come ad esempio il *kernel polinomiale* valori degli attributi molto grandi possono causare dei problemi numerici (il risultato del prodotto scalare di questo *kernels* produrrà valori troppo grandi per essere rappresentati correttamente). Allora si effettua una normalizzazione nel range $[-1 \ 1]$ o $[0 \ 1]$ oppure una standardizzazione. Si osservi che *kernels* come quello gaussiano sono già normalizzati cioè variano automaticamente in un range predefinito ed in questi casi vengono a cadere i problemi numerici e tecniche come la standardizzazione, nonostante non garantiscono a priori un range prefissato, possono essere convenientemente utilizzate (per impedire che gli attributi che varino in un range più grande dominino gli attributi che varino in un range più piccolo). Se è avvenuta una precedente codifica come *OHE* lo scaling non si applica.

Model selection Nel caso in cui la dimensionalità dei campioni sia molto grande oppure si è applicato un *kernel* che si spera renda i campioni linearmente separabili si potrebbe sperare di usare con fiducia hard margin anche se come detto nel capitolo 5 è spesso consigliabile scegliere comunque soft margin. Si ha quindi che C è un parametro spesso presente anche con dati linearmente separabili. Inoltre si ha che prima di utilizzare un *kernel* adatto a un problema specifico si prova uno di quelli predefiniti e in questo caso la scelta ricade spesso sul *kernel* gaussiano perchè quello sigmoidale rispetta le condizioni di Mercer solo per alcuni valori dei parametri e si dimostra che per alcuni valori dei parametri diventa un sottocaso del *kernel gaussiano*, e quello polinomiale consta di due o tre parametri a dispetto di un parametro nel gaussiano, e anche perchè come detto il *kernel* gaussiano è automaticamente normalizzato e non presenta difficoltà numeriche e tra quelli predefiniti si è dimostrato esibire spesso performances migliori. Quindi il *kernel gaussiano* è di solito consigliato come prima scelta per poi passare a *kernel* “ad hoc” in caso di risultati insoddisfacenti. Un possibile modo di procedere è il seguente:

- **Validazione incrociata** Tipicamente si procede dividendo l'insieme di campioni processato (codifica o scaling) in un *un training set* e un *test set*. Si effettua la validazione incrociata, tipicamente 5-fold-validation o 10-fold-validation, sul *training set*. In questo modo si fa model selection ottenendo un classificatore (e quindi gli iperparametri) che esibisce una accuracy maggiore. Infine si fa **model evaluation** sul *test set* per ottenere una qualche misura e poi si riaddestra *SVM* sull'intero insieme di campioni iniziale
- **Grid-search** Nella procedura descritta immediatamente sopra è necessario scegliere un metodo per la selezione del classificatore migliore nello step di validazione incrociata. La possibilità più semplice è quella di

utilizzare grid-search tuttavia esistono tecniche avanzate che ritornano una stima dell'accuracy della *cross-validation*. Tuttavia quando è possibile (cioè sufficienti risorse computazionali) è preferibile sempre utilizzare grid-search che è una tecnica esaustiva che dà una maggiore affidabilità. Inoltre si ha che la grid-search può essere parallelizzata per incrementare le prestazioni. Inoltre utilizzando il *kernel* gaussiano si hanno solo due parametri C e γ e quindi lo spazio di ricerca dei parametri non è eccessivamente ampio. Una scelta usuale per entrambi i parametri è di scegliere un passo esponenziale. Tipici intervalli sono $C = 2^{-5}, 2^{-3}, \dots, 2^{15}$ e $\gamma = 2^{-15}, 2^{-13}, \dots, 2^3$

C.5 Misure

Per un problema di classificazione binaria è possibile definire la matrice di confusione come in figura C.2 che stabilisce le seguenti quantità numeriche per un predittore binario:

TP(true positive) Campioni positivi predetti dal classificatore come positivi.

TN(true negative) Campioni negativi predetti dal classificatore come negativi.

FP(false positive) Campioni negativi predetti erroneamente dal classificatore come positivi.

