

Statistical methods for machine learning

Mauro Tellaroli

Indice

1	Introduzione	3
1.1	Definizioni fondamentali	3
1.1.1	<i>Label set</i> \mathcal{Y}	3
1.1.2	<i>Loss function</i> ℓ	3
1.1.3	<i>Data domain</i> \mathcal{X}	4
1.1.4	Predittori f	5
1.1.5	Esempi	5
1.1.6	<i>Test set</i> e <i>test error</i>	5
1.1.7	<i>Learning algorithm</i> A	5
1.1.8	<i>Training error</i> ℓ_S	5
1.2	Empirical Risk Minimization (ERM)	6
1.2.1	Definizione	6
1.2.2	Predittori con <i>test error</i> elevato	6
1.2.3	<i>Overfitting</i> e <i>underfitting</i>	7
1.2.4	Etichette rumorose	7
2	Gli algoritmi <i>Nearest Neighbor</i>	8
2.1	<i>Nearest Neighbor</i> (NN)	8
2.1.1	Definizione	8
2.1.2	Efficienza ed efficacia	9
2.2	k - <i>Nearest Neighbor</i> (k -NN)	9
2.2.1	Definizione	9
2.2.2	Efficienza ed efficacia	9
3	<i>Tree Predictors</i>	11
3.1	Definizione	11
3.2	Costruzione di un <i>tree predictor</i>	12
3.2.1	Idea generale	12
3.2.2	<i>Training error</i>	12
3.2.3	Crescita dell'albero e <i>training error</i>	14
3.2.4	Algoritmo generale	15
3.3	<i>Overfitting</i>	15
3.4	Interpretabilità	16
4	<i>Statistical Learning</i>	17
4.1	Definizioni	17
4.1.1	Rischio statistico $\ell_{\mathcal{D}}$	17
4.1.2	Predittore ottimo di Bayes f^*	17
4.1.3	Rischio condizionato	17
4.1.4	Rischio di Bayes $\ell_{\mathcal{D}}(f^*)$	17
4.2	f^* e $\ell_{\mathcal{D}}$ nelle varie <i>loss function</i>	17
4.2.1	<i>Quadratic loss</i>	18
4.2.2	<i>Zero-one loss</i>	19
4.3	Limitare il rischio	19

4.3.1	Stima del rischio	19
4.3.2	Chernoff-Hoeffding	20
4.4	Decomposizione <i>bias-variance</i>	21
4.5	<i>Overfitting</i> e <i>underfitting</i>	21
5	Analisi del rischio sui <i>tree predictor</i>	25
5.1	Limitare il numero di nodi	25
5.2	Limite superiore più dettagliato	26
5.2.1	<i>Structural Risk Minimization</i> (SRM)	26
5.2.2	Funzione peso w	26
6	Iperparametri e stima del rischio	28
6.1	Valutazione tramite <i>cross-validation</i> esterna	28
6.2	Modifica degli iperparametri	28
6.3	Modifica dei parametri tramite <i>nested cross-validation</i>	29
7	Consistenza e algoritmi non parametrici	30
7.1	Consistenza	30
7.2	Algoritmi non parametrici	30
7.2.1	k -NN	30
7.2.2	Algoritmo greedy per <i>tree classifier</i>	30
7.3	Algoritmi non consistenti e non parametrici	31
7.3.1	Teorema <i>No Free Lunch</i>	31
7.4	Maledizione della dimensionalità	31
8	Analisi del rischio per gli algoritmi NN	32
8.1	Rischio statistico di 1-NN	32
9	Predittori lineari	33
9.1	Iperpiani	33
9.2	<i>Training</i> di classificatori lineari	33

1 Introduzione

1.1 Definizioni fondamentali

La *data inference* è lo studio dei metodi che utilizzano i dati per predire il futuro. Il *Machine Learning* è uno strumento potente che può essere usato per risolvere una grossa parte dei problemi di *data inference*, inclusi i seguenti:

- **Clustering**: raggruppare i *data points* in base alle loro similarità;
- **Prediction**: assegnare delle etichette (*label*) ai *data points*;
- **Generation**: generare nuovi *data points*;
- **Control**: eseguire una sequenza di azioni in un ambiente con l'obiettivo di massimizzare una nozione di utilità.

Con *data point* si intende una serie di informazioni legate ad un unico elemento; un'analogia può essere un *record* in un database.

Gli algoritmi che risolvono una *learning task* in base a dei dati già semanticamente etichettati lavorano in modalità ***supervised learning***. A etichettare i dati saranno delle persone o la natura. Un esempio dell'ultimo caso sono le previsioni del meteo. D'altra parte, gli algoritmi che utilizzano i dati senza la presenza di etichette lavorano in modalità ***unsupervised learning***.

In questo corso ci si focalizzerà sul *supervised learning* e la progettazione di sistemi di *machine learning* il cui obiettivo è apprendere dei **predittori**, ovvero funzioni che mappano i *data points* alla loro etichetta.

1.1.1 Label set \mathcal{Y}

Verrà usata \mathcal{Y} per indicare il *label set*, ovvero l'insieme di tutte le possibili etichette di un *data point*. Le etichette potranno essere di due tipi differenti:

1. **Categoriche** ($\mathcal{Y} = \{\text{sport, politica, economia}\}$): si parlerà di problemi di **classificazione**;
2. **Numeriche** ($\mathcal{Y} \subseteq \mathbb{R}$): si parlerà di problemi di **regressione**.

È importante sottolineare come la reale differenza tra le due tipologie di etichetta sia il significato e non la sua rappresentazione in quanto, si potrà sempre codificare un'etichetta categorica in un numero.

A sottolineare ciò è il fatto che nella regressione l'errore è tipicamente una funzione della differenza $|y - \hat{y}|$, dove \hat{y} è la predizione di y . Nella classificazione, invece, l'errore è tipicamente binario: predizione corretta ($\hat{y} = y$) o errata ($\hat{y} \neq y$).

Quando ci sono solo due possibili etichette ($|\mathcal{Y}| = 2$), si ha un **problema di classificazione binario** e, convenzionalmente, verrà usata una codifica numerica $\mathcal{Y} = \{-1, 1\}$.

1.1.2 Loss function ℓ

Come già visto precedentemente, si vuole misurare l'errore che un predittore commette su una determinata predizione. Per farlo si userà una **funzione di loss** ℓ non negativa che misurerà la discrepanza $\ell(y, \hat{y})$ tra l'etichetta predetta \hat{y} e quella corretta y . Si assumerà sempre $\ell(y, \hat{y}) = 0$ quando $\hat{y} = y$.

La funzione di loss più semplice per la classificazione è la **zero-one loss**:

$$\ell(y, \hat{y}) = \begin{cases} 0 & y = \hat{y} \\ 1 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

Nella regressione, le tipiche funzioni di loss sono:

- la **absolute loss**: $\ell(y, \hat{y}) = |y - \hat{y}|$

- la **quadratic loss**: $\ell(y, \hat{y}) = (y - \hat{y})^2$

In alcuni casi può essere conveniente scegliere l'etichetta predetta da un insieme \mathcal{Z} diverso da \mathcal{Y} . Per esempio, si consideri il problema di assegnare una probabilità $\hat{y} \in (0, 1)$ all'evento $y = \text{"pioverà domani"}$. In questo caso, $\mathcal{Y} = \{\text{"piove", "non piove"}\}$ e $\mathcal{Z} = (0, 1)$. Indicando questi due eventi con 1 (piove) e 0 (non piove), si può usare una funzione di loss per la regressione, come la *absolute loss*:

$$\ell(y, \hat{y}) = |y - \hat{y}| = \begin{cases} 1 - \hat{y} & y = 1 \quad (\text{piove}) \\ \hat{y} & y = 0 \quad (\text{non piove}) \end{cases}$$

Per penalizzare maggiormente le predizioni che distano troppo dalla realtà, si può usare una **logarithmic loss**:

$$\ell(y, \hat{y}) = \begin{cases} \ln \frac{1}{\hat{y}} & y = 1 \quad (\text{piove}) \\ \ln \frac{1}{1-\hat{y}} & y = 0 \quad (\text{non piove}) \end{cases}$$



Figura 1: Confronto tra *absolute loss* e *logarithmic loss*; a sinistra il caso $y = 0$, a destra $y = 1$.

Si noti in figura 1 come la *logarithmic loss* tenda ad infinito quando la predizione è opposta all'etichetta reale:

$$\lim_{\hat{y} \rightarrow 1^-} \ell(0, \hat{y}) = \lim_{\hat{y} \rightarrow 0^+} \ell(1, \hat{y}) = +\infty$$

In pratica questo previene l'utilizzo di predizioni \hat{y} troppo sicure, quindi troppo vicine a zero o uno.

1.1.3 Data domain \mathcal{X}

Verrà usata \mathcal{X} per indicare l'insieme dei *data points*; ogni suo punto $x \in \mathcal{X}$ è tipicamente un record di un database formato da *feature*:

$$x = (x_1, \dots, x_d)$$

Spesso un *data point* può essere codificato come un vettore i cui elementi sono le sue *feature*. Questa codifica risulta naturale in presenza di quantità omogenee, come i pixel di un'immagine o una lista di occorrenze di parole in un testo. Quando invece i dati presenti utilizzano unità di misura differenti, come "età" e "altezza", la codifica non risulta più immediata. Ci sarà bisogno di una procedura che codifichi i dati in modo da ottenere uno spazio vettoriale omogeneo e coerente con i dati iniziali.

In questo corso si assumerà che i dati possano essere rappresentati da vettori di numeri:

$$\mathcal{X} \equiv \mathbb{R}^d$$

1.1.4 Predittori f

Un **predittore** è una funzione $f : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ che mappa i *data points* alle etichette (o $f : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Z}$). Si può quindi dire che in un problema di predizione l'obiettivo è ottenere una funzione f che genera delle predizioni $\hat{y} = f(x)$ tali che $\ell(y, \hat{y})$ sia basso per il maggior numero di punti $x \in \mathcal{X}$ osservati. In pratica, **la funzione f è definita da un certo numero di parametri in un dato modello**. Un esempio sono i parametri di una rete neurale.

1.1.5 Esempi

Nel *supervised learning* un **esempio** è una coppia (x, y) dove x è un *data point* e y la sua reale etichetta.

In alcuni casi x ha un'unica y , come nel caso in cui y rappresenta una proprietà oggettiva di x ; in altri casi, invece, x può avere diverse y associate, come quando le y sono soggettivamente assegnate da persone.

1.1.6 Test set e test error

Per poter stimare la qualità di un predittore si usa un insieme di esempi detto **test set**:

$$\{(x'_1, y'_1), \dots, (x'_n, y'_n)\}$$

Data una *loss function* ℓ , il *test set* viene usato per calcolare il **test error** $\ell_{S'}$ di un predittore f :

$$\ell_{S'}(f) = \frac{1}{n} \sum_{t=1}^n \ell(\underbrace{y'_t}_{\text{reale}}, \underbrace{f(x'_t)}_{\text{predetta}})$$

Il *test error* ha quindi lo scopo di calcolare la prestazione media del predittore su dei dati reali.

