

# Statistical methods for machine learning

Mauro Tellaroli

## Indice

<b>1</b>	<b>Introduzione</b>	<b>2</b>
1.1	Definizioni fondamentali . . . . .	2
1.1.1	<i>Label set</i> $\mathcal{Y}$ . . . . .	2
1.1.2	<i>Loss function</i> $\ell$ . . . . .	2
1.1.3	<i>Data domain</i> $\mathcal{X}$ . . . . .	3
1.1.4	Predittori $f$ . . . . .	4
1.1.5	Esempi . . . . .	4
1.1.6	<i>Test set</i> e <i>test error</i> . . . . .	4
1.1.7	<i>Learning algorithm</i> $A$ . . . . .	4
1.1.8	<i>Training error</i> $\ell_S$ . . . . .	4
1.2	Empirical Risk Minimization (ERM) . . . . .	5
1.2.1	Definizione . . . . .	5
1.2.2	Predittori con <i>test error</i> elevato . . . . .	5
1.2.3	<i>Overfitting</i> e <i>underfitting</i> . . . . .	6
1.2.4	Etichette rumorose . . . . .	6
<b>2</b>	<b>Gli algoritmi <i>Nearest Neighbor</i></b>	<b>7</b>
2.1	<i>Nearest Neighbor</i> (NN) . . . . .	7
2.1.1	Definizione . . . . .	7
2.1.2	Efficienza ed efficacia . . . . .	8
2.2	$k$ - <i>Nearest Neighbor</i> ( $k$ -NN) . . . . .	8
2.2.1	Definizione . . . . .	8
2.2.2	Efficienza ed efficacia . . . . .	8
<b>3</b>	<b>Tree Predictors</b>	<b>10</b>
3.1	Definizione . . . . .	10
3.2	Costruzione di un <i>tree predictor</i> . . . . .	11
3.2.1	Idea generale . . . . .	11
3.2.2	<i>Training error</i> . . . . .	11
3.2.3	Crescita dell'albero e <i>training error</i> . . . . .	13
3.2.4	Algoritmo generale . . . . .	14
3.3	<i>Overfitting</i> . . . . .	14
3.4	Interpretabilità . . . . .	15

# 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 $\ell$

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**  $\ell$  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,  $\mathcal{Y} = \{\text{"piove"}, \text{"non piove"}\}$  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**:

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

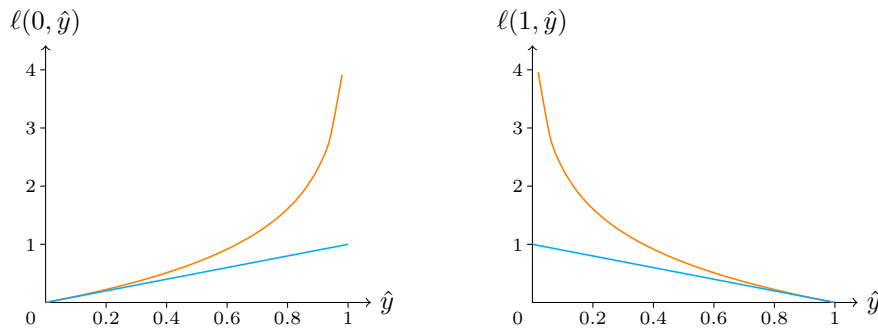


Figura 1: Confronto tra *absolute loss* e *logarithmic loss*; a sinistra il caso  $y = 0$ , a destra  $y = 1$ .

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*  $\ell$ , il *test set* viene usato per calcolare il **test error** di un predittore  $f$ :

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

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*.

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

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 $\ell_S$

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  $\ell$  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  $\ell_S$  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  $\ell_S$ .

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 predurrà l'etichetta più presente tra i punti vicini. Se non c'è una maggioranza di etichette tra i punti più vicini si predurrà 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):

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

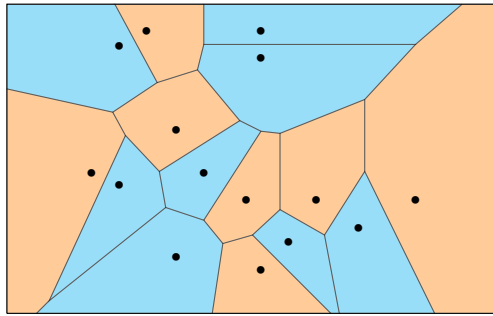


Figura 2: Diagramma di Voronoi in  $\mathbb{R}^2$ ; tutti i punti  $x$  interni a una cella con centro  $\bullet x_t$  sono tali che  $h_{NN}(x) = y_t$

