

Algoritmi per l'intelligenza artificiale

Simone Colli
`authoremail`

Appunti del corso tenuto dal **Prof. Vincenzo Bonnici**

Università degli Studi di Parma
Anno Accademico 2025/2026

Indice

1	Introduzione	4
1.1	Apprendimento automatico supervisionato	4
1.2	Apprendimento automatico semi-supervisionato	5
1.2.1	Presupposti dell'apprendimento semi-supervisionato	5
1.3	Apprendimento automatico non supervisionato	5
1.3.1	Clustering	6
1.3.2	Riduzione della dimensionalità	6
1.3.3	Analisi esplorativa	6
1.4	Apprendimento per rinforzo	6
2	Classificazione	7
2.1	Costruire un classificatore	8
2.2	Proprietà di un classificatore	8
2.3	Il problema dell'overfitting	9
2.4	Validazione	9
2.5	Gestione delle feature e del rumore	9
2.5.1	Selezione delle feature	9
2.5.2	Rumore e outlier	9
2.6	Valutazione degli errori	10
2.7	Fasi di un sistema di classificazione	10
3	Tecniche di validazione per la classificazione	11
3.1	Modello di validazione base: Training e Test Set	11
3.2	Metriche di valutazione	12
3.3	Accuracy	14
3.4	Altri indici e matrice di confusione	15
3.4.1	Matrice di confusione	15
3.5	Area Under the Curve (AUC) e curva ROC	15
3.6	Classificazione multi-classe	16
3.6.1	Micro-average	16
3.6.2	Macro-average	17
3.6.3	Generalizzazione di AUC (Metodo Hand & Till)	17
3.7	Cross-validation	18
3.7.1	Cross-validazione esaustiva	19
3.7.2	Cross-validazione non esaustiva	19
4	Algoritmi di classificazione	20
4.1	Tipologie di modelli di classificazione	20
4.2	k-Nearest Neighbors (kNN)	20
4.2.1	Potere predittivo e scelta di k	21
4.2.2	Weighted kNN	21
4.3	Alberi di decisione	22
4.3.1	Costruzione dell'albero	22
4.3.2	Goodness functions	22

4.3.3	Information gain	23
4.3.4	Indice di Gini	25
4.3.5	Pruning	26
4.4	Metodi consenso	29
4.4.1	Bagging	29
4.4.2	Random Forest	29
4.4.3	Boosting	31
4.5	Support vector machines	32
4.5.1	SVM Lineari (Dati Linearmente Separabili)	33

1 Introduzione

Nel campo dell'apprendimento automatico classico, le attività sono tradizionalmente suddivise in quattro rami principali:

- Apprendimento supervisionato (supervised).
- Apprendimento semi-supervisionato (semi-supervised).
- Apprendimento non supervisionato (unsupervised).
- Apprendimento per rinforzo (reinforcement learning).

La distinzione primaria tra queste metodologie di ML risiede nel livello di disponibilità dei “dati di verità di base” (ground truth). Il **ground truth** è definito come la conoscenza preliminare dell'output che il modello dovrebbe produrre per un dato input, basata sull'osservazione diretta in contrapposizione all'inferenza.

1.1 Apprendimento automatico supervisionato

L'apprendimento automatico supervisionato ha come obiettivo l'apprendimento di una funzione che, dato un **campione di dati** e i relativi output desiderati, riesca ad approssimare la funzione sottostante che mappa gli input agli output.

Questa metodologia è comunemente applicata in due principali contesti:

- **Classificazione**: quando si desidera mappare l'input a etichette di output discrete.
- **Regressione**: quando l'obiettivo è mappare l'input a un output continuo.

In entrambi i casi, lo scopo è identificare relazioni o strutture specifiche nei dati di input che consentano di generare output corretti in modo efficace. È fondamentale notare che la correttezza dell'output è determinata interamente dai dati di addestramento, i quali costituiscono la “verità di base” che il modello apprende.

Tuttavia, l'efficacia del modello può essere significativamente ridotta dalla presenza di etichette “rumorose” o “errate” all'interno dei dati stessi. Algoritmi notevoli nell'apprendimento supervisionato includono la regressione logistica, il classificatore bayesiano naif, le macchine a vettori di supporto, le reti neurali artificiali e le foreste casuali.

Il successo di un modello di ML dipende dalla sua capacità di generalizzazione. Questo concetto è strettamente connesso alla complessità del modello, che si riferisce alla complessità della funzione che si sta cercando di apprendere. Se si dispone di una quantità limitata di dati o se questi non sono distribuiti uniformemente, è cruciale optare per un modello a bassa complessità per evitare situazioni di **overfitting** (sovradattamento). L'overfitting si verifica quando il modello apprende la funzione adattandosi troppo bene ai soli dati di addestramento, senza cogliere la tendenza o la struttura effettiva che guida l'output, e quindi non riesce a generalizzare a nuovi punti dati.

La gestione della generalizzazione è formalizzata tramite il compromesso **bias-varianza** (bias-variance tradeoff). Così facendo il modello presenterà un equilibrio tra:

- **Bias** (distorsione): l'errore sistematico dovuto a ipotesi errate nel processo di apprendimento.
- **Varianza**: la quantità in base alla quale l'errore può variare tra diversi set di dati.

La difficoltà si presenta nel creare un modello che cattura accuratamente le regolarità dei dati di addestramento e che sia in grado di generalizzare bene a dati non visti in precedenza.

Generalmente, un aumento del bias (e una conseguente riduzione della varianza) porta a modelli con livelli di prestazione più stabili e garantiti, un fattore che può essere cruciale in certe applicazioni. Per ottenere una buona generalizzazione, la varianza del modello deve essere attentamente bilanciata in base alla dimensione e alla complessità dei dati di addestramento. Nello specifico, set di dati piccoli e semplici dovrebbero essere gestiti con modelli a bassa varianza, mentre set di dati grandi e complessi richiedono modelli con una varianza più elevata per poter catturare appieno la struttura sottostante dei dati.

1.2 Apprendimento automatico semi-supervisionato

L'apprendimento automatico semi-supervisionato (semi-supervised) mira a **etichettare i punti dati senza etichetta**. Per fare ciò, utilizza le conoscenze apprese da un piccolo numero di dati già etichettati.