1.1.7 Learning algorithm A

Si definisce *training set* S un insieme di esempi:

$$S = \{(x_1, y_1), \dots, (x_m, y_m)\}$$

che viene usato dal **learning algorithm** A per produrre un predittore $A(S)$. Informalmente, il *learning algorithm* “impara” dal *training set*.

$$\underbrace{\{(x_1, y_1), \dots, (x_m, y_m)\}}_S \longrightarrow \boxed{A \overset{\ell}{}} \longrightarrow A(S) = f : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$$

Il *test set* e il *training set* vengono solitamente prodotti assieme attraverso un processo di collezione dati e etichettamento. Dato l'insieme di esempi preparati, questo verrà partizionato in *test set* e *training set*, tipicamente tramite una divisione casuale. **Obiettivo del corso è lo sviluppo di una teoria che ci guidi nella progettazione di learning algorithm che generano predittori con un basso test error.**

1.1.8 Training error ℓ_S

Sia $S = \{(x_1, y_1), \dots, (x_m, y_m)\}$ il *training set*; viene definito, equivalentemente al *test error*, il **training error**:

$$\ell_S(f) = \frac{1}{m} \sum_{t=1}^m \ell(y_t, f(x_t))$$

Un approccio intuitivo alla progettazione di *learning algorithm* è quello di assumere che il *training error* $\ell_S(f)$ del predittore f sia correlato con il suo *test error*.

1.2 Empirical Risk Minimization (ERM)

1.2.1 Definizione

Sia \mathcal{F} un insieme di predittori e ℓ una *loss function*. L'*empirical risk minimizer* (ERM) è il *learning algorithm* A che restituisce un predittore in \mathcal{F} che **minimizza il *training error***:

$$A(S) \in \operatorname{argmin}_{f \in \mathcal{F}} \ell_S(f)$$

Si noti come $A(S)$ appartenga e non uguagli il minimo; questo perchè ci potrebbero essere più $f \in \mathcal{F}$ che minimizzano $\ell_S(f)$.

1.2.2 Predittori con *test error* elevato

Quando in \mathcal{F} tutti i predittori hanno un *test error* alto, ERM produrrà un pessimo predittore. **Per trovare un buon predittore, ovvero un predittore con un *test error* basso, ci sarà quindi bisogno che \mathcal{F} sia sufficientemente grande.**

Tuttavia, se \mathcal{F} è troppo grande, anche in questo caso verrà prodotto un pessimo predittore. Un esempio è il seguente.

Si consideri il seguente problema “giocattolo”:

$$\mathcal{Y} = \{-1, 1\} \quad \mathcal{X} = \{x_1, x_2, x_3, x_4, x_5\}$$

Si prenda l'insieme \mathcal{F} contenente un classificatore $f : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ per ognuna delle possibili combinazioni di etichettamento dei cinque *data points*. \mathcal{F} sarà quindi formata da $2^5 = 32$ classificatori:

$$\mathcal{F} = \{f_1, \dots, f_{32}\}$$

\mathcal{F}	$f(x_1)$	$f(x_2)$	$f(x_3)$	$f(x_4)$	$f(x_5)$
f_1	1	1	1	1	1
f_2	1	1	1	1	-1
f_3	1	1	1	-1	1
f_4	1	1	1	-1	-1
f_5	1	1	-1	1	1
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
f_{31}	-1	-1	-1	-1	1
f_{32}	-1	-1	-1	-1	-1

Si supponga che il *training set* S contenga solo tre *data points* qualsiasi e il *test set* contenga gli altri due. Sia f^* il predittore usato per etichettare i dati che quindi avrà zero *test e training error*; ogni etichetta y_t sarà quindi ottenuta da f^* :

$$y_t = f^*(x_t) \quad \forall t = 1, \dots, 5$$

Per rendere l'idea, si prenda come esempio:

$$f^* = f_3$$

$$\begin{aligned} S &= \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), (x_3, y_3)\} \\ &= \{(x_1, 1), (x_2, 1), (x_3, 1)\} \end{aligned}$$

Nonostante ad avere *test error* nullo sia solo f_3 , ad avere il *training error* nullo sono i quattro classificatori che hanno $y_1, y_2, y_3 = 1$ ovvero f_1, f_2, f_3, f_4 . Questo perchè il *training set* S contiene solo i primi 3 *data points*.

Siamo quindi nella situazione in cui ERM trova più predittori con ℓ_S minimo e non ha abbastanza informazioni per capire quale di questi sia migliore a livello di *test error*.

Il problema dell'esempio appena visto è che \mathcal{F} è troppo grande rispetto al *training set*. La domanda che sorge spontanea è quindi: Quanto deve essere grande \mathcal{F} per poter ottenere un buon predittore tramite ERM?

La teoria dell'informazione ci suggerisce che S debba avere cardinalità $\log_2 |\mathcal{F}|$ o, viceversa, \mathcal{F} debba avere cardinalità 2^m . Quindi, nell'esempio di prima, il *training set* avrebbe dovuto contenere almeno $\log_2 |\mathcal{F}| = 5$ *data points*.

1.2.3 Overfitting e underfitting

I due eventi visti nella sezione precedente, che portano alla generazione di un predittore con *test set* elevato, vengono chiamati:

- **Underfitting**: si verifica quando il *training error* è elevato;
- **Overfitting**: si verifica quando il *training error* è basso ma il *test error* è alto.

Quando A è ERM e S ha dimensione fissata $|S| = m$:

- Ci si aspetta *overfitting* quando $\log_2 |\mathcal{F}| \gg m$;
- Ci si aspetta *underfitting* quando $\log_2 |\mathcal{F}| \ll m$.

1.2.4 Etichette rumorose

Il fenomeno dell'*overfitting* spesso accade quando le etichette sono rumorose, ovvero quando le etichette y non sono deterministicamente associate con i *data points* x . Questo può accadere per i seguenti motivi (non mutuamente esclusivi tra loro):

1. **Incertezza umana**: se ad etichettare S sono delle persone, ci sarà dell'incertezza in quanto persone diverse potrebbero avere opinioni diverse;
2. **Incertezza epistemica**: ogni *data point* è rappresentato da un vettore delle *feature* che non contiene abbastanza informazioni per determinare univocamente l'etichetta;
3. **Incertezza aleatoria**: il vettore delle *feature* che rappresenta il *data point* è ottenuto attraverso delle misurazioni rumorose.

Le etichette rumorose portano all'*overfitting* perchè possono ingannare l'algoritmo su quale sia la "vera" etichetta di una certo *data point*.

2 Gli algoritmi *Nearest Neighbor*

2.1 *Nearest Neighbor* (NN)

2.1.1 Definizione

Verrà introdotto ora l'algoritmo di *Nearest Neighbor* (NN) per la classificazione binaria con *feature* numeriche:

$$\mathcal{X} = \mathbb{R}^d \quad \mathcal{Y} = \{-1, 1\}$$

NN non è un'istanza di ERM in quanto non punta a minimizzare ℓ_S .

L'idea di NN è la seguente:

- Predici ogni punto del *training set* con la propria etichetta;
- Predici gli altri punti con l'etichetta del punto del *training set* che è più vicino al punto interessato.

Più formalmente, dato un *training set*:

$$S = \{(x_1, y_1), \dots, (x_m, y_m)\}$$

l'algoritmo A_{NN} genera un classificatore $h_{NN} : \mathbb{R} \rightarrow \{-1, 1\}$ definito come segue:

$$h_{NN}(x) = \text{etichetta } y_t \text{ del punto } x_t \in S \text{ più vicino a } x$$

Se a minimizzare la distanza con x sono più punti, si predirà l'etichetta più presente tra i punti vicini. Se non c'è una maggioranza di etichette tra i punti più vicini si predirà un valore di default $\in \{-1, 1\}$.

Presi due punti $x = (x_1, \dots, x_d)$ e $x_t = (x_{t,1}, \dots, x_{t,d})$, la distanza $\|x - x_t\|$ verrà calcolata tramite la distanza euclidea:

$$\|x - x_t\| = \sqrt{\sum_{i=1}^d (x_i - x_{t,i})^2}$$

Ogni classificatore binario $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \{-1, 1\}$ partiziona \mathbb{R}^d in due regioni (come mostrato in figura 2):

$$\{x \in \mathbb{R}^d : f(x) = 1\} \quad , \quad \{x \in \mathbb{R}^d : f(x) = -1\}$$

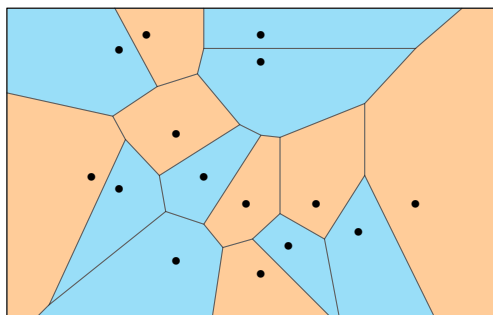


Figura 2: Diagramma di Voronoi in \mathbb{R}^2 ; tutti i punti x interni a una cella con centro $\bullet x_t$ sono tali che $h_{NN}(x) = y_t$

2.1.2 Efficienza ed efficacia

Siccome il funzionamento di NN implica la memorizzazione di tutto il *training set*, **l'algoritmo non scala bene con il numero di $|S| = m$ di *training point***. Inoltre, calcolare un qualsiasi $h_{\text{NN}}(x)$ è costoso, in quanto richiede di calcolare la distanza tra x e tutti gli altri punti di S ; questo in \mathbb{R}^d comporta un costo di $\Theta(dm)$.

Infine, si noti come, vista la completa memorizzazione di S , **NN generi sempre un classificatore h_{NN} con *training error* nullo:**

$$\ell_S(h_{\text{NN}}) = 0$$

2.2 k -Nearest Neighbor (k -NN)

2.2.1 Definizione

Partendo dagli algoritmi NN, si può ottenere una famiglia di algoritmi detta k -NN; il parametro k assume tipicamente i valori $k = 1, 3, 5, \dots$ con $k < |S|$.

Questi algoritmi sono definiti come segue: dato un *training set* S e un punto $x \in \mathcal{X}$, k -NN genererà un predittore $h_{k\text{-NN}}$ tale che:

$$h_{k\text{-NN}}(x) = \text{etichetta } y_t \text{ appartenente alla maggioranza dei } k \text{ punti più vicini a } x$$

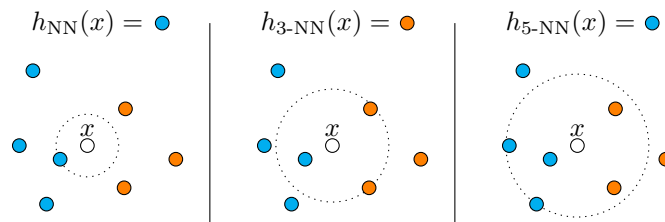


Figura 3: Esempi di $h_{k\text{-NN}}$ con $\mathcal{X} = \mathbb{R}^2$; si noti come, con lo stesso *training set*, la predizione cambia al variare di k .

2.2.2 Efficienza ed efficacia

A livello di efficienza k -NN soffre degli stessi problemi di NN vista la memorizzazione dell'intero *training set*.

Per quanto riguarda la sua efficacia invece, k -NN non ha sempre un *training error* nullo:

$$\ell_S(h_{k\text{-NN}}) \geq 0$$

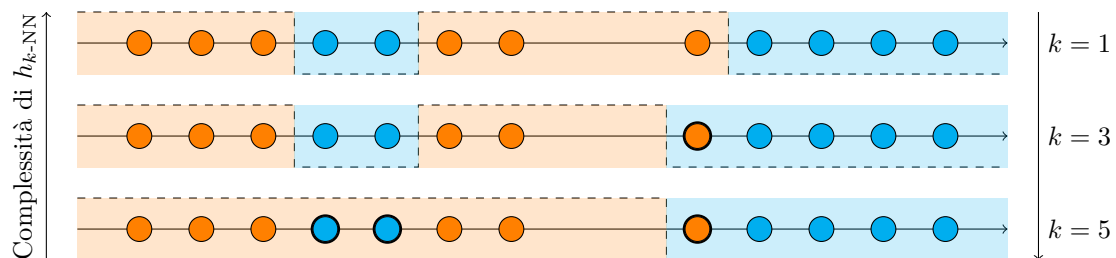


Figura 4: Esempi di $h_{k\text{-NN}}$ con $\mathcal{X} = \mathbb{R}$.