### 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  $h_{\text{NN}}$  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:

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

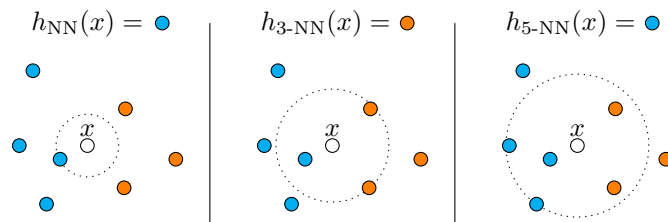


Figura 3: Esempi di  $h_{k\text{-NN}}$  con  $\mathcal{X} = \mathbb{R}^2$ ; si noti come, con lo stesso *training set*, la predizione cambia al variare di  $k$ .

### 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:

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

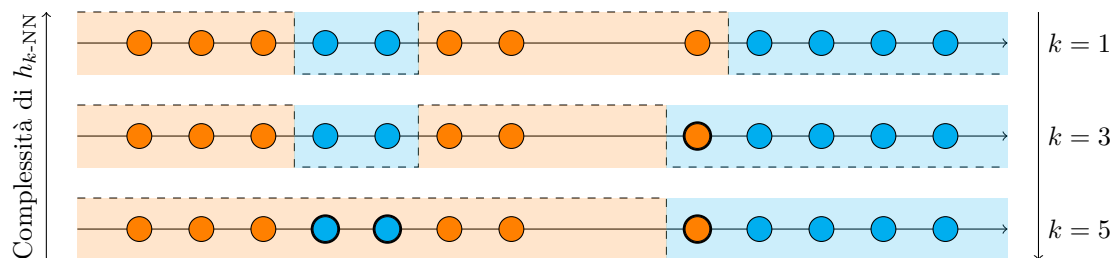


Figura 4: Esempi di  $h_{k\text{-NN}}$  con  $\mathcal{X} = \mathbb{R}$ .

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  $\in \{\text{sì}, \text{no}\}$

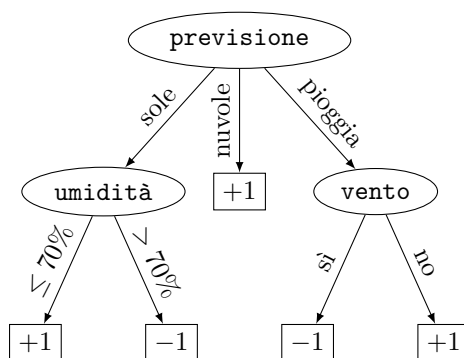


Figura 5: Esempio classico di *tree classifier* per una classificazione binaria.

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  $\ell$ , si restituisce l'etichetta  $y \in \mathcal{Y}$  associata a  $\ell$ ;
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  $\ell$ , si dirà che l'esempio  $x$  è indirizzato a  $\ell$ .

## 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  $\ell$ , si vuole capire che etichetta assegnarle per minimizzare  $\ell_S$ .**

Si definisca:

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

$S_\ell$  è quindi l'insieme degli esempi di *training* che sono indirizzati alla foglia  $\ell$ . Si divida ora  $S_\ell$  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  $\ell$  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  $\ell$  hanno etichetta positiva, allora l'etichetta che bisognerà dare a  $\ell$ , per minimizzare il suo errore  $\ell_S$ , sarà l'etichetta positiva (chiaramente lo stesso discorso vale per l'etichetta negativa); questa intuizione può essere quindi usata per assegnare l'etichetta  $y_\ell$  alla foglia  $\ell$  nel seguente modo:

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

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

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

Quindi se il valore appena scritto è l'errore che una singola foglia  $\ell$  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  $\psi$ , definita in  $[0, 1]$ :

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

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

### 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  $\ell'$  e  $\ell''$ ). Si deve decidere che etichette assegnare alle foglie  $\ell'$  e  $\ell''$ ;

$x_t$	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*

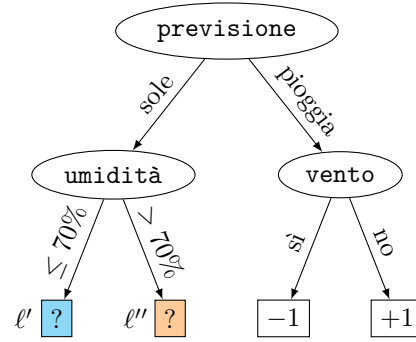


Figura 6: Esempio di *tree classifier* “in costruzione”.