FN(false negative) Campioni positivi predetti erroneamente dal classificatore come negativi.

		Prediction	
		Positive	Negative
Actual	Positive	TP	FN
	Negative	FP	TN

Figura C.2: Matrice di confusione per un problema di classificazione binaria

Allora si definisce l'**accuracy** come:

$$Accuracy = \frac{TP + TN}{TP + TN + FP + FN}$$

e quindi indica la percentuale di campioni predetti correttamente rispetto alla totalità. Non è rilevante l'insieme su cui si definiscono la matrice di confusione e le varie misure, ad esempio è possibile calcolare l'accuracy sia sul *training set* che sul *test set*. Inoltre è possibile calcolare la percentuale d'errore facendo:

$$Errore = 1 - Accuracy$$

L'accuracy però non è una misura idonea per due ragioni:

- Se l'insieme su cui si calcola l'accuracy non è bilanciato la misura d'accuracy può essere ingannevole. Ad esempio immaginiamo che il classificatore sia un *majority class* che predice tutti i campioni come positivi e che il *test set* abbia il 90% di campioni positivi e i restanti negativi. In questo caso avremo un'accuracy pari a 0.9 cioè del 90% nonostante il predittore sia pessimo.
- Anche se l'insieme fosse bilanciato, dall'accuracy non si evincerebbe se siano di più i FP oppure i FN, informazione che può essere rilevante.

Per porre rimedio a questi problemi si usano **Precision (positive prediction value)** e **Recall (sensitivity o positive prediction value)** definite come:

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

$$Recall = \frac{TP}{TP + FN}$$

Recall ci dice quanto è buono un classificatore nel predire i campioni positivi (in quanto avendo al denominatore tutti i dati positivi dell'insieme, Recall rappresenta la percentuale di campioni positivi predetta correttamente come tale). Un predittore *majority class* che predice sempre i campioni come positivi (quindi FN=0) può ingannarci massimizzando Recall e rendendolo pari a 1. Precision ci dice quanti dei dati predetti come positivi sono positivi veramente; un predittore può essere ingannevole massimizzando quest'ultima misura se classifica come positivi i campioni dei quali ha una maggiore fiducia che siano positivi e negativi i restanti. Queste due misure non risultano comunque sufficienti nei casi, come questo lavoro, di *IIR* da stringhe in cui risulta rilevante anche come vengono classificati i campioni negativi per cui si utilizzano altre due misure $Precision^-$ (Negative prediction value) e $Recall^-$ (Specificity o true negative rate) [47]:

$$Precision^- = \frac{TN}{TN + FN}$$

$$Recall^- = \frac{TN}{TN + FP}$$

Queste ultime due misure hanno la stessa semantica di Precision e Recall ma sui campioni negativi. Si è accennato che le singole misure di per sè possono ancora essere ingannevoli tuttavia se combinate insieme tali problemi possono essere superati ad esempio se il predittore è un *majorityclass* sempre positivo $Recall = 1$ ma

$Recall^- = 0$ (perchè $TN=0$) e quindi il problema può essere individuato. Inoltre utilizzare delle misure che combinano quelle definite sopra è necessario anche perchè per scegliere in maniera automatica un classificatore rispetto ad un altro è necessario avere un'unica misura. Uno dei criteri più noti e utilizzati è **F1-score (F-measure)** che effettua la media armonica tra Precisione e Recall quindi:

$$F1 = 2 \cdot \frac{Precision \cdot Recall}{Precision + Recall}$$

Questa misura può essere utilizzata al luogo dell'accuracy per insiemi non bilanciati tuttavia non fa ancora al caso nostro perchè non tiene conto dei campioni negativi che nel nostro scenario sono rilevanti. Una possibilità è quella di definire un F1-score anche sulla classe negativa usando la stessa equazione (C.5) con $Precision^-$ e $Recall^-$ e poi mediare le due quantità, tuttavia in questo caso è più adatto e semplice utilizzare un'altra misura **MCC(Matthews correlation coefficient)** definita come:

$$MCC = \frac{TP \cdot TN - FP \cdot FN}{\sqrt{(TP + FP)(TP + FN)(TN + FP)(TN + FN)}}$$

Questa misura è ottima nel caso di dati non bilanciati e rappresenta bene la matrice di confusione ed è sicuramente più adatta di F1-score nel caso in cui sia i campioni positivi che quelli negativi sono rilevanti.