Come si può infatti notare dalla figura 4, nei casi con $k = 3$ e $k = 5$ sono presenti punti errati (evidenziati in grassetto) considerati dal classificatore come *outlier*. Inoltre **al crescere di k**

cresce anche la “semplicità” del classificatore così come il numero di punti errati. L'estremo di ciò è quando $k = |S|$; in questo caso infatti $h_{k\text{-NN}}$ diventa un classificatore costante che predice sempre l'etichetta più presente in tutto S .

In un generico classificatore $h_{k\text{-NN}}$ tipicamente succede che:

- Se k è troppo basso si ottiene un classificatore che si “fida” troppo del *training set*, ottenendo quindi *overfitting*;
- Se k è troppo alto, si ottiene un classificatore troppo semplice, ottenendo *underfitting*.

Tutti i classificatori introdotti fino ad'ora sono classificatori binari ($|\mathcal{Y}| = 2$). Tuttavia $k\text{-NN}$ può essere usato anche per:

- problemi di classificazione multiclasse ($|\mathcal{Y}| > 2$): si opera come nel caso binario, predicendo quindi l'etichetta più presente nei k punti più vicini;
- problemi di regressione ($\mathcal{Y} = \mathbb{R}$): si predice la media aritmetica delle etichette dei k punti più vicini.

3 Tree Predictors

3.1 Definizione

Come già visto, mentre alcuni tipi di dato hanno una naturale rappresentazione vettoriale $x \in \mathbb{R}^d$, altri non ce l'hanno. Un esempio possono essere dei *record* medici, dove i dati contengono i seguenti campi:

età $\in \{12, \dots, 90\}$
 fumatore $\in \{\text{sì}, \text{no}, \text{ex}\}$
 peso $\in [10, 200]$
 sesso $\in \{\text{M}, \text{F}\}$
 terapia $\in \{\text{antibiotici}, \text{cortisone}, \text{nessuna}\}$

Anche convertendo questi tipi di dato in dati numerici, gli algoritmi basati sulla distanza euclidea, come il k -NN, potrebbero non andare molto bene.

Per poter applicare la *data inference* su dati le cui *feature* variano in insiemi eterogenei $\mathcal{X}_1, \dots, \mathcal{X}_d$, verrà introdotta una nuova famiglia di predittori: i *tree predictors*.

Un *tree predictor* è un albero ordinato e radicato dove ogni nodo può essere una **foglia** o un **nodo interno**. È importante sottolineare che in un albero ordinato i figli di ogni nodo sono anch'essi ordinati e quindi numerabili consecutivamente. In figura 5 viene mostrato un esempio di *tree predictor* binario le cui *feature* sono:

previsione $\in \{\text{sole}, \text{nuvole}, \text{pioggia}\}$
 umidità $\in [0, 100]$
 vento $\in \{\text{sì}, \text{no}\}$



Figura 5: Esempio classico di *tree classifier* per una classificazione binaria.

Sia $\mathcal{X} = \mathcal{X}_1, \dots, \mathcal{X}_d$, dove ogni \mathcal{X}_i rappresenta il dominio dell' i -esimo attributo (o *feature*) x_i . Il *tree predictor* $h_T : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ è un predittore definito da un albero T i cui nodi interni corrispondono a dei test e le cui foglie corrispondono a delle etichette $y \in \mathcal{Y}$.

Un test su un attributo i su un nodo interno con k figli è una funzione $f : \mathcal{X} \rightarrow \{1, \dots, k\}$. f mappa ogni elemento di \mathcal{X}_i a un nodo figlio. Due esempi possono essere i seguenti:

$$\begin{array}{ll} \mathcal{X}_i = \{a, b, c, d\} & k = 3 \\ f(x_i) = \begin{cases} 1 & x_i = c \\ 2 & x_i = d \\ 3 & x_i \in \{a, b\} \end{cases} & \end{array} \quad \begin{array}{ll} \mathcal{X}_i = [0, 100] & k = 2 \\ f(x_i) = \begin{cases} 1 & x_i \in [0, 70] \\ 2 & x_i \in (70, 100] \end{cases} & \end{array}$$

L'esempio di destra è riferito all'attributo **umidità** di figura 5.

La predizione $h_T(x)$ è calcolata come segue:

1. $v \leftarrow r$ (r è la radice di T)
2. se v è una foglia ℓ , si restituisce l'etichetta $y \in \mathcal{Y}$ associata a ℓ ;
3. altrimenti, sia $f : \mathcal{X}_i \rightarrow \{1, \dots, k\}$ il test associato a v , **assegna** $v \leftarrow v_j$ dove $j = f(x_i)$ e v_j indica il j -esimo figlio di v ;
4. vai al punto 2.

Se $h_T(x)$ restituisce la foglia ℓ , si dirà che l'esempio x è indirizzato a ℓ .

3.2 Costruzione di un *tree predictor*

3.2.1 Idea generale

Dato un *training set* S , si vedrà ora come costruire un *tree predictor*. Per semplicità, si guarderà solo ad una classificazione binaria $\mathcal{Y} = \{-1, 1\}$ e verranno usati solo alberi binari completi, cioè alberi dove ogni nodo interno ha due figli.

L'idea è quella di far crescere l'albero partendo da un singolo nodo (che dovrà essere una foglia). L'etichetta di quest'unica foglia sarà l'etichetta $\hat{y} \in \mathcal{Y}$, ovvero l'etichetta più presente nel *training set*. Si avrà quindi inizialmente, un classificatore che assegna a tutti i *data point* l'etichetta \hat{y} . **L'albero sarà fatto crescere scegliendo una foglia e rimpiazzandola con un nodo interno e due nuove foglie.**

3.2.2 Training error

Si chiami T l'albero cresciuto fino a un certo punto e h_T il classificatore corrispondente. **Obiettivo è calcolare il contributo che ogni foglia dà al *training error* $\ell_S(h_T)$.**

Presa una foglia ℓ , si vuole capire che etichetta assegnarle per minimizzare ℓ_S .

Si definisca:

$$S_\ell = \{(x_t, y_t) \in S : x_t \text{ è indirizzato a } \ell\}$$

S_ℓ è quindi l'insieme degli esempi di *training* che sono indirizzati alla foglia ℓ . Si divida ora S_ℓ in due sottoinsiemi:

$$S_\ell^+ = \{(x_t, y_t) \in S_\ell : y_t = +1\}$$

$$S_\ell^- = \{(x_t, y_t) \in S_\ell : y_t = -1\}$$

Il primo conterrà tutti gli esempi di *training* che vengono indirizzati a ℓ con etichetta positiva mentre il secondo con etichetta negativa. Di questi insiemi si prenda il loro numero di elementi:

$$N_\ell^+ = |S_\ell^+| \quad N_\ell^- = |S_\ell^-| \quad N_\ell = |S_\ell|$$

È facile capire che se la maggior parte degli esempi di *training* che vengono indirizzati alla foglia ℓ hanno etichetta positiva, allora l'etichetta che bisognerà dare a ℓ , per minimizzare il suo errore ℓ_S , sarà l'etichetta positiva (chiaramente lo stesso discorso vale per l'etichetta negativa); questa intuizione può essere quindi usata per assegnare l'etichetta y_ℓ alla foglia ℓ nel seguente modo:

$$y_\ell = \begin{cases} +1 & N_\ell^+ \geq N_\ell^- \\ -1 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

Di conseguenza la foglia ℓ sbaglierà la sua previsione su $\min\{N_\ell^+, N_\ell^-\}$ esempi di *training*. Per facilitare delle successive osservazioni moltiplichiamo e dividiamo per N_ℓ :

$$\min\{N_\ell^+, N_\ell^-\} = \min\left\{\frac{N_\ell^+}{N_\ell}, \frac{N_\ell^-}{N_\ell}\right\} N_\ell$$

Quindi se il valore appena scritto è l'errore che una singola foglia ℓ fa, il *training error* sarà:

$$\begin{aligned}\ell_S(h_T) &= \frac{1}{m} \sum_{\ell} \min \left\{ \frac{N_{\ell}^+}{N_{\ell}}, \frac{N_{\ell}^-}{N_{\ell}} \right\} N_{\ell} \\ &= \frac{1}{m} \sum_{\ell} \psi \left(\frac{N_{\ell}^+}{N_{\ell}} \right) N_{\ell}\end{aligned}$$

Dove viene introdotta la funzione ψ , definita in $[0, 1]$:

$$\psi(a) = \min \{a, 1 - a\}$$

Si può facilmente intuire come N_{ℓ}^+/N_{ℓ} e N_{ℓ}^-/N_{ℓ} siano sempre compresi tra 0 e 1 in quanto rappresentano la percentuale di esempi positivi/negativi che raggiungono ℓ rispetto al totale degli esempi (sempre che raggiungono ℓ).

Esempio

Sia T l'albero di figura 6 e S il *training set* mostrato in tabella 1 (vengono mostrati solo gli esempi di S che sono indirizzati a ℓ' e ℓ''). Si deve decidere che etichette assegnare alle foglie ℓ' e ℓ'' ;

x_t	previsione	umidità	vento	y_t
x_1	sole	85	no	+1
x_2	sole	76	sì	-1
x_3	sole	55	sì	+1
x_4	sole	65	sì	-1
x_5	sole	82	sì	-1
x_6	sole	35	no	+1
x_7	sole	94	no	-1
x_8	sole	66	no	+1
x_9	sole	48	sì	+1

Tabella 1: Esempio di *training set*

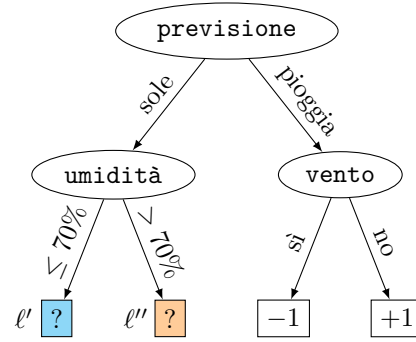


Figura 6: Esempio di *tree classifier* “in costruzione”.

Si prenda ℓ' :

$$S_{\ell'} = \{(x_3, +1), (x_4, -1), (x_6, +1), (x_8, +1), (x_9, +1)\} \quad N_{\ell'} = 5$$

$$S_{\ell'}^+ = \{(x_3, +1), (x_6, +1), (x_8, +1), (x_9, +1)\} \quad N_{\ell'}^+ = 4 \quad \frac{N_{\ell'}^+}{N_{\ell'}} = 0.8$$

$$S_{\ell'}^- = \{(x_4, -1)\} \quad N_{\ell'}^- = 1 \quad \frac{N_{\ell'}^-}{N_{\ell'}} = 0.2$$

L'**ottanta per cento** degli esempi che raggiungono ℓ' ha etichetta positiva, si può quindi affermare che l'etichetta $y_{\ell'} = +1$.

Si prenda infine ℓ'' :

$$S_{\ell''} = \{(x_1, +1), (x_2, -1), (x_5, -1), (x_7, -1)\} \quad N_{\ell''} = 4$$

$$S_{\ell''}^+ = \{(x_1, +1)\} \quad N_{\ell''}^+ = 1 \quad \frac{N_{\ell''}^+}{N_{\ell''}} = 0.25$$

$$S_{\ell''}^- = \{(x_2, -1), (x_5, -1), (x_7, -1)\} \quad N_{\ell''}^- = 3 \quad \frac{N_{\ell''}^-}{N_{\ell''}} = 0.75$$

Il **settantacinque per cento** degli esempi che raggiungono ℓ'' ha etichetta negativa, si può quindi affermare che l'etichetta $y_{\ell''} = -1$.