Questa tecnica è utile in scenari dove ottenere dati etichettati è costoso o complesso. Ad esempio, nel rilevamento di messaggi inappropriati in un social network, è impraticabile etichettare manualmente ogni messaggio. Si può, invece, etichettare manualmente un piccolo sottoinsieme e usare tecniche semi-supervisionate per comprendere e classificare il resto dei contenuti.

Metodi comuni includono le **macchine vettoriali di supporto trasversali** e i **metodi basati su grafi** (come la propagazione delle etichette).

1.2.1 Presupposti dell'apprendimento semi-supervisionato

Per poter giustificare l'uso di pochi dati etichettati per trarre conclusioni su un grande insieme di dati non etichettati, i metodi semi-supervisionati si basano su alcuni presupposti fondamentali:

- **Continuità:** Si assume che punti dati “vicini” tra loro abbiano maggiori probabilità di condividere la stessa etichetta.
- **Ipotesi del cluster:** Si presume che i dati formino naturalmente dei cluster discreti. Di conseguenza, punti nello stesso cluster hanno maggiori probabilità di condividere un'etichetta.
- **Presupposto molteplice (manifold):** Si ipotizza che i dati si trovino approssimativamente in uno spazio di dimensioni inferiori (un *manifold*) rispetto allo spazio di input originale. Questo è rilevante quando un sistema con pochi parametri, non osservabile direttamente, produce output osservabili ad alta dimensione.

1.3 Apprendimento automatico non supervisionato

L'apprendimento automatico non supervisionato (unsupervised) opera **senza output etichettati**. Il suo obiettivo principale è quindi quello di **dedurre la struttura naturale** presente all'interno di un insieme di dati.

Questi metodi cercano di trovare modelli (pattern) intrinseci nei dati. Le attività più comuni in questo ambito sono:

- Il **clustering** (raggruppamento).
- L'apprendimento della **rappresentazione** (representation learning).

- La **stima della densità** (density estimation).

In tutti questi casi, si desidera comprendere la struttura intrinseca dei dati senza usare etichette fornite esplicitamente.

Algoritmi comuni includono il **clustering**, l'analisi dei componenti principali (**PCA**) e gli **auto-codificatori** (autoencoders).

Dato che non vengono fornite etichette, nella maggior parte dei metodi di apprendimento non supervisionato non esiste un modo specifico per confrontare le prestazioni del modello.

Le due tecniche principali per affrontare problemi di apprendimento non supervisionato sono il clustering e la riduzione della dimensionalità dei dati.

1.3.1 Clustering

Il clustering è una **tecnica esplorativa** che permette di aggregare dati in gruppi (detti *cluster*) senza avere una precedente conoscenza della loro appartenenza a tali gruppi. Si applica a dataset dove i dati al loro interno presentano elementi simili tra loro. All'interno di ogni singolo cluster si troveranno quindi dati che hanno molte **caratteristiche simili** tra loro. È un'ottima tecnica per trovare relazioni tra i dati.

1.3.2 Riduzione della dimensionalità

La riduzione della dimensionalità senza supervisione è un approccio molto usato nella **pre-elaborazione delle features**. L'obiettivo principale di questa tecnica è di **eliminare il “rumore”** dai dati.

Questa operazione può talvolta causare una minore prestazione predittiva. Tuttavia, può anche rendere lo spazio dimensionale più compatto, aiutando a **mantenere le informazioni più rilevanti**. Inoltre, è molto utile per la **rappresentazione dei dati**: dati in uno spazio delle caratteristiche ad elevata dimensionalità possono essere proiettati su uno spazio 1D, 2D o 3D per l'analisi visiva.

1.3.3 Analisi esplorativa

L'apprendimento non supervisionato è estremamente utile nell'**analisi esplorativa dei dati** (exploratory data analysis), poiché è in grado di **identificare automaticamente la struttura** nei dati. Ad esempio, se un analista volesse segmentare i consumatori, i metodi di clustering sarebbero un ottimo punto di partenza per l'analisi.

In situazioni dove è impraticabile o impossibile per un essere umano proporre tendenze nei dati, l'apprendimento non supervisionato può fornire **informazioni iniziali** che possono poi essere usate per testare o verificare singole ipotesi.

1.4 Apprendimento per rinforzo

L'apprendimento con rinforzo (reinforcement learning) ha l'obiettivo di realizzare **agenti autonomi**. Questi agenti devono essere in grado di scegliere azioni da compiere per conseguire determinati obiettivi. Questo avviene tramite l'interazione con l'ambiente in cui sono immersi, con lo scopo di massimizzare una nozione di **premio cumulativo**.

2 Classificazione

La classificazione è un'attività dell'apprendimento supervisionato che consiste nell'assegnare un'etichetta (o classe) a un dato sulla base di sue caratteristiche osservabili.

Nell'ambito della classificazione si parla di:

- **Feature** (caratteristiche): un aspetto direttamente osservabile di un fenomeno per il quale si può registrare una misura, che sia quantitativa (numerica) o categoriale (come vero/falso, rosso/verde, ecc.).
- **Classe**: un concetto astratto e generale che “spiega” le osservazioni. L'assegnazione a una classe costituisce una sintesi delle feature osservate.
- **Label** (o etichetta): il nome specifico di una classe.

Tuttavia, alcuni dati possono rendere più complesso l'assegnazione delle classi; questi esempi sono tecnicamente noti come **outlier statistici**.

Definizione 2.1: Classificazione

ata una **collezione di dati**, definita come un insieme P di M -uple del tipo:

$$m_i = (x_{1i}, \dots, x_{Mi}) \in D_1 \times \dots \times D_M$$

dove ogni x_{ji} rappresenta una feature ed appartiene ad un possibile dominio di valori D_j . L'insieme P è partizionato in k classi, le cui etichette compongono l'insieme $L = (A_1, \dots, A_k)$. Un **algoritmo di classificazione** è una funzione computabile $f : P \mapsto L$, tale che:

$$f(m \in P) = f(x_1, \dots, x_m) \in L$$

Tale funzione $f(m)$ assegna a ogni dato m un'etichetta A_i scelta tra quelle presenti in L cercando di stimare l'etichetta reale del stesso.