Bibliografia

- [1] John M. Abela. «ETS Learning of Kernel Languages». Tesi di laurea mag. University of New Brunswick, nov. 2002 (cit. a p. 15).
- [2] Dana Angluin. «Learning Regular Sets from Queries and Counterexamples». In: *Inf. Comput.* 75.2 (nov. 1987), pp. 87–106. ISSN: 0890-5401. DOI: [10.1016/0890-5401\(87\)90052-6](https://doi.org/10.1016/0890-5401(87)90052-6) (cit. alle pp. viii, 23, 27, 28, 37).
- [3] Dana Angluin. «Negative results for equivalence queries». In: *Machine Learning Journal* 5 (giu. 1990), pp. 121–150. ISSN: 0885-6125. DOI: [10.1007/BF00116034](https://doi.org/10.1007/BF00116034) (cit. a p. 21).
- [4] Dana Angluin e Carl H. Smith. «Inductive Inference: Theory and Methods». In: *ACM Computing Surveys (CSUR) Journal* 15.3 (set. 1983), pp. 237–269. DOI: [10.1145/356914.356918](https://doi.org/10.1145/356914.356918) (cit. a p. 13).
- [5] Bernhard E. Boser, Isabelle M. Guyon e Vladimir N. Vapnik. «A training algorithm for optimal margin classifiers». In: COLT '92 Proceedings of the fifth annual workshop on Computational learning theory. Lug. 1992, pp. 144–152. DOI: [10.1145/130385.130401](https://doi.org/10.1145/130385.130401) (cit. a p. 71).
- [6] Christopher J.C. Burges. «A Tutorial on Support Vector Machines for Pattern Recognition». In: *Data Mining and Knowledge Discovery* 2 (gen. 1998), pp. 121–167. ISSN: 1573-756X. DOI: [10.1023/A:1009715923555](https://doi.org/10.1023/A:1009715923555). URL: <https://doi.org/10.1023/A:1009715923555> (cit. alle pp. 58, 60).
- [7] Noam Chomsky. «On Certain Formal Properties of Grammars». In: *Information and Computation* II (giu. 1959), pp. 137–167. DOI: [10.1016/S0019-9958\(59\)90362-6](https://doi.org/10.1016/S0019-9958(59)90362-6) (cit. a p. 90).
- [8] Alexander Clark, Christophe Costa Florêncio e Chris Watkins. «Languages as hyperplanes: grammatical inference with string kernels». In: *Machine Learning* 82.3 (mar. 2011), pp. 351–373. ISSN: 1573-0565. DOI: [10.1007/s10994-010-5218-3](https://doi.org/10.1007/s10994-010-5218-3). URL: <https://doi.org/10.1007/s10994-010-5218-3> (cit. a p. 54).
- [9] Alexander Clark et al. «Planar Languages and Learnability». In: *Grammatical Inference: Algorithms and Applications: 8th International Colloquium, ICGI 2006, Tokyo, Japan, September 20-22, 2006. Proceedings*. A cura di Yasubumi Sakakibara et al. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2006, pp. 148–