3.2.3 Crescita dell'albero e *training error*

Si supponga di sostituire una foglia ℓ con un nodo interno e due nuove foglie ℓ' e ℓ'' , come mostrato in figura 7. **Può il *training error* del nuovo albero espanso crescere rispetto a quello originale?**

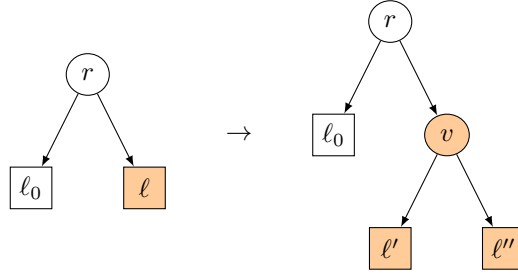


Figura 7: Un passaggio della crescita dell'albero: la foglia ℓ viene rimpiazzata da un nodo interno v con due nuove foglie ℓ' e ℓ'' .

L'apporto che la foglia ℓ dà al *training error* è:

$$\psi\left(\frac{N_{\ell}^{+}}{N_{\ell}}\right) N_{\ell} \quad (1)$$

Gli esempi con etichetta positiva che vengono indirizzati a ℓ saranno ora divisi tra ℓ' e ℓ'' :

$$N_{\ell}^{+} = N_{\ell'}^{+} + N_{\ell''}^{+} \quad (2)$$

Si può quindi ottenere che:

$$\begin{aligned} \frac{N_{\ell}^{+}}{N_{\ell}} &= \frac{N_{\ell'}^{+} + N_{\ell''}^{+}}{N_{\ell}} \\ &= \frac{N_{\ell'}^{+}}{N_{\ell}} + \frac{N_{\ell''}^{+}}{N_{\ell}} \\ &= \frac{N_{\ell'}^{+}}{N_{\ell}} \cdot \frac{N_{\ell'}}{N_{\ell'}} + \frac{N_{\ell''}^{+}}{N_{\ell}} \cdot \frac{N_{\ell''}}{N_{\ell''}} \\ &= \frac{N_{\ell'}^{+}}{N_{\ell'}} \cdot \frac{N_{\ell'}}{N_{\ell}} + \frac{N_{\ell''}^{+}}{N_{\ell''}} \cdot \frac{N_{\ell''}}{N_{\ell}} \end{aligned} \quad (3)$$

Dati (1) e (3) si può dire che l'apporto di ℓ è:

$$\psi\left(\frac{N_{\ell}^{+}}{N_{\ell}}\right) N_{\ell} = \psi\left(\frac{N_{\ell'}^{+}}{N_{\ell'}} \cdot \frac{N_{\ell'}}{N_{\ell}} + \frac{N_{\ell''}^{+}}{N_{\ell''}} \cdot \frac{N_{\ell''}}{N_{\ell}}\right) N_{\ell} \quad (4)$$

Si noti che ψ è una funzione concava. Questo permette di poter applicare la disuguaglianza di Jensen (valida con $a, b \in \mathbb{R} \wedge \mu \in [0, 1]$):

$$\psi(a\mu + b(1-\mu)) \geq \mu\psi(a) + (1-\mu)\psi(b) \quad (\text{Jensen})$$

$$\begin{aligned} \psi\left(\frac{N_{\ell'}^{+}}{N_{\ell'}} \cdot \frac{N_{\ell'}}{N_{\ell}} + \frac{N_{\ell''}^{+}}{N_{\ell''}} \cdot \frac{N_{\ell''}}{N_{\ell}}\right) N_{\ell} &\geq \cancel{N_{\ell}} \frac{N_{\ell'}}{\cancel{N_{\ell}}} \psi\left(\frac{N_{\ell'}^{+}}{N_{\ell'}}\right) + \cancel{N_{\ell}} \frac{N_{\ell''}}{\cancel{N_{\ell}}} \psi\left(\frac{N_{\ell''}^{+}}{N_{\ell''}}\right) \\ &\geq \psi\left(\frac{N_{\ell'}^{+}}{N_{\ell'}}\right) N_{\ell'} + \psi\left(\frac{N_{\ell''}^{+}}{N_{\ell''}}\right) N_{\ell''} \end{aligned} \quad (5)$$

Chiaramente si dovrà avere che:

$$\frac{N_{\ell''}}{N_{\ell}} = 1 - \frac{N_{\ell'}}{N_{\ell}}$$

Questo è facilmente verificabile a partire da (2). Infine, dati (4) e (5) si ha:

$$\underbrace{\psi\left(\frac{N_\ell^+}{N_\ell}\right) N_\ell}_{\text{apporto di } \ell} \geq \underbrace{\psi\left(\frac{N_{\ell'}^+}{N_{\ell'}}\right) N_{\ell'}}_{\text{apporto di } \ell'} + \underbrace{\psi\left(\frac{N_{\ell''}^+}{N_{\ell''}}\right) N_{\ell''}}_{\text{apporto di } \ell''}$$

Questo dimostra che, **facendo crescere l'albero, il *training error* non aumenta.**

Una foglia ℓ viene detta pura se non contribuisce ad aumentare il *training error*,
ovvero:

$$N_\ell^+ \in \{0, N_\ell\}$$

In qualsiasi albero il *training error* è maggiore di zero ($\ell_S(h_T) > 0$) almeno che non abbia solo foglie pure.

3.2.4 Algoritmo generale

Verrà ora mostrato un algoritmo generale per la costruzione di un albero binario a partire da un *training set* S :

1. Inizializzazione:

- (a) Crea un albero T con solo la radice ℓ
- (b) $S_\ell = S$
- (c) y_ℓ = etichetta più frequente in S_ℓ

2. Main loop:

- (a) Scegli una foglia ℓ e sostituiscila con un nodo interno v e due nuove foglie ℓ' e ℓ''
- (b) Scegli un attributo i e un test $f : \mathcal{X}_i \rightarrow \{1, 2\}$
- (c) Associa il test f a v e partiziona S_ℓ in due sottoinsiemi:

$$S_{\ell'} = \{(x_t, y_t) \in S_\ell : f(x_{t,i}) = 1\} \quad \text{e} \quad S_{\ell''} = \{(x_t, y_t) \in S_\ell : f(x_{t,i}) = 2\}$$

- (d) Associa a ℓ' l'etichetta più frequente in $S_{\ell'}$
- (e) Associa a ℓ'' l'etichetta più frequente in $S_{\ell''}$

3.3 Overfitting

Se il numero di nodi dell'albero è troppo alto rispetto alla cardinalità di S si potrà avere dell'*overfitting*. Per questo motivo, la scelta della foglia da espandere dovrebbe garantire approssimativamente la riduzione massima del *training error*.

Nella pratica, per calcolare il *training error* si usano funzioni diverse da $\psi(p) = \min\{p, 1-p\}$. Questo perchè ψ può essere problematica in alcuni casi. Un esempio è il seguente:

$$p = \frac{N_\ell^+}{N_\ell} = 0.8 \quad q = \frac{N_{\ell'}^+}{N_{\ell'}} = 0.6 \quad r = \frac{N_{\ell''}^+}{N_{\ell''}} = 1 \quad \alpha = \frac{N_{\ell'}^+}{N_\ell} = 0.5$$

$$\underbrace{\psi(p)}_{\text{apporto di } \ell} - \underbrace{(\alpha\psi(q))}_{\text{apporto di } \ell'} + \underbrace{(1-\alpha)\psi(r)}_{\text{apporto di } \ell''} = 0.2 - (0.5 \cdot 0.4 + 0.5 \cdot 0) = 0$$

In questo passaggio il cambiamento che si avrebbe rimpiazzando la foglia ℓ sarebbe nullo e quindi non verrebbe scelto dall'algoritmo. Potrebbe inoltre succedere che tutte le foglie diano questo risultato facendo quindi bloccare l'algoritmo.

Per correggere questo problema vengono usate altre funzioni ψ . Queste funzioni sono simili a quella già vista in quanto simmetriche attorno a $1/2$ e nulle agli estremi ($\psi(0) = \psi(1) = 0$). Alcune funzioni usate sono:

- **Funzione di Gini:** $\psi_2(p) = 2p(1 - p)$
- **Entropia scalata:** $\psi_3(p) = -\frac{p}{2} \log_2(p) - \frac{1-p}{2} \log_2(1 - p)$
- $\psi_4(p) = \sqrt{p(1 - p)}$

Come si può vedere in figura 8, valgono le seguenti disuguaglianze ($\psi_1(p) = \min\{p, 1 - p\}$):

$$\psi_1(p) \leq \psi_2(p) \leq \psi_3(p) \leq \psi_4(p)$$

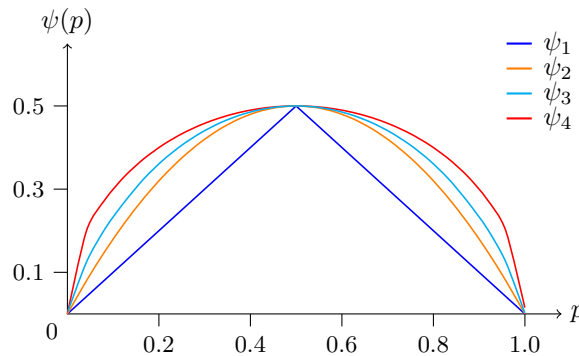


Figura 8: Grafici delle funzioni ψ

3.4 Interpretabilità

Una proprietà interessante dei *tree predictors* per la classificazione binaria è che possono essere rappresentati con una proposizione logica in forma normale disgiuntiva (DNF). Questa rappresentazione è ottenuta considerando le clausole (congiunzione di predicati) che risultano dai test che si trovano sui percorsi che portano ad un etichetta $+1$.

Un esempio è la seguente DNF ricavata dall'albero in figura 9:



Figura 9: *Tree predictor*

Questa rappresentazione “logica” dell'albero è molto intuitiva e permette di essere manipolata attraverso le regole della logica proposizionale, permettendo quindi una possibile semplificazione del classificatore. Soprattutto, questa rappresentazione fornisce una descrizione interpretabile della conoscenza del *learning algorithm* estratta dal *training set*.

4 Statistical Learning

Per poter analizzare un *learning algorithm* c'è bisogno di definire un modello matematico di come gli esempi (x, y) siano generati. Nel contesto della *statistical learning* si assumerà che ogni esempio sia ottenuto attraverso un'estrazione indipendente da una distribuzione di probabilità fissata su $\mathcal{X} \times \mathcal{Y}$. Si scriverà (X, Y) per sottolineare come **le due componenti di un esempio siano due variabili aleatorie**.

Assumere che ogni esempio (x, y) sia la realizzazione di un'estrazione casuale **indipendente** da un'unica distribuzione \mathcal{D} , implica che ogni *dataset* (come *test* e *training set*) sia un campione statistico. L'indipendenza dei dati è in realtà violata in alcuni domini pratici. Nonostante ciò, l'assunzione di indipendenza nei dati è estremamente utile dal punto di vista della tracciabilità analitica del problema e funziona sorprendentemente bene nella pratica.

4.1 Definizioni

Nel contesto della *statistical learning* un problema è specificato da una coppia (\mathcal{D}, ℓ) , dove \mathcal{D} è la distribuzione e ℓ la *loss function*.

4.1.1 Rischio statistico $\ell_{\mathcal{D}}$

Le prestazioni di un predittore $h : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ rispetto a (\mathcal{D}, ℓ) è valutata dal **rischio statistico**:

$$\ell_{\mathcal{D}}(h) = \mathbb{E}[\ell(Y, h(X))]$$

che indica il valore atteso della *loss function* su un esempio casuale (X, Y) estratto da \mathcal{D} .