Lo schema di classificazione può produrre due tipi di risultati:

- **Successo** (hit) se l'etichetta stimata $f(m)$ coincide con l'etichetta reale del dato.
- **Fallimento** (miss) se l'etichetta stimata è errata.

È generalmente impossibile creare classificatori *error free*. È quindi fondamentale fornire stime sul tasso percentuale di hit/miss che lo schema può ottenere. Il livello tollerabile di errore dipende dalla **criticità dell'applicazione**: per applicazioni industriali si può richiedere un tasso $< 5\%$, mentre per applicazioni mediche un tasso $> 0.5\%$ potrebbe essere già inaccettabile.

Esempio 2.1: Problema di classificazione: salmoni e branzino

Si consideri il problema di distinguere tra salmoni e branzini (sea bass) basandosi su alcune caratteristiche osservabili. Le **feature** utilizzate potrebbero essere la lunghezza, il peso in grammi e il colore dominante (un attributo qualitativo scelto da un insieme predefinito come {blu, grigio, verde}). I dati vengono tipicamente organizzati in una tabella, dove ogni riga corrisponde a un pesce e le colonne ne descrivono le feature.

L'obiettivo è costruire un classificatore che, per ogni nuovo pesce osservato, sia in grado di riempire la colonna "specie" con l'etichetta corretta ("salmone" o "branzino"). È importante notare che gli errori non hanno lo stesso costo: confondere un salmone (pesce pregiato) con un branzino (meno pregiato) è un errore più grave del contrario.

Esempio 2.2: Problema di classificazione: studenti e carriera

Si consideri il problema di predire il futuro successo economico degli studenti universitari. Le **feature** raccolte per ogni studente includono dati anagrafici, il censo familiare e i voti conseguiti durante la carriera universitaria. L'obiettivo è costruire un classificatore che predica in quale **classe** di reddito si troverà lo studente dieci anni dopo la laurea. Le etichette (o **label**) potrebbero essere {"reddito basso", "reddito medio", "reddito alto"}.

È importante notare che, a causa dell'elevato numero di fattori non misurabili che influenzano la vita di un individuo, una predizione del genere ha un valore limitato se applicata al singolo studente, che ha un'alta probabilità di essere classificato erroneamente.

Tuttavia, questo tipo di analisi è estremamente utile a livello statistico e aggregato, per comprendere le tendenze generali di un'intera popolazione studentesca e informare politiche educative o economiche.

2.1 Costruire un classificatore

Il processo di costruzione di un classificatore automatico simula il fenomeno dell'apprendimento umano o animale, noto come **training** (addestramento). L'idea è **dedurre regole generali**, applicabili a record non ancora classificati, partendo dall'osservazione di esempi già noti e ben classificati.

Si definisce **universo delle osservazioni** l'insieme complessivo dei record (passati, presenti e futuri) relativi ad un fenomeno. Molti algoritmi iniziano esaminando un sottoinsieme di questo universo, già classificato e ben compreso.

Questo insieme di "allenamento", chiamato **Training Set (TS)**, è il deposito di informazioni iniziali da cui l'algoritmo ricava le "regole" di classificazione. Le regole ricavate saranno di vario tipo: statistiche, probabilistiche, fuzzy, funzioni discendenti, ecc.

2.2 Proprietà di un classificatore

Un buon insieme di regole di classificazione deve avere tre importanti proprietà:

- **Semplicità:** Le regole non devono essere troppo complicate, per garantire efficienza e basso costo computazionale in fase di classificazione.
- **Correttezza sul TS:** Le regole devono essere statisticamente sufficientemente corrette quando applicate al medesimo Training Set che le ha generate.
- **Generalizzabilità:** Le regole devono essere statisticamente corrette anche quando applicate al resto dei record dell'universo (dati nuovi, non visti).

Statisticamente corretto è un termine che indica che il tasso dei miss non deve superare certe soglie di tolleranza che dipendono dalla criticità delle applicazioni.

2.3 Il problema dell'overfitting

Le proprietà di correttezza sul TS e di generalizzabilità sono spesso in conflitto tra loro. Questo paradosso è noto come **overfitting** (sovradattamento).

L'overfitting si verifica quando un modello si adatta “troppo bene” ai dati del Training Set. Un modello molto complesso può imparare a memoria le peculiarità e persino il rumore casuale presente nel TS, ottenendo una correttezza perfetta su di esso. Tuttavia, tale modello non avrà appreso la “tendenza” generale dei dati e fallirà nel generalizzare a nuovi record, poiché la frontiera di decisione che ha appreso è eccessivamente complessa e specifica per il campione di training.

L'obiettivo non è quindi minimizzare l'errore sul TS (che porterebbe a un modello complesso e in overfitting), ma trovare un equilibrio: un modello (es. una retta o una curva semplice) che, pur commettendo qualche errore sul TS, catturi la struttura di fondo dei dati e possa quindi generalizzare meglio.

2.4 Validazione

Per “convalidare” la proprietà di generalizzazione di un insieme di regole, si utilizza un metodo che prevede, oltre al TS, un altro insieme di record già etichettati, detto **Control Set (CS)** o **Test Set**.

Il CS **non** viene utilizzato durante la fase di training (cioè per la sintesi delle regole). Viene usato solo dopo che le regole sono state definite. Se le regole mostrano sul CS un tasso di errore (miss) simile a quello ottenuto sul TS, allora si ritiene che le regole siano **generalizzabili**.

Poiché anche il CS è un campione casuale, per una stima più precisa è buona norma ripetere i test con diversi CS, spesso creati tramite strategie di randomizzazione nella selezione del TS e del CS dall'universo disponibile.

2.5 Gestione delle feature e del rumore

Nella costruzione di un classificatore è cruciale gestire sia la selezione delle feature che la presenza di rumore.

2.5.1 Selezione delle feature

Spesso si rilevano molte feature, ma non tutte sono utili; alcune possono essere sovrabbondanti o addirittura dannose. Combinare più feature (es. lunghezza e luminosità dei pesci) è spesso una strategia conveniente, ma non è detto che sia sempre la migliore. L'inclusione di troppe feature, specialmente se irrilevanti, può amplificare il rumore e confondere il classificatore.

Una buona pratica è scegliere feature che siano **invarianti** alle trasformazioni tipiche della situazione sperimentale (es. il peso di un pesce è invariante alle condizioni di luce, la luminanza no). Inoltre, deve esistere una probabile relazione tra le feature misurate e la classe da predire.