160. ISBN: 978-3-540-45265-2. DOI: [10.1007/11872436_13](https://doi.org/10.1007/11872436_13). URL: https://doi.org/10.1007/11872436_13 (cit. a p. 54).
- [10] Corinna Cortes e Vladimir Vapnik. «Support-Vector Networks». In: *Machine Learning* 20 (set. 1995), pp. 273–297. ISSN: 0885-6125. DOI: [10.1023/A:1022627411411](https://doi.org/10.1023/A:1022627411411). URL: <https://doi.org/10.1023/A:1022627411411> (cit. a p. 68).
- [11] Pietro Cottone, Marco Ortolani e Gabriele Pergola. «GI-learning: an optimized framework for grammatical inference». In: *CompSysTech '16 Proceedings of the 17th International Conference on Computer Systems e Technologies* 2016. Giu. 2016, pp. 339–346. DOI: [10.1145/2983468.2983502](https://doi.org/10.1145/2983468.2983502) (cit. a p. vii).
- [12] Thomas M. Cover. «Geometrical and Statistical Properties of Systems of Linear Inequalities with Applications in Pattern Recognition». In: *IEEE Transactions on Electronic Computers* 14 (giu. 1965), pp. 326–334. DOI: [10.1109/pgec.1965.264137](http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.366.5645&rep=rep1&type=pdf). URL: <http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.366.5645&rep=rep1&type=pdf> (cit. a p. 75).
- [13] Colin De La Higuera. *Grammatical Inference: Learning Automata and Grammars*. New York, NY, USA: Cambridge University Press, 2010. ISBN: 0521763169 9780521763165 (cit. alle pp. 13, 17, 18, 78, 92).
- [14] Mark E. Gold. «Complexity of automaton identification from given data». In: *Information and Control* 37.3 (giu. 1978), pp. 302–320. DOI: [10.1016/S0019-9958\(78\)90562-4](https://doi.org/10.1016/S0019-9958(78)90562-4) (cit. a p. 15).
- [15] Mark E. Gold. «Language identification in the limit». In: *Information and Control* 10 (mag. 1967), pp. 447–474. DOI: [10.1016/S0019-9958\(67\)91165-5](https://doi.org/10.1016/S0019-9958(67)91165-5) (cit. alle pp. 12, 14).
- [16] Trevor Hastie, Robert Tibshirani e Jerome Friedman. *The Elements of Statistical Learning*. New York, NY, USA: Cambridge University Press, 2009. ISBN: 978-0-387-84858-7 (cit. a p. 102).
- [17] J.E. Hopcroft e R.M. Karp. *A Linear Algorithm for Testing Equivalence of Finite Automata*. Rapp. tecn. Cornell University, dic. 1971. URL: <http://hdl.handle.net/1813/5958> (cit. a p. 29).
- [18] J.E. Hopcroft, R. Motwani e J.D. Ullman. *Introduction to Automata Theory, Languages, and Computation*. 2^a ed. Pearson/Addison Wesley, 2007, p. 153. ISBN: 9780201441246 (cit. a p. 30).
- [19] Falk M. Howar. «Active learning of interface programs». Tesi di dott. Technischen Universität Dortmund, 2012, pp. 9–23. DOI: [2003/29486](https://doi.org/10.203/29486) (cit. alle pp. vii, viii, 31, 47, 48, 51).
- [20] Chih-wei Hsu, Chih-chung Chang e Chih-jen Lin. *A practical guide to support vector classification*. 2010. URL: <http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/summary?doi=10.1.1.224.4115> (cit. a p. 109).