4.1.2 Predittore ottimo di Bayes f^*

Data \mathcal{D} , il miglior predittore possibile $f^* : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ è detto **predittore ottimo di Bayes**:

$$f^*(x) = \operatorname{argmin}_{\hat{y} \in \mathcal{Y}} \mathbb{E}[\ell(Y, \hat{y}) \mid X = x]$$

4.1.3 Rischio condizionato

L'argomento di argmin di f^* , ovvero $\mathbb{E}[\ell(Y, \hat{y}) \mid X = x]$, è detto **rischio condizionato**. Il *Bayes optimal predictor* quindi, è la predizione che minimizza il rischio condizionato. Un altro modo per scrivere il rischio condizionato di un predittore f è:

$$\mathbb{E}[\ell(Y, \hat{y}) \mid X = x] = \mathbb{E}[\ell(Y, f(X)) \mid X = x]$$

4.1.4 Rischio di Bayes $\ell_{\mathcal{D}}(f^*)$

Essendo f^* il miglior predittore possibile per \mathcal{D} è ragionevole pensare che esso abbia il rischio statistico migliore, ed è così; si ha infatti che il rischio $\ell_{\mathcal{D}}(f^*)$, detto **rischio di Bayes**, è il minore tra tutti i predittori:

$$\forall h \in \mathcal{F} \quad \ell_{\mathcal{D}}(f^*) \leq \ell_{\mathcal{D}}(h)$$

Tipicamente il rischio di Bayes è maggiore di zero vista la casualità delle etichette.

4.2 f^* e $\ell_{\mathcal{D}}$ nelle varie *loss function*

Si valuteranno ora i predittori ottimi di Bayes per le varie *loss function*.

4.2.1 Quadratic loss

Sia $\ell(y, \hat{y}) = (y - \hat{y})^2$ con $\mathcal{Y} = \mathbb{R}$.

Si analizzi il predittore ottimo di Bayes:

$$\begin{aligned} f^*(x) &= \operatorname{argmin}_{\hat{y} \in \mathbb{R}} \mathbb{E}[(Y - \hat{y})^2 \mid X = x] \\ &= \operatorname{argmin}_{\hat{y} \in \mathbb{R}} \mathbb{E}[Y^2 + \hat{y}^2 - 2\hat{y}Y \mid X = x] \end{aligned}$$

Per le varie proprietà del valore atteso si ha:

$$\begin{aligned} &= \operatorname{argmin}_{\hat{y} \in \mathbb{R}} (\mathbb{E}[Y^2 \mid X = x] + \mathbb{E}[\hat{y}^2 \mid X = x] - \mathbb{E}[2\hat{y}Y \mid X = x]) \\ &= \operatorname{argmin}_{\hat{y} \in \mathbb{R}} (\mathbb{E}[Y^2 \mid X = x] + \mathbb{E}[\hat{y}^2 \mid X = x] - 2\hat{y}\mathbb{E}[Y \mid X = x]) \end{aligned}$$

Siccome argmin varia su \hat{y} , tutti i fattori che non ne dipendono non incidono sul risultato; possono quindi essere tolti:

$$= \operatorname{argmin}_{\hat{y} \in \mathbb{R}} (\mathbb{E}[\hat{y}^2 \mid X = x] - 2\hat{y}\mathbb{E}[Y \mid X = x])$$

Non essendo \hat{y} una variabile aleatoria:

$$= \operatorname{argmin}_{\hat{y} \in \mathbb{R}} (\hat{y}^2 - 2\hat{y}\mathbb{E}[Y \mid X = x])$$

L'argomento di argmin è una funzione del tipo:

$$F(\hat{y}) = \hat{y}^2 - 2\hat{y}q \quad q = \mathbb{E}[Y \mid X = x]$$

Obiettivo di argmin è trovare il valore di \hat{y} che minimizza F . Facendo un semplice studio di funzione si può trovare che F è minimizzata quando:

$$\begin{aligned} F'(\hat{y}) &= 2\hat{y} - 2q \\ \text{Cerco il minimo:} \\ F'(\hat{y}) &= 0 \quad \Rightarrow \quad \hat{y} = \mathbb{E}[Y \mid X = x] \\ 2\hat{y} - 2q &= 0 \\ \hat{y} &= q \end{aligned}$$

Si può quindi dire che:

$$f^*(x) = \mathbb{E}[Y \mid X = x] = \mathbb{E}[Y \mid X]$$

Sostituendo il risultato appena mostrato nella formula del rischio condizionato si ha:

$$\begin{aligned} &\mathbb{E}[\ell(Y, \hat{y}) \mid X = x] \\ &= \mathbb{E}[(Y - f^*(X))^2 \mid X = x] \\ &= \mathbb{E}[(Y - \mathbb{E}[Y \mid X])^2 \mid X = x] \\ &= \operatorname{Var}[Y \mid X] \end{aligned}$$

Il rischio di Bayes sarà quindi:

$$\ell_{\mathcal{D}}(f^*) = \mathbb{E}[\operatorname{Var}[Y \mid X]] \neq \operatorname{Var}[Y]$$

Da notare che il valore atteso della varianza dato X sia diverso dalla varianza; per la legge della varianza totale si ha infatti che:

$$\operatorname{Var}[Y] - \mathbb{E}[\operatorname{Var}[Y \mid X]] = \operatorname{Var}[\mathbb{E}[Y \mid X]]$$

4.2.2 Zero-one loss

Si guarderà ora la classificazione binaria dove $\mathcal{Y} = \{-1, 1\}$.

Si definiscano due funzioni:

$$\begin{aligned}\eta(x) &= \mathbb{P}(Y = 1 \mid X = x) & (\mathbb{P} \text{ è la funzione di probabilità}) \\ \mathbb{I}\{A\} &= \begin{cases} 1 & \text{si verifica } A \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} & (A \text{ è un evento})\end{aligned}$$

La funziona *zero-one loss* si potrà ora definire:

$$\ell(y, \hat{y}) = \mathbb{I}\{\hat{y} \neq y\}$$

Si analizzi il rischio statistico:

$$\begin{aligned}\ell_{\mathcal{D}}(h) &= \mathbb{E}[\ell(Y, h(X))] \\ &= \mathbb{E}[\mathbb{I}\{h(X) \neq Y\}] \\ &= \mathbb{P}(h(X) \neq Y)\end{aligned}$$

Di conseguenza **il predittore ottimo di Bayes è:**

$$\begin{aligned}f^*(x) &= \operatorname{argmin}_{\hat{y} \in \{-1, 1\}} \mathbb{E}[(Y - \hat{y})^2 \mid X = x] \\ &= \operatorname{argmin}_{\hat{y} \in \{-1, 1\}} \mathbb{E}[\mathbb{I}\{Y = 1\}\mathbb{I}\{\hat{y} = -1\} + \mathbb{I}\{Y = -1\}\mathbb{I}\{\hat{y} = 1\} \mid X = x]\end{aligned}$$

Si applichi la definizione di valore atteso:

$$\begin{aligned}&= \operatorname{argmin}_{\hat{y} \in \{-1, 1\}} \left(\mathbb{P}(Y = 1 \mid X = x)\mathbb{I}\{\hat{y} = -1\} + \mathbb{P}(Y = -1 \mid X = x)\mathbb{I}\{\hat{y} = 1\} \right) \\ &= \operatorname{argmin}_{\hat{y} \in \{-1, 1\}} \left(\eta(x)\mathbb{I}\{\hat{y} = -1\} + (1 - \eta(x))\mathbb{I}\{\hat{y} = 1\} \right) \\ &= \begin{cases} -1 & \eta(x) < 1/2 \\ +1 & \eta(x) \geq 1/2 \end{cases}\end{aligned}$$

$f^*(x)$ predirà quindi l'etichetta con la maggior probabilità quando condizionata dall'istanza.

Infine è facile verificare che **il rischio di Bayes è:**

$$\ell_{\mathcal{D}}(f^*) = \mathbb{E}[\min\{\eta(X), 1 - \eta(X)\}]$$

4.3 Limitare il rischio

Si vedrà ora come limitare il rischio statistico di un predittore.

4.3.1 Stima del rischio

Dato un predittore h **non si può calcolare direttamente il suo rischio statistico** $\ell_{\mathcal{D}}(h)$; il motivo è semplice: **non si conosce** \mathcal{D} (se si conoscesse si potrebbe calcolare direttamente il predittore ottimo di Bayes).

Si dovrà quindi procedere ad ottenere una stima del rischio di un predittore h . Per farlo **si userà il test set** $S' = \{(x'_1, y'_1), \dots, (x'_n, y'_n)\}$; in particolare si assumerà che S' sia stato generato attraverso estrazioni indipendenti da \mathcal{D} e che quindi:

$$(X'_t, Y'_t) \sim \mathcal{D} \quad t = 1, \dots, n$$

Questo permette di affermare che:

$$\mathbb{E}[\ell(Y', h(X'))] = \ell_{\mathcal{D}}(h)$$

Infine, usando come stimatore la media campionaria del rischio, **si può avere una stima del rischio** attraverso il *test set*, **ottenendo di fatto il *test error***:

$$\ell_{S'}(h) = \frac{1}{n} \sum_{t=1}^n \ell(y'_t, h(x'_t))$$

È importante sottolineare che **la stima ha senso solo se h non dipende in alcun modo dal *test set***.

4.3.2 Chernoff-Hoeffding

Per poter calcolare quanto “buona” è la stima del rischio si può usare il seguente risultato della legge dei grandi numeri.

Lemma 1 (Chernoff-Hoeffding). *Siano Z_1, \dots, Z_n delle variabili aleatorie indipendenti e identicamente distribuite; sia μ il valore atteso e sia $0 \leq Z_t \leq 1$ per ogni $t = 1, \dots, n$. Allora per ogni $\varepsilon > 0$ si ha che:*

$$\mathbb{P}\left(\frac{1}{n} \sum_{t=1}^n Z_t > \mu + \varepsilon\right) \leq e^{-2\varepsilon^2 n} \quad e \quad \mathbb{P}\left(\frac{1}{n} \sum_{t=1}^n Z_t < \mu - \varepsilon\right) \leq e^{-2\varepsilon^2 n}$$

Applicando il precedente lemma con $Z_t = \ell(Y'_t, h(X'_t)) \in [0, 1]$ si può trovare un intervallo di confidenza del rischio statistico:

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\left(|\ell_{S'}(h) - \ell_{\mathcal{D}}(h)| > \varepsilon\right) &= \mathbb{P}\left((\ell_{S'}(h) > \ell_{\mathcal{D}}(h) + \varepsilon) \cup (\ell_{S'}(h) < \ell_{\mathcal{D}}(h) - \varepsilon)\right) \\ &= \underbrace{\mathbb{P}\left(\ell_{S'}(h) > \ell_{\mathcal{D}}(h) + \varepsilon\right)}_{\leq e^{-2\varepsilon^2 n}} + \underbrace{\mathbb{P}\left(\ell_{S'}(h) < \ell_{\mathcal{D}}(h) - \varepsilon\right)}_{\leq e^{-2\varepsilon^2 n}} \\ &\Downarrow \\ \mathbb{P}\left(|\ell_{S'}(h) - \ell_{\mathcal{D}}(h)| > \varepsilon\right) &\leq 2e^{-2\varepsilon^2 n} \end{aligned} \tag{6}$$

Questo mostra che **la probabilità che il *test error* $\ell_{S'}(h)$ differisca dal rischio statistico $\ell_{\mathcal{D}}(h)$ per più di ε , diminuisce esponenzialmente con il crescere della dimensione n del *test set*.**

Andando più nello specifico, si prenda un valore $\delta \in (0, 1)$, uguale a $2e^{-2\varepsilon^2 n}$, e si isoli la ε :

$$\begin{aligned} 2e^{-2\varepsilon^2 n} &= \delta \\ e^{2\varepsilon^2 n} &= \frac{2}{\delta} \\ 2\varepsilon^2 n &= \ln \frac{2}{\delta} \\ \varepsilon^2 &= \frac{1}{2n} \ln \frac{2}{\delta} \\ \varepsilon &= \sqrt{\frac{1}{2n} \ln \frac{2}{\delta}} \end{aligned}$$

Applicando i risultati appena mostrati su (6) si ottiene infine:

$$\mathbb{P}\left(|\ell_{\mathcal{D}}(h) - \ell_{S'}(h)| \leq \sqrt{\frac{1}{2n} \ln \frac{2}{\delta}}\right) \geq 1 - \delta$$

4.4 Decomposizione *bias-variance*

Si consideri un problema di *learning* (\mathcal{D}, ℓ) e un *learning algorithm* A . Si scriverà $A(S)$ per indicare il predittore generato da A preso in input il *training set* S .