2.5.2 Rumore e outlier

I dati del mondo reale contengono inevitabilmente **rumore**, ovvero perturbazioni dovute a fenomeni non controllabili o non noti. Le cause di tale spostamento dai valori “ideali” possono essere:

- **Endogene**: Interne al fenomeno (es. un pesce con una dieta o storia anomala).
- **Esogene**: Dovute all'osservatore o allo strumento utilizzato (es. macchina fotografica starata, etichettatore distratto).

I dati molto “fuori norma” rispetto ai valori tipici di una classe sono definiti **outlier**. Un buon algoritmo di classificazione deve essere **robusto**, ovvero deve avere una forma di “protezione” o resistenza alle deviazioni che il rumore impone al processo decisionale.

2.6 Valutazione degli errori

Contare gli errori è essenziale, ma una singola percentuale di errore non è sufficientemente descrittiva. Questo perché non tutti gli errori sono uguali: i **costi degli errori** spesso **non sono uniformi** o simmetrici.

Ad esempio, in una diagnosi medica:

- Classificare un sano come malato (Falso Positivo) è un errore con un costo relativamente basso (paura, un test aggiuntivo).
- Classificare un malato come sano (Falso Negativo) è un errore gravissimo, che ritarda la diagnosi e può costare la vita al paziente.

Per analizzare questa asimmetria si usa la **matrice di confusione**. È una griglia quadrata che riporta quante istanze della classe “reale” (sulle colonne) sono state assegnate alla classe “prevista” (sulle righe).

Un classificatore perfetto ha come matrice di confusione la matrice identica (tutti i valori sulla diagonale principale, zero altrove). Un buon classificatore avrà valori percentuali bassi al di fuori della diagonale principale.

2.7 Fasi di un sistema di classificazione

Il processo di classificazione automatica si articola in diverse fasi:

1. **Sensing (o sampling)**: Raccolta dei dati dal mondo fisico e loro digitalizzazione.
2. **Segmentazione**: Partizione dei dati in unità significative, pulizia ed eliminazione di dati irrilevanti.
3. **Estrazione delle feature**: Misurazione delle caratteristiche (quantitative o qualitative). È cruciale scegliere feature invarianti e rilevanti.
4. **Classificazione**: Esecuzione dell'algoritmo scelto per l'assegnazione delle etichette.
5. **Post-processing**: Valutazione della qualità della classificazione e dei costi associati agli errori.
6. **Decisione**: Utilizzo effettivo del classificatore per risolvere il problema reale.

La costruzione di un classificatore è un **ciclo iterativo** che prevede la raccolta dei dati, la selezione delle feature, la scelta di un modello matematico, il training dell'algoritmo e infine la sua valutazione, ripetendo i passi per migliorare le prestazioni.

3 Tecniche di validazione per la classificazione

Dopo aver costruito un modello di classificazione, è fondamentale valutarne le performance. A differenza della regressione, dove si cerca di predire un valore numerico di output dato uno o più valori di input, nella classificazione si vuole predire la classe di un oggetto dato uno o più dati di input di qualsiasi tipo (numerici, categorici, testuali, ecc.).

Per questo motivo gli strumenti che si possono applicare per valutare un modello di classificazione sono sostanzialmente diversi rispetto alle metriche utilizzate per valutare i modelli di regressione.

3.1 Modello di validazione base: Training e Test Set

L'approccio base per la validazione consiste nel dividere, secondo una certa **percentuale** i dati disponibili in due insiemi:

- **Training set (TS):** Utilizzato per addestrare il classificatore. Le etichette (label) di questi dati sono usate per addestrare il classificatore.
- **Test set:** Utilizzato per valutare la bontà del modello. Le etichette di questo set vengono usate solo per verificare se il classificatore ha predetto correttamente.

L'obiettivo della validazione non è solo misurare l'errore, ma ha lo scopo di rispondere a domande più complesse, come:

- Il classificatore performa in modo bilanciato su tutte le classi?
- Ha delle preferenze?
- Tali preferenze da cosa dipendono?

Per questo motivo per la valutazione dei classificatori si utilizzano indici matematici che permettono sia di avere stime oggettive delle performance, sia di automatizzare anche altre fasi del processo della progettazione o sviluppo del classificatore.

Gli indici principali relativamente all'aspetto computazionale utilizzati per valutare un classificatore sono:

- **Accuratezza:** La bontà nel predire correttamente le etichette.
- **Robustezza:** La capacità di gestire dati con rumore o valori mancanti.
- **Velocità:** Include sia il tempo per costruire il modello (training time) sia il tempo per usarlo (classification/prediction time).
- **Scalabilità:** L'efficienza del modello su grandi dataset, specialmente se in memoria secondaria.
- **Interpretabilità:** La facilità con cui i risultati del modello possono essere compresi.