Si prenda  $\ell'$ :

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

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

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

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

Si prenda infine  $\ell''$ :

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

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

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

Il **settantacinque per cento** degli esempi che raggiungono  $\ell''$  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  $\ell$  con un nodo interno e due nuove foglie  $\ell'$  e  $\ell''$ , come mostrato in figura 7. **Può il *training error* del nuovo albero espanso crescere rispetto a quello originale?**

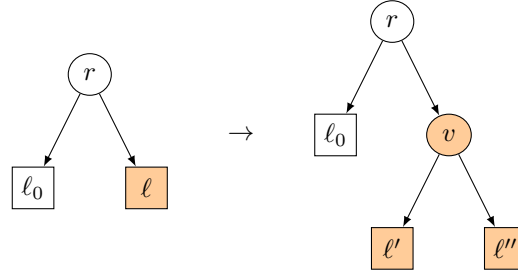


Figura 7: Un passaggio della crescita dell'albero: la foglia  $\ell$  viene rimpiazzata da un nodo interno  $v$  con due nuove foglie  $\ell'$  e  $\ell''$ .

L'apporto che la foglia  $\ell$  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  $\ell$  saranno ora divisi tra  $\ell'$  e  $\ell''$ :

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

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  $\ell$  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  $\psi$  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  $\ell$  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  $\ell$
- (b)  $S_\ell = S$
- (c)  $y_\ell$  = etichetta più frequente in  $S_\ell$

#### 2. Main loop:

- (a) Scegli una foglia  $\ell$  e sostituiscila con un nodo interno  $v$  e due nuove foglie  $\ell'$  e  $\ell''$
- (b) Scegli un attributo  $i$  e un test  $f : \mathcal{X}_i \rightarrow \{1, 2\}$
- (c) Associa il test  $f$  a  $v$  e partiziona  $S_\ell$  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  $\ell'$  l'etichetta più frequente in  $S_{\ell'}$
- (e) Associa a  $\ell''$  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  $\psi$  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  $\ell$  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  $\psi$ . 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 ( $\psi_1(p) = \min\{p, 1 - p\}$ ):

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

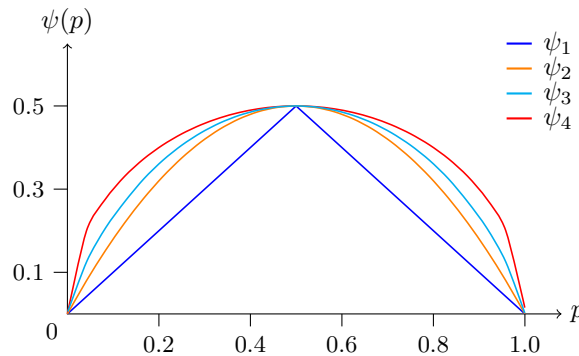


Figura 8: Grafici delle funzioni  $\psi$

### 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:

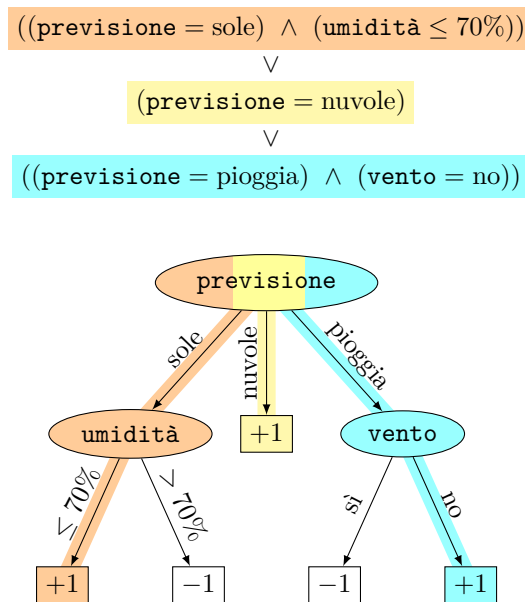


Figura 9: *Tree predictor*