Sia $\mathcal{H}_m = \{h_1, \dots, h_m\}$ l'insieme dei predittori generati da A su *training set* di dimensione m ; un predittore h appartiene a \mathcal{H}_m se e solo se esiste un *training set* S di dimensione m tale che $A(S) = h$:

$$h \in \mathcal{H}_m \Leftrightarrow \exists S : |S| = m \wedge A(S) = h$$

Sia h^* il miglior predittore di \mathcal{H}_m , ovvero il predittore con il rischio minimo (ricordando che potrebbero essere più di uno):

$$h^* \in \operatorname{argmin}_{h \in \mathcal{H}_m} \ell_{\mathcal{D}}(h)$$

Fissato un *training set* S di dimensione m si indichi $h_S = A(S) \in \mathcal{H}_m$. Di seguito verrà mostrata la decomposizione *bias-variance*:

$$\begin{aligned} \ell_{\mathcal{D}}(h_S) = & \ell_{\mathcal{D}}(h_S) - \ell_{\mathcal{D}}(h^*) && \text{(errore di stima o di variazione)} \\ & + \ell_{\mathcal{D}}(h^*) - \ell_{\mathcal{D}}(f^*) && \text{(errore di approssimazione o di bias)} \\ & + \ell_{\mathcal{D}}(f^*) && \text{(rischio di Bayes)} \end{aligned}$$

Dove f^* è il predittore ottimo di Bayes.

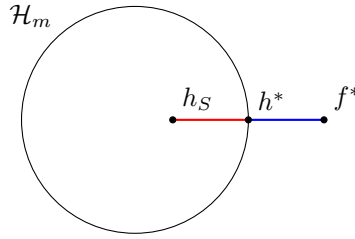


Figura 10: Rappresentazione grafica della decomposizione *bias-variance*

Si noti che:

- Il rischio di Bayes non dipende da A ;
- L'errore di approssimazione è grande quando \mathcal{H}_m non contiene una buona approssimazione di f^* ;
- L'errore di stima è grande quando S non contiene abbastanza informazioni necessarie ad identificare h^* .

4.5 *Overfitting e underfitting*

Obiettivo di questo paragrafo è stabilire una connessione tra la decomposizione *bias-variance* e *overfitting/underfitting*. Per farlo si prenda come A il *learning algorithm* ERM su una classe di predittori arbitraria \mathcal{H} :

$$A(S) = h_S = \operatorname{argmin}_{h \in \mathcal{H}} \ell_S(h)$$

Si tenga poi conto del predittore ottimo h^* di \mathcal{H} :

$$h^* \in \operatorname{argmin}_{h \in \mathcal{H}} \ell_{\mathcal{D}}(h)$$

Si noti che h_S è il miglior predittore che ERM riesce a trovare basando la stima del rischio su S , mentre h^* è il miglior predittore possibile esistente in \mathcal{H} , **che non dipende quindi da S** .

Il lemma 1 non può essere applicato direttamente in quanto $\ell_S(h_S)$ e $\ell_D(h_S)$ sono entrambi variabili aleatorie il cui valore atteso non coincide necessariamente. Per poter quindi analizzare formalmente l'errore di variazione di ERM si proceda come segue.

Per ogni *training set* S di dimensione m si ha che:

$$\ell_D(h_S) - \ell_D(h^*) = \ell_D(h_S) - \ell_S(h_S) + \ell_S(h_S) - \ell_D(h^*)$$

Per definizione h_S minimizza il rischio stimato su S , si ha quindi che $\ell_S(h_S) \leq \ell_S(h^*)$:

$$\begin{aligned} &\leq \ell_D(h_S) - \ell_S(h_S) + \ell_S(h^*) - \ell_D(h^*) \\ &\leq |\ell_D(h_S) - \ell_S(h_S)| + |\ell_S(h^*) - \ell_D(h^*)| \\ &\leq 2 \max_{h \in \mathcal{H}} |\ell_S(h) - \ell_D(h)| \end{aligned} \quad (7)$$

Concentrandosi ora sull'errore di variazione, si vuole capire quando, per ogni $\varepsilon > 0$ si ha:

$$\ell_D(h_S) - \ell_D(h^*) > \varepsilon \quad (8)$$

Unendo la disuguaglianza appena vista con (7) si ha:

$$2 \max_{h \in \mathcal{H}} |\ell_S(h) - \ell_D(h)| \geq \ell_D(h_S) - \ell_D(h^*) > \varepsilon$$

Da cui:

$$\begin{aligned} 2 \max_{h \in \mathcal{H}} |\ell_S(h) - \ell_D(h)| &> \varepsilon \\ \max_{h \in \mathcal{H}} |\ell_S(h) - \ell_D(h)| &> \frac{\varepsilon}{2} \end{aligned} \quad (9)$$

\Downarrow

$$\exists h \in \mathcal{H} : |\ell_S(h) - \ell_D(h)| > \frac{\varepsilon}{2} \quad (10)$$

Dai risultati (8) e (10) si evince che:

$$\begin{aligned} (8) &\Rightarrow (10) \\ \ell_D(h_S) - \ell_D(h^*) > \varepsilon &\Rightarrow \exists h \in \mathcal{H} : |\ell_S(h) - \ell_D(h)| > \frac{\varepsilon}{2} \end{aligned} \quad (11)$$

La figura 11 mostra come:

$$A \Rightarrow B \rightarrow \mathbb{P}(A) \leq \mathbb{P}(B) \quad (12)$$

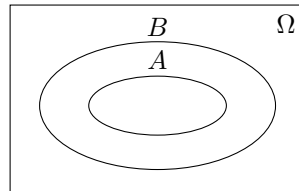


Figura 11

Da (11) e (12) si ottiene che:

$$\mathbb{P}(\ell_D(h_S) - \ell_D(h^*) > \varepsilon) \leq \mathbb{P}\left(\exists h \in \mathcal{H} : |\ell_S(h) - \ell_D(h)| > \frac{\varepsilon}{2}\right) \quad (13)$$

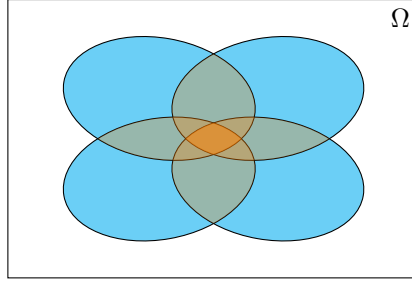


Figura 12

Si guardi solo il caso in cui \mathcal{H} è finito ($|\mathcal{H}| < \infty$).

$$\mathbb{P}\left(\exists h \in \mathcal{H} : |\ell_S(h) - \ell_D(h)| > \frac{\varepsilon}{2}\right) = \mathbb{P}\left(\bigcup_{h \in \mathcal{H}} \left(|\ell_S(h) - \ell_D(h)| > \frac{\varepsilon}{2}\right)\right)$$

La probabilità dell'unione di più eventi non è uguale alla somma delle probabilità dei singoli eventi in quanto alcuni eventi si potrebbero sovrapporre come mostrato in figura 12. Tuttavia rappresenta un limite superiore:

$$\leq \sum_{h \in \mathcal{H}} \mathbb{P}\left(|\ell_S(h) - \ell_D(h)| > \frac{\varepsilon}{2}\right)$$

Si applichi il lemma 1:

$$\begin{aligned} &\leq \sum_{h \in \mathcal{H}} 2e^{-2\frac{\varepsilon^2}{4}m} \\ &\leq \sum_{h \in \mathcal{H}} 2e^{-\frac{\varepsilon^2 m}{2}} \\ &\leq |\mathcal{H}| 2e^{-\frac{\varepsilon^2 m}{2}} \end{aligned} \tag{14}$$

Da (13) e (14) si ha che:

$$\mathbb{P}(\ell_D(h_S) - \ell_D(h^*) > \varepsilon) \leq |\mathcal{H}| 2e^{-m\varepsilon^2/2} \tag{15}$$

Si chiami il lato destro δ e si isoli la ε :

$$2|\mathcal{H}|e^{-m\varepsilon^2/2} = \delta \tag{16}$$

$$e^{-m\varepsilon^2/2} = \frac{\delta}{2|\mathcal{H}|}$$

$$e^{m\varepsilon^2/2} = \frac{2|\mathcal{H}|}{\delta}$$

$$\frac{m\varepsilon^2}{2} = \ln \frac{2|\mathcal{H}|}{\delta}$$

$$\varepsilon^2 = \frac{2}{m} \ln \frac{2|\mathcal{H}|}{\delta}$$

$$\varepsilon = \sqrt{\frac{2}{m} \ln \frac{2|\mathcal{H}|}{\delta}} \tag{17}$$

Concludendo, da (15) si ha che:

$$\mathbb{P}(\ell_D(h_S) \leq \ell_D(h^*) + \varepsilon) \geq 1 - |\mathcal{H}|2e^{-m\varepsilon^2/2}$$

Applicando (16) e (17) si ottiene:

$$\mathbb{P}\left(\ell_D(h_S) \leq \ell_D(h^*) + \sqrt{\frac{2}{m} \ln \frac{2|\mathcal{H}|}{\delta}}\right) \geq 1 - \delta$$

Si ricordi che m è la dimensione del *training set*.

Fissato m , per poter diminuire lo scarto $\sqrt{\frac{2}{m} \ln \frac{2|\mathcal{H}|}{\delta}}$ dell'errore di variazione di ERM, **bisogna diminuire** $|\mathcal{H}|$. Diminuendo $|\mathcal{H}|$ però si incrementerebbe $\ell_D(h^*)$, il che farebbe aumentare l'errore di bias.

Alla luce di quest'analisi statistica, si può concludere che gli algoritmi ERM generano predittori con un alto rischio (rispetto al rischio di Bayes) quando c'è uno sbilanciamento tra l'errore di variazione e quello di bias. In particolare:

- Si verifica *overfitting* quando l'errore di variazione domina l'errore di bias;
- Si verifica *underfitting* quando l'errore di bias domina l'errore di variazione;

5 Analisi del rischio sui *tree predictor*

L'analisi del rischio per ERM su una classe finita \mathcal{H} di predittori dice che, con probabilità di almeno $1 - \delta$ rispetto all'estrazione casuale di un *training set* di dimensione m , si ha:

$$\ell_{\mathcal{D}}(h_S) \leq \ell_{\mathcal{D}}(h^*) + \sqrt{\frac{2}{m} \ln \frac{2|\mathcal{H}|}{\delta}}$$

Si proverà in questa sezione ad applicare questo risultato alla classe dei predittori calcolati da *tree classifier* binari su $\mathcal{X} = \{0, 1\}^d$. **Si considereranno solo alberi binari completi ovvero alberi i cui nodi hanno o zero o due figli.** Un albero completo in cui le foglie si trovano tutte alla stessa profondità si dice albero binario perfetto. Un albero binario completo con N nodi ha sempre $(N + 1)/2$ foglie.