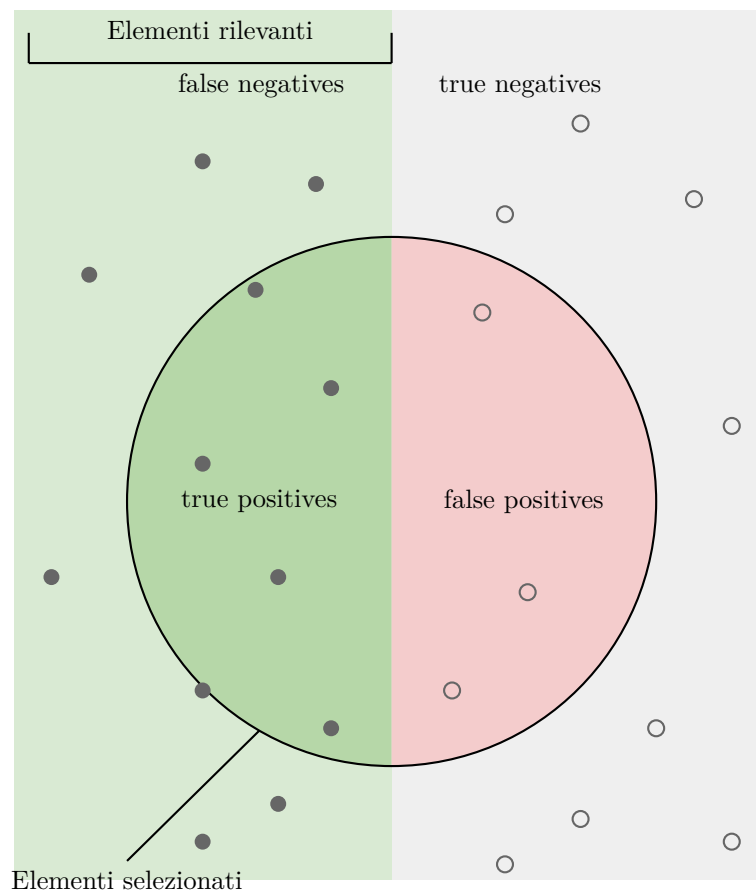
3.2 Metriche di valutazione

Per definire le metriche più comuni, si assume un problema di classificazione binaria. Si assume che l'insieme delle classi \mathbb{C} dell'esperimento sia composto da due classi: $\mathbb{C} = \{A, B\}$.

Relativamente ad una delle classi è possibile definire alcune misure per calcolare la bontà dell'algoritmo in valutare tale classe.

Data una classe di interesse (es. A, la classe “positiva”), i risultati della classificazione sul test set vengono divisi in quattro categorie:

- True positive (TP).
- True negative (TN).
- False positive (FP).
- False negative (FN).



Definizione 3.1: TP, TN, FP, FN

Sia $c : CS \mapsto \mathbb{C}$ la funzione che mappa ogni record $x \in CS$ nella sua classe reale e sia $\tilde{c} : CS \mapsto \mathbb{C}$ il classificatore che assegna una classe ad A .

Sia $C = \{A, B\}$ l'insieme delle classi, composto dalle classi A e B . Prendendo come riferimento la classe A è possibile dividere CS in 4 insiemi:

- **True positive (TP):** I record $x \in CS$ classificati **correttamente**, ovvero la cui classe reale è A , quindi $\tilde{c}(x) = c(x) = A$
- **True negative (TN):** I record $x \in CS$ classificati **correttamente**, ovvero la cui classe reale è B , quindi $\tilde{c}(x) = c(x) = B$
- **False positive (FP):** I record $x \in CS$ classificati **erroneamente**, ovvero la cui classe reale è B , quindi $\tilde{c}(x) = B \neq A = c(x)$
- **False negative (FN):** I record $x \in CS$ classificati **erroneamente**, ovvero la cui classe reale è A , quindi $\tilde{c}(x) = A \neq B = c(x)$

Basandosi su queste quattro categorie, è possibile definire le metriche di performance più utilizzate.

Definizione 3.2: Precision

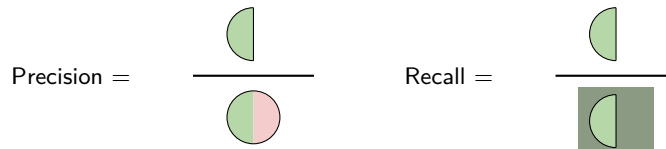
Sia $C = \{A, B\}$ l'insieme delle classi, composto dalle classi A e B . La precision (precisione) è la frazione di elementi rilevanti per una classe di riferimento, A , tra tutti gli elementi che il classificatore ha identificato come A . La precision misura quanto è "affidabile" la predizione positiva, ed è definita come:

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

Definizione 3.3: Recall

Sia $C = \{A, B\}$ l'insieme delle classi, composto dalle classi A e B . La recall (richiamo o sensibilità) è la frazione di elementi rilevanti (classi A) che sono stati correttamente classificati come A . Misura la capacità del classificatore di "trovare" tutti i positivi.

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

Rappresentazione grafica delle metriche

Nota 3.1: Valori ottenuti

Valori alti per entrambe le metriche indicano un buon classificatore. Spesso, però, si preferisce utilizzare un indice unico che le combini.

Definizione 3.4: F_1 -Score

Il F_1 -Score rappresenta la media armonica di precision e recall. Fornisce un equilibrio tra le due metriche.

$$F_1 = 2 \cdot \frac{Precision \cdot Recall}{Precision + Recall} = \frac{2 \cdot TP}{2 \cdot TP + FP + FN}$$

Come precision e recall, anche l' F_1 -Score ha un valore compreso tra 0 e 1. Maggiore è il valore, maggiore è la bontà del classificatore.

Nota 3.2: Overfitting

Sebbene un F_1 -Score alto sia desiderabile, valori molto prossimi a 1 possono essere un campanello d'allarme per l'overfitting.

3.3 Accuracy

Definizione 3.5: Accuracy

La accuracy (accuratezza) misura la quantità totale di oggetti classificati correttamente (sia positivi che negativi) rispetto al totale degli oggetti.

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

Nota 3.3: Accuratezza per dataset sbilanciati

L'accuracy standard è poco indicata se le classi non sono bilanciate. Ad esempio, in un dataset con 95 campioni negativi e 5 positivi, un classificatore “pigro” che predice sempre “negativo” otterrebbe un'accuratezza del 95%, pur essendo totalmente inutile nel riconoscere i positivi.

In situazione di sbilanciamento delle classi, si preferisce la Balanced accuracy.

Definizione 3.6: Balanced accuracy

La Balanced accuracy (accuratezza bilanciata) è la media tra la sensitività (per i positivi) e la specificità (per i negativi).

$$Balanced\ accuracy = \frac{TPR + TNR}{2}$$

dove:

- **TPR (True Positive Rate):** È la Recall/Sensitività: $TPR = \frac{TP}{TP+FN}$.
- **TNR (True Negative Rate):** È la Specificità: $TNR = \frac{TN}{TN+FP}$.

3.4 Altri indici e matrice di confusione

Definizione 3.7: False Discovery Rate (FDR)

Misura il tasso di errori di tipo I (“false scoperte” o Falsi positivi) rispetto a tutte le predizioni positive.

$$FDR = \frac{FP}{FP + TP} = 1 - Precision$$

3.4.1 Matrice di confusione

La matrice di confusione è una tabella che riassume le performance di un classificatore binario, incrociando le classi reali con quelle predette e mostrando i conteggi di TP, TN, FP e FN. È fondamentale perché non tutti gli errori hanno lo stesso costo, come discusso in precedenza (es. diagnosi medica errata).