- [21] Michael J. Kearns e Umesh V. Vazirani. *An Introduction to Computational Learning Theory*. Cambridge, MA, USA: MIT Press, 1994. ISBN: 0-262-11193-4 (cit. alle pp. 31, 37).
- [22] Leonid (Aryeh) Kontorovich, Corinna Cortes e Mehryar Mohri. «Kernel Methods for Learning Languages». In: *Theoretical Computer Science* 405.3 (ott. 2008), pp. 223–236. ISSN: 0304-3975. DOI: [10.1016/j.tcs.2008.06.037](https://doi.org/10.1016/j.tcs.2008.06.037). URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.tcs.2008.06.037> (cit. a p. 54).
- [23] Leonid (Aryeh) Kontorovich e Boaz Nadler. «Universal Kernel-Based Learning with Applications to Regular Languages». In: *The Journal of Machine Learning Research* 10 (giu. 2009), pp. 1095–1129. URL: <http://dl.acm.org/citation.cfm?id=1577069.1577108> (cit. a p. 54).
- [24] Neeraj Kumar. 2014. URL: <https://neerajkumar.org/writings/svm/> (cit. a p. 109).
- [25] Kevin J. Lang, Barak A. Pearlmutter e Rodney A. Price. «Results of the Abbadingo One DFA Learning Competition and a New Evidence Driven State Merging Algorithm». In: *Proceedings of the 4th International Colloquium on Grammatical Inference, ICGI 1998*. London, UK: Springer-Verlag, mag. 1998, pp. 1–12. URL: <http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/summary?doi=10.1.1.48.7621> (cit. alle pp. 17, 18).
- [26] Willem J.M. Levelt. *Formal Grammars in Linguistics and Psycholinguistics*. Vol. I. John Benjamins Publishing Company, 2008. ISBN: 9789027290069. DOI: [10.1075/z.144](https://doi.org/10.1075/z.144) (cit. a p. 91).
- [27] Ryszard Si Michalski. «Concept learning». In: *Encyclopedia of Artificial Intelligence*. A cura di Stuart C. Shapiro. Vol. I. Wiley-Interscience Publications, gen. 1986, pp. 185–194 (cit. alle pp. vii, 3, 5, 10, 11).
- [28] Ryszard Si Michalski. «Inferential theory of learning: Developing foundations for multistrategy learning». In: *Machine Learning: a Multistrategy Approach*. Vol. IV. Morgan Kauffman Inc., 1993 (cit. alle pp. 6, 7).
- [29] Ryszard Si Michalski. «Understanding the nature of learning: Issue and research direction». In: *Machine Learning, an Artificial Intelligence Approach*. A cura di S. Ryszard Michalski, G. Jaime Carbonell e M. Tom Mitchell. Vol. II. Morgan Kaufmann, 1986. ISBN: 0-934613-00-1 (cit. a p. 2).
- [30] Anil Nerode. «Linear Automaton Transformations». In: vol. 9. *Proceedings of the American Mathematical Society*. Ago. 1958, pp. 541–544. DOI: [10.1090/S0002-9939-1958-0135681-9](https://doi.org/10.1090/S0002-9939-1958-0135681-9) (cit. a p. 96).
- [31] Andrew Ng. «Support Vector Machines» (cit. a p. 60).
- [32] Daphne Norton. «Algorithms for testing equivalence of finite automata, with a grading tool for JFLAP». Tesi di laurea mag. Rochester Institute of Technology, mar. 2009, pp. 19–31. URL: <http://scholarworks.rit.edu/theses/6939/> (cit. a p. 29).