Osservazione 1. Per ogni funzione $h : \{0, 1\}^d \rightarrow \{-1, 1\}$ esiste un *tree classifier* binario con almeno $2^{d+1} - 1$ nodi che calcolano h .

Dimostrazione. Si prenda l'albero binario perfetto che calcoli il predittore $h : \{0, 1\}^d \rightarrow \{-1, 1\}$. Per ogni possibile $x \in \{0, 1\}^d$ ci dovrà essere una corrispettiva etichetta. Ci sono 2^d possibili punti. Di conseguenza l'albero avrà 2^d foglie. Essendo l'albero completo ed avendo 2^d foglie avrà $2^{d+1} - 1$ nodi. \square

Siccome ci sono 2^{2^d} funzioni binarie su $\{0, 1\}^d$, si può eseguire ERM con una classe \mathcal{H} contenente 2^{2^d} *tree classifier*. Contenendo tutte le possibili funzioni, si avrà che $f^* \in \mathcal{H}$ e quindi verrà scelto da ERM avendo così un errore di bias nullo. Analizzando il limite superiore dell'errore di variazione si ha:

$$\begin{aligned} \ell_{\mathcal{D}}(h_S) &\leq \ell_{\mathcal{D}}(h^*) + \sqrt{\frac{2}{m} \ln \frac{2 \cdot 2^{2^d}}{\delta}} \\ \ell_{\mathcal{D}}(h_S) &\leq \ell_{\mathcal{D}}(h^*) + \sqrt{\frac{2}{m} \left(\ln 2^{2^d} + \ln \frac{2}{\delta} \right)} \\ \ell_{\mathcal{D}}(h_S) &\leq \ell_{\mathcal{D}}(h^*) + \sqrt{\frac{2}{m} \left(2^d \ln 2 + \ln \frac{2}{\delta} \right)} \end{aligned}$$

Questo mostra che per controllare l'errore di variazione di ERM, il *training set* deve contenere un numero m di esempi dell'ordine di grandezza di 2^d . Questo è un caso estremo di *overfitting* creato scegliendo \mathcal{H} talmente grande da azzerare l'errore di bias.

5.1 Limitare il numero di nodi

Per cercare di ridurre l'*overfitting*, si può incrementare l'errore di bias riducendo la dimensione di \mathcal{H} , guardando quindi una classe di alberi ridotta.

Si consideri l'insieme \mathcal{H}_N di tutti i classificatori calcolati da *tree predictor* binari completi con esattamente N nodi, dove $N \ll 2^d$.

Osservazione 2. $|\mathcal{H}_N| \leq (2de)^N$

Dall'osservazione 2 si trova che:

$$\ell_{\mathcal{D}}(h_S) \leq \ell_{\mathcal{D}}(h^*) + \sqrt{\frac{2}{m} \left(N(1 + \ln(2d)) + \ln \frac{2}{\delta} \right)}$$

Da qui si può dedurre che un *training set* con delle dimensioni dell'ordine di $N \ln d$ è abbastanza a controllare il rischio dei predittori $h \in \mathcal{H}$.

5.2 Limite superiore più dettagliato

5.2.1 Structural Risk Minimization (SRM)

Dalle conclusioni fatte fino ad ora non si capisce bene che valore N debba assumere nella pratica; si vedrà quindi un limite dell'errore più dettagliato.

Precedentemente si è controllato l'errore di variazione di ERM controllando quando il rischio di ogni predittore possa eccedere il suo *training error* di almeno ε . **Si vedrà ora un approccio differente: si limiterà superiormente il rischio di un *tree predictor* h dal suo *training error* più una quantità ε_h che dipende dalla dimensione dell'albero.**

Si introdurrà una funzione $w : \mathcal{H} \rightarrow [0, 1]$ e sia $w(h)$ il peso del *tree predictor* h . Si assuma che:

$$\sum_{h \in \mathcal{H}} w(h) \leq 1 \quad (18)$$

Si può quindi scrivere che:

$$\mathbb{P}(\exists h \in \mathcal{H} : |\ell_S(h) - \ell_D(h)| > \varepsilon_h) \leq \sum_{h \in \mathcal{H}} \mathbb{P}(|\ell_S(h) - \ell_D(h)| > \varepsilon_h)$$

Si applichi il lemma 1 (Chernoff-Hoeffding):

$$\leq \sum_{h \in \mathcal{H}} 2e^{-2m\varepsilon_h^2}$$

Scegliendo:

$$\varepsilon_h = \sqrt{\frac{1}{2m} \left(\ln \frac{1}{w(h)} + \ln \frac{2}{\delta} \right)}$$

Si ottiene che:

$$\mathbb{P}(\exists h \in \mathcal{H} : |\ell_S(h) - \ell_D(h)| > \varepsilon_h) \leq \sum_{h \in \mathcal{H}} \delta w(h) \leq \delta$$

Dove nell'[ultimo passaggio](#) si è usata l'assunzione (18). Una conseguenza di ciò è che per ogni *tree predictor* $h \in \mathcal{H}$ si ha che:

$$\mathbb{P} \left(\ell_D(h) \leq \ell_S(h) + \sqrt{\frac{1}{2m} \left(\ln \frac{1}{w(h)} + \ln \frac{2}{\delta} \right)} \right) \geq 1 - \delta$$

Questo suggerisce un algoritmo alternativo a ERM per la minimizzazione del *training error*: **la Structural Risk Minimization (SRM):**

$$h_S = \operatorname{argmin}_{h \in \mathcal{H}} \left(\ell_S(h) + \sqrt{\frac{1}{2m} \left(\ln \frac{1}{w(h)} + \ln \frac{2}{\delta} \right)} \right)$$

La funzione w può essere vista come una misura della complessità del *tree predictor* h . Più il predittore è complesso più c'è il rischio che avvenga *overfitting*. **SRM punta ad ottenere un predittore che minimizza sia il *training error* che la complessità del predittore.**

5.2.2 Funzione peso w

Una possibile funzione w si può ottenere come segue: utilizzando tecniche teoriche di codifica, si può codificare ogni *tree predictor* h con N_h nodi, utilizzando una stringa binaria $\sigma(h)$. La lunghezza della stringa sarà:

$$|\sigma(h)| = (N_h + 1) \lceil \log_2(d + 3) \rceil + 2 \lfloor \log_2 N_h \rfloor + 1 = O(N_h \log d)$$

La codifica deve garantire che non esistano due *tree predictor* tali che la codifica di uno sia prefisso della codifica dell'altro. Questo tipo di codifica è detta istantanea e garantisce che:

$$\sum_{h \in \mathcal{H}} 2^{-|\sigma(h)|} \leq 1$$

Si può quindi assegnare alla funzione peso:

$$w(h) = 2^{-|\sigma(h)|}$$

Si può quindi introdurre un *learning algorithm* per *tree predictor* che controlla l'*overfitting* generando predittori così definiti:

$$h_S = \operatorname{argmin}_{h \in \mathcal{H}} \left(\ell_S(h) + \sqrt{\frac{1}{2m} \left(|\sigma(h)| + \ln \frac{2}{\delta} \right)} \right) \quad (\text{con } |\sigma(h)| = O(N_h \log d))$$

Si noti come la scelta della funzione peso w non sia determinata dall'analisi fatta. Si potrebbe scegliere qualsiasi altra funzione w che soddisfi (18). La funzione w andrebbe interpretata come un termine di bias, preferendo alcuni alberi rispetto ad altri. Un bias verso alberi più piccoli è un esempio del principio Occam Razor: se due spiegazioni concordano con una serie di osservazioni, la spiegazione più breve è quella con la migliore “potenza predittiva”.

6 Iperparametri e stima del rischio

I *learning algorithm* spesso hanno degli iperparametri; un'esempio è il parametro k degli algoritmi k -NN. Il loro valore deve essere determinato prima della fase di *training*. **I valori degli iperparametri sono di cruciale importanza per il controllo dell'*underfitting* e dell'*underfitting*.**

Un *learning algorithm* con uno o più iperparametri non è un algoritmo, ma piuttosto una famiglia di algoritmi, uno per ogni possibile valore degli iperparametri. Sia $\{A_\theta : \theta \in \Theta\}$ una famiglia di *learning algorithm*, dove Θ è l'insieme di tutti i possibili valori degli iperparametri.

Si fissi un *learning problem* (\mathcal{D}, ℓ) e sia $A_\theta(S)$ il predittore generato da A_θ sul *training set* S .

6.1 Valutazione tramite *cross-validation* esterna

Si fissi l'iperparametro θ ; **si vogliono stimare le performance di A_θ stimando $\mathbb{E}[\ell_{\mathcal{D}}(A_\theta(S))]$.** Per farlo si userà una tecnica chiamata *K-fold cross-validation* (esterna).

Sia S l'intero *data set*. Si partizioni S in K sottoinsiemi (*folds*) S_1, \dots, S_K ognuno di dimensione m/K (assumendo per semplicità che K divida m).

Sia $S_{-i} = S \setminus S_i$. Si chiamerà S_i la **parte di *testing*** dell' i -esima *fold* mentre S_{-i} la **parte di *training***.

Per esempio, si partizioni $S = \{(x_1, y_1), \dots, (x_{20}, y_{20})\}$ in $K = 4$ sottoinsiemi:

$$\begin{aligned} S_1 &= \{(x_1, y_1), \dots, (x_5, y_5)\} \\ S_2 &= \{(x_6, y_6), \dots, (x_{10}, y_{10})\} \\ S_3 &= \{(x_{11}, y_{11}), \dots, (x_{15}, y_{15})\} \\ S_4 &= \{(x_{16}, y_{16}), \dots, (x_{20}, y_{20})\} \\ S_{-2} &= S_1 \cup S_3 \cup S_4 \end{aligned}$$

La stima di A su S ottenuta tramite *K-fold CV*, detta $\ell_S^{\text{cv}}(A)$, viene calcolata come segue:

- Si esegue A su ogni S_{-i} con $i = 1, \dots, K$, ottenendo dei predittori h_1, \dots, h_K ;
- Si calcola l'errore medio sulla parte di *testing* di ogni *fold* ottenendo $\ell_{S_1}(h_1), \dots, \ell_{S_K}(h_K)$ dove:

$$\ell_{S_i}(h_i) = \frac{K}{m} \sum_{(x,y) \in S_i} \ell(y, h_i(x))$$

- Infine, si calcola la stima facendo una media degli errori ottenuti nel precedente punto:

$$\ell_S^{\text{cv}}(A) = \frac{1}{K} \sum_{i=1}^K \ell_{S_i}(h_i)$$

6.2 Modifica degli iperparametri

Obiettivo di questa sezione è scegliere gli iperparametri in modo da ottenere un predittore con un rischio basso. Questo è tipicamente fatto minimizzando la stima del rischio sui dati di *training*.

Siccome Θ può essere molto grande, se non infinito, si cercherà di minimizzare su un sottoinsieme opportuno $\Theta_0 \subset \Theta$. Sia S il *training set*, si vuole trovare $\theta^* \in \Theta_0$ tale che:

$$\ell_{\mathcal{D}}(A_{\theta^*}(S)) = \min_{\theta \in \Theta_0} \ell_{\mathcal{D}}(A_\theta(S)) \quad (19)$$

Questa stima è fatta dividendo i dati di *training* in due sottoinsiemi S_{train} e S_{dev} . S_{dev} (detto insieme di validazione) è usato come sostituto del *test set*. L'algoritmo è eseguito su S_{train} per ogni valore dell'iperparametro Θ_0 . I predittori risultanti sono testati su S_{dev} per trovare il valore θ^* che minimizza l'errore. Una volta trovato θ^* si esegue A_{θ^*} sul *training set* originale, ottenendo il predittore finale.