		Actual class		
		Positive	Negative	
Predicted class	Positive	TP: True Positive	FP: False Positive (Type I Error)	Precision: TP ----- (TP + FP)
	Negative	FN: False Negative (Type II Error)	TN: True Negative	Negative Predictive Value: TN ----- (TN+FN)
		Recall or Sensitivity: TP ----- (TP + FN)	Specificity: TN ----- (TN + FP)	Accuracy: TP + TN ----- (TP + TN + FP + FN)

Figura 1: Esempio di matrice di confusione per classificazione binaria.

È importante notare che metriche come sensitività, precisione e specificità dipendono dalla classe presa in considerazione, mentre l'accuratezza è un indice globale.

3.5 Area Under the Curve (AUC) e curva ROC

L'AUC (Area Under the Curve) è una misura basata sulla curva ROC (Receiver Operating Characteristics).

Definizione 3.8: Curva ROC

Una curva ROC è un grafico che mostra le performance di un classificatore al variare di un suo parametro (es. una soglia). Mette in relazione il **True Positive Rate (TPR)** (sull'asse Y) con il **False Positive Rate (FPR)** (sull'asse X).

($FPR = 1 - Specificità = \frac{FP}{FP+TN}$).

Le curve ROC passano sempre per i punti (0,0) e (1,1). Esistono inoltre due condizioni limite che rappresentano due curve di riferimento:

- Una retta che taglia il grafico a 45 gradi passando per l'origine. Questa retta rappresenta il caso del **classificatore casuale** e l'area sottesa (AUC) è pari a 0.5.
- Una curva rappresentata dal segmento che dall'origine sale verticalmente al punto (0,1) e dal segmento che congiunge il punto (0,1) a (1,1). Questa curva ha un'area sottesa di valore pari a 1 e rappresenta il **classificatore perfetto**.

L'AUC, ha un valore compreso tra 0 e 1, e misura l'intera area bidimensionale sotto la curva ROC.

- **AUC = 1**: Rappresenta il classificatore perfetto, che passa per il punto (0,1)
- **AUC = 0.5**: Rappresenta il classificatore casuale (la linea diagonale).
- **AUC = 0**: Rappresenta il classificatore “perfettamente sbagliato” (che inverte tutte le predizioni).

Il valore di AUC (tra 0 e 1) può essere interpretato come la probabilità che il classificatore assegni un punteggio più alto a un individuo positivo scelto a caso, rispetto a un individuo negativo scelto a caso.

3.6 Classificazione multi-classe

Le misure viste finora (Precision, Recall, F_1 -score) sono definite per la classificazione binaria. Per applicarle a problemi con $K > 2$ classi, si perde la visione di performance globale. Per l' F_1 -score, si possono calcolare delle medie. L'approccio comune è “one-vs-rest”: per ogni classe $g_i \in G = \{1, \dots, K\}$, si costruisce una matrice di confusione dove g_i è il “caso positivo” e tutte le altre classi formano il “caso negativo”. Si calcolano così TP_i , FP_i e FN_i per ogni classe i .

3.6.1 Micro-average

La micro-average (micro-media) aggrega i contributi di tutte le classi “sull'unità più piccola” (i singoli campioni) prima di calcolare le metriche. Queste metriche sono:

$$P_{micro} = \frac{\sum_{i=1}^{|G|} TP_i}{\sum_{i=1}^{|G|} (TP_i + FP_i)}$$

$$R_{micro} = \frac{\sum_{i=1}^{|G|} TP_i}{\sum_{i=1}^{|G|} (TP_i + FN_i)}$$

Da cui si può derivare il F_1 -score micro-averaged, $F_{1_{micro}}$ che rappresenta la media armonica di P_{micro} e R_{micro} .

$$F_{1_{micro}} = 2 \cdot \frac{P_{micro} \cdot R_{micro}}{P_{micro} + R_{micro}}$$

Nota 3.4: Micro-average e classi sbilanciate

Questa misura non è sensibile alle prestazioni sulle singole classi e può essere fuorviante se la distribuzione delle classi è sbilanciata.

3.6.2 Macro-average

La macro-average (macro-media) calcola la media su gruppi più vasti.

$$P_{macro} = \frac{\sum_{i=1}^{|G|} P_i}{|G|}$$

$$R_{macro} = \frac{\sum_{i=1}^{|G|} R_i}{|G|}$$

Da cui si può derivare il F_1 -score macro-averaged, $F_{1_{macro}}$ che rappresenta la media armonica di P_{macro} e R_{macro} .

$$F_{1_{macro}} = 2 \cdot \frac{P_{macro} \cdot R_{macro}}{P_{macro} + R_{macro}}$$

Nota 3.5: Macro-average per dati sbilanciati

Se questo valore è grande, indica che il classificatore funziona bene (in media) per ogni singola classe. Per questo motivo è più adatto per dati con distribuzione sbilanciata.

3.6.3 Generalizzazione di AUC (Metodo Hand & Till)

Esiste anche una generalizzazione dell'AUC per $k > 2$ classi (Metodo Hand & Till, 2001). L'idea è calcolare una misura di separabilità $\hat{A}(i|j)$ per ogni possibile coppia di classi (i, j) .

Definizione 3.9: Generalizzazione AUC

Sia $\hat{A}(i|j)$ la probabilità che dato un elemento a caso della classe j abbia probabilità inferiore di attribuire quell'elemento alla classe i , rispetto al valore di probabilità che attribuirebbe ad un elemento a caso della classe i . È possibile calcolare $\hat{A}(i|j)$ utilizzando le seguenti definizioni:

- $\hat{p}(X_l)$ è la probabilità stimata che l'osservazione l sia originata dalla classe i .
- per tutte le osservazioni x_l della classe i , sia $f_l = \hat{p}(X_l)$. la probabilità stimata di appartenere alla classe i .
- per tutte le osservazioni x_k della classe j , sia $g_k = \hat{p}(X_k)$. la probabilità stimata di appartenere alla classe j .

Allora i valori ottenuti ordinati in modo crescente sono: $\{g_1, \dots, g_n, f_1, \dots, f_n\}$. Sia r_l il rango della l -esima osservazione della classe i .