- [33] Jose Oncina e Pedro Garcia. «Identifying Regular Languages In Polynomial Time». In: *Advances in structural and Syntactic Pattern Recognition*. Vol. 5. Machine Perception and artificial intelligence. World Scientific, 1992, pp. 99–108. URL: <http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/summary?doi=10.1.1.20.3126> (cit. alle pp. 17, 18).
- [34] Edgar E. Osuna, Robert Freund e Federico Girosi. *Support Vector Machines: Training and Applications*. Rapp. tecn. Cambridge, MA, USA, mar. 1997. URL: <http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.41.418&rep=rep1&type=pdf> (cit. a p. 60).
- [35] T. Pao e Carr J.W. «A solution of the syntactical induction-inference problem for regular languages». In: *Computer Languages* 3.1 (giu. 1978), pp. 53–64. DOI: [10.1016/0096-0551\(78\)90006-1](https://doi.org/10.1016/0096-0551(78)90006-1) (cit. a p. 16).
- [36] Ronald L. Rivest e Robert E. Schapire. «Inference of Finite Automata Using Homing Sequences». In: *Information and Computation* 103 (apr. 1993), pp. 299–347. ISSN: 0890-5401. DOI: [10.1006/inco.1993.1021](https://doi.org/10.1006/inco.1993.1021) (cit. alle pp. 31, 37, 39).
- [37] M. Raphael Robinson. «Primitive recursive functions». In: *Bulletin of the American Mathematical Society* 53 (1947), pp. 925–942. DOI: [10.1090/S0002-9904-1947-08911-4](https://doi.org/10.1090/S0002-9904-1947-08911-4) (cit. a p. 92).
- [38] José Sempere e Pedro Garcia, cur. *Grammatical Inference: Theoretical Results and Applications*. Proceedings of the 10th International Colloquium on Grammatical Inference, ICGI 2010. Set. 2010 (cit. a p. 17).
- [39] John Shawe-Taylor e Nello Cristianini. *Kernel Methods for Pattern Analysis*. New York, NY, USA: Cambridge University Press, 2004. ISBN: 0521813972 (cit. a p. 78).
- [40] Herbert A. Simon. «Why should machine learn?» In: *Machine Learning, an Artificial Intelligence Approach*. A cura di Mitchell, Michalski e Carbonel. Vol. I. Tioga Publishing Company, 1983, pp. 25–37 (cit. a p. 1).
- [41] Bernhard Steffen, Falk M. Howar e Malte Isberner. «The TTT Algorithm: A Redundancy Free Approach to Active Automata Learning». In: *Runtime Verification*. A cura di Bonakdarpour e Smolka. Vol. 8734. Lecture Notes in Computer Science. Springer, 2014, pp. 307–322. ISBN: 978-3-319-11163-6. DOI: [10.1007/978-3-319-11164-3](https://doi.org/10.1007/978-3-319-11164-3) (cit. a p. vii).
- [42] Bernhard Steffen, Falk M. Howar e Mike Merten. «Introduction to Active Automata Learning from a Practical Perspective». In: *Formal Methods for Eternal Networked Software Systems*. A cura di Bernanrdo e Issarny. Vol. 6659. Lecture Notes in Computer Science. Springer Verlag, 2011, pp. 256–259. ISBN: 978-3-642-21455-4. DOI: [10.1007/978-3-642-21455-4_8](https://doi.org/10.1007/978-3-642-21455-4_8) (cit. alle pp. 47, 52, 97).

- [43] Bernhard Steffen e Malte Isberner. «An Abstract Framework for Counterexample Analysis in Active Automata Learning». In: a cura di A. Clark, M. Kanazawa e R. Yoshinaka. Vol. 34. Proceedings of the International Conference on Grammatical Inference, ICGI 2014. Kyoto, Japan, set. 2014, pp. 79–93. URL: <http://jmlr.org/proceedings/papers/v34/isberner14a.pdf> (cit. alle pp. 37, 39, 98).
- [44] L.G. Valiant. «A theory of the learnable». In: *Information and Control* 27.11 (nov. 1984), pp. 1134–1142. DOI: [10.1145/1968.1972](https://doi.org/10.1145/1968.1972) (cit. a p. 12).
- [45] Vladimir N. Vapnik. *Estimation of Dependences Based on Empirical Data*. New York, NY, USA: Springer-Verlag, 1982. ISBN: 0387907335 (cit. a p. 58).
- [46] Vladimir N. Vapnik. *The nature of statistical learning theory*. A cura di M. Jordan e Steffen L. Lauritzen. New York, NY, USA: Springer-Verlag, 1995. ISBN: 0-387-94559-8 (cit. alle pp. 55, 56).
- [47] Neil Walkinshaw, Kirill Bogdanov e Ken Johnson. «Evaluation and Comparison of Inferred Regular Grammars». In: *Proceedings of the 9th International Colloquium on Grammatical Inference: Algorithms and Applications*. ICGI '08. Saint-Malo, France: Springer-Verlag, 2008, pp. 252–265. ISBN: 978-3-540-88008-0. DOI: [10.1007/978-3-540-88009-7_20](https://doi.org/10.1007/978-3-540-88009-7_20). URL: http://dx.doi.org/10.1007/978-3-540-88009-7_20 (cit. a p. 112).
- [48] Dong Zhuang et al. «Efficient Text Classification by Weighted Proximal SVM». In: *ICDM '05 Proceedings of the Fifth IEEE International Conference on Data Mining*. Nov. 2005, pp. 538–545. DOI: [10.1109/ICDM.2005.56](https://doi.org/10.1109/ICDM.2005.56) (cit. a p. 81).

Indice analitico

induzione, [1](#)