6.3 Modifica dei parametri tramite *nested cross-validation*

Si vuole stimare (19):

$$\mathbb{E} \left[\min_{\theta \in \Theta_0} \ell_{\mathcal{D}}(A_{\theta}(S)) \right] \quad (20)$$

o, in altre parole, si vogliono stimare le performance di A_{θ} su un *training set* di dimensione fissata quando θ è scelto in base al *training set*.

Dato S , un modo veloce di stimare (20) è usare il miglior stimatore CV su $\{A_{\theta} : \theta \in \Theta_0\}$:

$$\min_{\theta \in \Theta_0} \ell_S^{\text{cv}}(A_{\theta})$$

Nonostante questa stima tenda a sottostimare (20), in pratica la differenza è tipicamente piccola.

Una miglior stima, seppur computazionalmente più pesante, è ottenuta tramite la *nested CV*:

Data: *dataset* S
 Dividi S in S_1, \dots, S_K
for $i = 1, \dots, K$ **do**
 $S_{-i} = S \setminus S_i$
 Esegui CV su S_{-i} per ogni $\theta \in \Theta_0$ e trova $\theta_i = \underset{\theta \in \Theta_0}{\operatorname{argmin}} \ell_{S_{-i}}^{\text{cv}}(A_{\theta})$
 $h_i = A_{\theta_i}(S_{-i})$
 $\varepsilon_i = \ell_{S_i}(h_i)$
end
Output: $(\varepsilon_1 + \dots + \varepsilon_K)/K$

Algoritmo 1: K -fold *nested cross-validation*

7 Consistenza e algoritmi non parametrici

7.1 Consistenza

La consistenza è una proprietà asintotica che certifica che il rischio statistico del predittore generato da un *learning algorithm* converga al rischio di Bayes all'aumentare della dimensione del *training set*. Ricordando che $A(S_m)$ è il predittore generato dal *learning algorithm* A sul *training set* S_m di dimensione m , **un *learning algorithm* A è consistente rispetto alla funzione di loss ℓ se per ogni distribuzione D si ha che:**

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \mathbb{E}[\ell_D(A(S_m))] = \ell_D(f^*)$$

In alcuni casi si può definire la consistenza rispetto ad una classe limitata di distribuzioni \mathcal{D} . Per esempio, nella classificazione binaria ci si può limitare a tutte le distribuzioni \mathcal{D} tali che la funzione $\eta(x) = \mathbb{P}(Y = 1 \mid X = x)$ sia una funzione di Lipschitz su \mathcal{X} . Questo avviene quando:

$$\exists c : 0 < c < \infty \wedge |\eta(x) - \eta(x')| \leq c\|x - x'\| \quad \forall x, x' \in \mathcal{X}$$

7.2 Algoritmi non parametrici

Dato un *learning algorithm* A , sia \mathcal{H}_m l'insieme dei predittori generati da A su *training set* di dimensione m . A è **non parametrico se il suo errore di approssimazione si annulla al crescere di m** . Formalmente:

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \min_{h \in \mathcal{H}_m} \ell_D(h) = \ell_D(f^*)$$

Gli algoritmi non parametrici si riconoscono per:

- La dimensione in memoria dei loro predittori tende a crescere insieme alla dimensione del *training set*;
- Per valori sufficientemente grandi di m , ci sono predittori in \mathcal{H}_m con un *training error* vicino alla zero.

Due esempi di algoritmi non parametrici sono k -NN e l'algoritmo greedy per i classificatori ad albero decisionale.

7.2.1 k -NN

L'algoritmo k -NN classico è non parametrico ma non si conosce se sia consistente per valori fissati di k . L'unica cosa che si conosce è che, per ogni distribuzione \mathcal{D} si ha:

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \mathbb{E}[\ell_D(k\text{-NN}(S_m))] \leq \ell_D(f^*) + 2\sqrt{\frac{\ell_D(f^*)}{k}}$$

Tuttavia, se si sceglie k come una funzione k_m della dimensione del *training set*, allora l'algoritmo diventerebbe consistente a patto che $k_m \rightarrow \infty$ e $k_m = o(m)$.

7.2.2 Algoritmo greedy per *tree classifier*

Siano:

$$\mathcal{X}_\ell = \{x \in \mathbb{R}^d : x \text{ è indirizzato a } \ell\}$$

$$N_\ell = |\{x \in S : x \text{ è indirizzato a } \ell\}|$$

L'algoritmo greedy per la costruzione di *tree classifier* è consistente quando, per $m \rightarrow \infty$, le seguenti due condizioni sono rispettate:

1. Il diametro di \mathcal{X}_ℓ va a zero;
2. $N_\ell \rightarrow \infty$.

In altre parole, l'albero deve crescere senza limiti ma non troppo velocemente.

7.3 Algoritmi non consistenti e non parametrici

Se un algoritmo è non parametrico non è detto sia consistente. Un esempio di algoritmo non parametrico e non consistente è l'algoritmo greedy per *tree classifier* binari che utilizza il rischio statistico come criterio di separazione. In altre parole, invece di sostituire la foglia che provoca il maggior calo del *training error*, si assume che l'algoritmo è in grado di scegliere la foglia che provoca il maggior calo nel rischio per la funzione di *zero-one loss*.

La consistenza di un algoritmo è sempre preferibile? Nella pratica no. Può infatti succedere che la velocità di convergenza di un algoritmo consistente sia più bassa di quella di un algoritmo non consistente.

7.3.1 Teorema *No Free Lunch*

Teorema 1 (*No Free Lunch*). Per qualsiasi sequenza a_1, a_2, \dots di numeri positivi che converge a 0, che rispetta:

$$\frac{1}{16} \geq a_1 \geq a_2 \geq \dots \geq 0$$

e per ogni learning algorithm A consistente per la classificazione binaria con la zero-one loss, esiste una distribuzione \mathcal{D} tale che:

$$\forall m \geq 1 \quad \ell_{\mathcal{D}}(f^*) = 0 \wedge \mathbb{E}[\ell_{\mathcal{D}}(A(S_m))] \geq a_m$$

Questo teorema non previene che un algoritmo consistente converga rapidamente al rischio di Bayes su una distribuzione \mathcal{D} . Quello che il teorema mostra è che se A converge al rischio di Bayes per una qualsiasi distribuzione, allora convergerà in modo arbitrariamente lento per alcune di queste distribuzioni.

7.4 Maledizione della dimensionalità

Per la classificazione binaria, si può riassumere la situazione come segue:

- Senza assunzioni su η , non c'è garanzia di convergenza a $\ell_{\mathcal{D}}(f^*)$ e il tipico tasso di convergenza in una classe parametrica (o finita) \mathcal{H} è $m^{-1/2}$;
- Con l'assunzione di Lipschitz su η , il tipico tasso di convergenza a $\ell_{\mathcal{D}}(f^*)$ è $m^{-1/(d+1)}$, esponenzialmente più lenta del caso parametrico del punto precedente;

Si noti che il tasso di convergenza $m^{-1/(d+1)}$ implica che per andare vicino al rischio di Bayes di massimo ε , c'è bisogno di un *training set* di dimensioni dell'ordine di $\varepsilon^{-(d+1)}$. **Questa dipendenza esponenziale dal numero di feature è conosciuta come maledizione della dimensionalità (*curse of dimensionality*) e si riferisce alla difficoltà di apprendimento in un contesto non parametrico quando i *data point* si trovano in uno spazio ad alta dimensione (con tante *feature*).**

8 Analisi del rischio per gli algoritmi NN

In questa sezione si analizzerà il rischio della funzione *zero-one loss* su classificatori binari 1-NN rispetto al *training set*.

8.1 Rischio statistico di 1-NN

Con dovute assunzioni sulla distribuzione \mathcal{D} , si può dimostrare che:

$$\mathbb{E}[\ell_{\mathcal{D}}(A(S_m))] \leq 2\ell_{\mathcal{D}}(f^*) + \varepsilon_m$$

Dove A denota l'algoritmo 1-NN, S_m il *training set* di dimensione m e ε_m **è una quantità che si azzerà per $m \rightarrow \infty$** . Il fatto che si riesca a confrontare $\mathbb{E}[\ell_{\mathcal{D}}(A(S_m))]$ direttamente con il rischio di Bayes mostra come, in un certo senso, gli algoritmi 1-NN siano potenti.

Più nello specifico, **assumendo che η sia una funzione di Lipschitz su \mathcal{X} con una costante $c > 0$** , si può dire che:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[\ell_{\mathcal{D}}(A(S_m))] &\leq 2\ell_{\mathcal{D}}(f^*) + c \mathbb{E}[\|X - X_{\pi(S,X)}\|] \\ &\leq 2\ell_{\mathcal{D}}(f^*) + 4c\sqrt{d}m^{-1/(d+1)} \end{aligned}$$

Si può quindi dire che asintoticamente, con $m \rightarrow \infty$, il rischio di 1-NN oscilla tra $\ell_{\mathcal{D}}(f^*)$ e $2\ell_{\mathcal{D}}(f^*)$.

9 Predittori lineari

Un predittore lineare su $\mathcal{X} = \mathbb{R}^d$ è una funzione $h : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ tale che $h(x) = f(w^\top x)$ con $w \in \mathbb{R}^d$; $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ è detta funzione di attivazione.

Nelle attività di regressione lineare, f è la funzione identità, e quindi $h(x) = w^\top x$.

In quelle di classificazione lineare invece, $h(x) = \text{sgn}(w^\top x - c)$ con $c \in \mathbb{R}$, dove:

$$\text{sgn}(z) = \begin{cases} 1 & z > 0 \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

9.1 Iperpiani

Un iperpiano può essere descritto da un'equazione lineare della seguente forma:

$$w_1 x_1 + w_2 x_2 + \dots + w_n x_n = c$$

$$\begin{array}{c} \downarrow \\ \underbrace{\begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_n \end{bmatrix}}_w^\top \cdot \underbrace{\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}}_x = c \\ \downarrow \\ w^\top x = c \end{array}$$

Si può quindi dire che un iperpiano con coefficienti (w, c) è definito da $\{x \in \mathbb{R}^d : w^\top x = c\}$ dove:

$$w^\top x = \|w\| \cdot \|x\| \cos \theta \quad (21)$$

e θ è l'angolo tra w e x .

I semispazi H^+ e H^- definiti dall'iperpiano $\{x \in \mathbb{R}^d : w^\top x = c\}$ sono:

$$H^+ = \{x \in \mathbb{R}^d : w^\top x > c\}$$

$$H^- = \{x \in \mathbb{R}^d : w^\top x \leq c\}$$

Geometricamente, un classificatore lineare è definito da:

$$h(x) = \begin{cases} +1 & x \in H^+ \\ -1 & x \in H^- \end{cases}$$

9.2 Training di classificatori lineari

Si ricordi che un classificatore lineare è un predittore h tale che $h(x) = \text{sgn}(w^\top x)$. Applicando (21) si ottiene che:

$$\begin{aligned} h(x) &= \text{sgn}(w^\top x) \\ &= \text{sgn}(\|w\| \cdot \|x\| \cos \theta) \\ &= \text{sgn}(\cos \theta) \end{aligned}$$

Questo ci mostra che il valore di $\|w\|$ è irrilevante e si dovrebbe prendere $\|w\| = 1$. Inoltre la *zero-one loss* $\mathbb{I}\{h(x_t) \neq y_t\}$ può essere riscritta come $\mathbb{I}\{y_t w^\top x_t \leq 0\}$.