Il numero totale di coppie di punti in cui il punto della classe j ha un valore di probabilità stimato di appartenenza alla classe i inferiore a quello della classe i è:

$$\sum_{l=1}^{N_i} (r_l - l) = \sum_{l=1}^{N_i} r_l - \sum_{l=1}^{N_i} l = S_i - \frac{N_i(N_i + 1)}{2}$$

Dove N_i e N_j sono il numero di osservazioni delle classi i e j e S_i è la somma dei ranghi delle osservazioni della classe i .

La probabilità che un punto scelto a caso della classe j abbia una probabilità stimata di appartenenza alla classe i inferiore a quella di un punto scelto a caso della classe i è quindi:

$$\hat{A}(i|j) = \frac{S_i - \frac{N_i(N_i+1)}{2}}{N_i \cdot N_j}$$

Inoltre considerando che non è possibile distinguere $\hat{A}(i|j)$ da $\hat{A}(j|i)$, si ha che la misura di separabilità tra le classi i e j è data dalla media tra $\hat{A}(i|j)$ e $\hat{A}(j|i)$, ovvero:

$$\hat{A}(i|j) = \frac{\hat{A}(i|j) + \hat{A}(j|i)}{2}$$

Il valore di AUC globale (M) di un classificatore multi-classe è quindi dato dalla media di tutti i valori $\hat{A}(i|j)$ calcolati è definito come:

$$M = \frac{2}{c(c-1)} \sum_{i < j} \hat{A}(i|j)$$

Dove c è il numero totale di classi, $\frac{2}{c(c-1)}$ è un fattore che viene applicato perchè sono presenti $c(c-1)$ modi differenti con cui costruire coppie distinte di classi.

3.7 Cross-validation

Definizione 3.10: Cross-Validazione

È una tecnica statistica usata per validare un modello e valutare come i suoi risultati si generalizzeranno a un insieme di dati indipendente. L'obiettivo primario è testare la capacità del modello di prevedere su nuovi dati, non usati durante l'addestramento. Serve principalmente a stimare problemi di **overfitting** o di **selection bias**.

Il *selection bias* si verifica quando la scelta del training set è viziata (da fattori esterni) e non rispecchia un campionamento uniforme dell'universo delle osservazioni.

Nota 3.6: Selection bias

Il *selection bias* può portare a stime distorte delle performance del modello, poiché il training set non rappresenta adeguatamente la popolazione generale. È importante essere consapevoli di questo bias durante la fase di progettazione dello studio e nella raccolta dei dati. Training set e test set dovrebbero essere prodotti tramite campionamento uniforme dell'universo delle possibili osservazioni.

La cross-validazione si divide in due tipi principali:

- Cross-validazione esaustiva, che testa tutte le possibili divisioni del dataset in TS e CS.
- Cross-validazione non esaustiva, che testa solo un sottoinsieme delle possibili divisioni.

3.7.1 Cross-validazione esaustiva

La cross-validazione esaustiva testa tutti i modi possibili di dividere il dataset in TS e CS.

- **Leave-p-out (LPO)**: Utilizza p osservazioni come CS e $N - p$ come TS. Questo processo viene ripetuto per tutti le $\binom{n}{p}$ possibili combinazioni.
- **Leave-one-out (LOOCV)**: È un caso particolare di LPO dove $p = 1$. È appropriata per dataset molto piccoli, dove il costo computazionale è secondario rispetto all'accuratezza della stima.

3.7.2 Cross-validazione non esaustiva

La cross-validazione non esaustiva testa solo un sottoinsieme delle possibili divisioni. La tecnica più comune è la **k-fold cross-validation**, dove il dataset viene diviso casualmente in k parti (fold) di eguale dimensione. A turno, ogni "fold" viene usato come Test Set (CS) e i restanti $k - 1$ fold vengono usati come Training Set (TS). Il processo si ripete k volte e le metriche vengono mediate.

4 Algoritmi di classificazione

4.1 Tipologie di modelli di classificazione

I modelli di classificazione possono essere suddivisi in due tipologie:

- **Eager (volenterosi):** Costruiscono un modello generale e indipendente dall'input a partire dai dati di addestramento. Tale modello viene poi usato per classificare nuovi dati.
- **Lazy (pigri):** Memorizzano semplicemente i dati di addestramento (in forma grezza o con piccole elaborazioni) e rimandano l'intero processo di classificazione all'arrivo della nuova istanza da classificare.

In generale, i metodi lazy richiedono meno tempo in fase di addestramento ma molto più tempo in fase di classificazione. Riguardo l'accuratezza, i metodi lazy usano uno spazio delle ipotesi più ricco, potendo usare funzioni locali di classificazione che forniscono approssimazioni a livello globale. Al contrario, i metodi eager si riferiscono a una sola ipotesi per coprire l'intero universo delle osservazioni.

Approcci tipicamente lazy includono:

- **k-nearest neighbors (kNN)** (i k vicini più prossimi): I data point sono rappresentati in uno spazio euclideo.
- **Locally weighted regression:** Costruisce approssimazioni locali.
- **Case-based reasoning:** Usa rappresentazione simbolica e inferenza basata sulla conoscenza (knowledge-based inference).

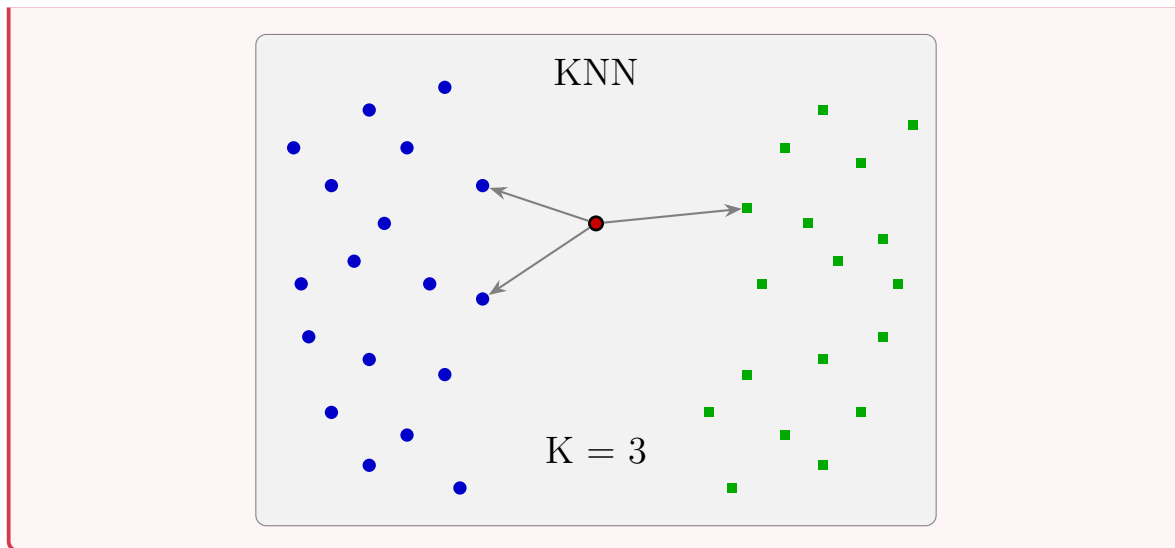
4.2 k-Nearest Neighbors (kNN)

Nel kNN, l'insieme delle osservazioni è rappresentato come un insieme di data point in uno spazio n -dimensionale, dove ogni dimensione può avere valori reali o discreti.

Lo spazio è tipicamente euclideo (su cui si calcolano distanze euclidee), ma è possibile utilizzare anche feature categoriali con metriche diverse (es. Jaccard, Tanimoto, Dice, Hamming, distanza al coseno).

Definizione 4.1: k-Nearest Neighbors (kNN)

ato un training set (TS) e un'istanza da classificare, l'algoritmo assegna a tale istanza la classe che è più rappresentata tra i suoi k vicini più prossimi.

**Nota 4.1: Il ruolo di k**

Il parametro k è un punto chiave dell'algoritmo perché determina il numero di vicini da considerare per la classificazione.

Il k NN è uno strumento **non parametrico**, cioè non fa alcuna ipotesi sulla distribuzione dei dati. Questo è utile perché la maggior parte dei dati “reali” non obbedisce ad assunti teorici (come nei modelli di regressione lineare).

Di conseguenza, k NN è spesso una delle prime scelte per uno studio di classificazione quando c'è poca o nessuna conoscenza sulla distribuzione dei dati.

4.2.1 Potere predittivo e scelta di k

Il potere predittivo dipende dal parametro k :

- **k piccolo:** Limita la regione di previsione, rendendo il classificatore “più cieco” alla distribuzione generale.
- **k grande:** Riduce l'impatto della varianza e dell'errore casuale, ma rischia di ignorare piccoli dettagli rilevanti.

Alcuni autori suggeriscono di impostare k uguale alla radice quadrata del numero di osservazioni nel training set. Un'alternativa migliore è usare la cross-validazione per identificare il valore di k con le performance migliori.

4.2.2 Weighted k NN

Per migliorare le performance, si può usare una versione pesata (Weighted k NN), dove le classi dei vicini sono pesate in base alla loro distanza. Ad esempio, si può pesare l'apporto di ogni vicino con l'inverso della sua distanza ($1/d_i$).

Nota 4.2: Weighted kNN e dataset sbilanciati

Per dataset sbilanciati, si può anche pesare l'apporto di ogni vicino con l'inverso del numero totale di punti nel dataset aventi la stessa classe del vicino in questione.

4.3 Alberi di decisione

Definizione 4.2: Albero di decisione

Un albero di decisione descrive un albero di ricerca (n-ario) dove i nodi foglia rappresentano le classificazioni e le ramificazioni l'insieme delle proprietà che portano a quelle classificazioni. Ogni nodo interno contiene un test (tipicamente su una feature o una combinazione di feature) che stabilisce quale sotto-albero deve essere visitato.

4.3.1 Costruzione dell'albero

L'algoritmo di costruzione (top-down, greedy) inizia con un nodo radice che contiene tutti i dati di addestramento e segue una strategia ricorsiva:

1. Se tutti i dati di training in un nodo t hanno lo stesso valore sull'attributo classificatore, si crea un nodo foglia contenente tutti i dati.
2. Altrimenti, si cerca la partizione S degli elementi (basata su un attributo) che massimizza una misura di "goodness" (purezza).
3. Si sceglie la partizione S^* che massimizza la misura di "goodness".
4. Si creano tanti figli del nodo t quante sono le classi/valori presenti in S^* .
5. Un nodo figlio è detto "puro" se tutti i suoi elementi hanno lo stesso valore di classe.
6. Si applica ricorsivamente l'algoritmo sui nodi impuri (o che non rappresentano una singola classe secondo una soglia di maggioranza).

L'obiettivo è scegliere l'albero più semplice a parità di performance e il più compatto possibile. Trovare l'ipotesi minimale è NP-hard, per cui si usa questa strategia greedy (divide-et-impera) che non garantisce l'ottimalità.

La decisione principale è scegliere l'attributo su cui biforcare in modo che divida in insiemi il più puri possibile e porti rapidamente a nodi foglia.

4.3.2 Goodness functions

Le misure di "goodness" (purezza) più utilizzate per scegliere l'attributo migliore per lo split sono:

- **Information Gain (ID3, C4.5):** Basato sulla riduzione dell'entropia. Adatto per attributi categoriali (ma modificabile per i continui).
- **Indice di Gini (CART):** Adatto per attributi continui, assume che esistano diversi valori di splitting per ogni attributo (tipicamente split binari).

4.3.3 Information gain

La scelta basata sull'**information gain** mira alla riduzione progressiva dell'entropia. L'entropia H misura il disordine (o l'incertezza media) di una variabile aleatoria.

$$H(p_1, \dots, p_k) = - \sum_i p_i \log_b p_i$$

L'entropia è massima quando tutti gli eventi sono equiprobabili (massimo disordine).

Dato un insieme S con k classi C_i , l'informazione (entropia) necessaria per classificare un campione in S misura la **quantità di informazione media necessaria** ed è definita come:

$$Info(S) = - \sum_{i=1}^k \frac{freq(C_i, S)}{|S|} \log_2 \frac{freq(C_i, S)}{|S|}$$

Se si partiziona S usando un attributo A (con n valori) nei sottoinsiemi $\{S_1, \dots, S_n\}$, l'entropia dell'albero con radice A è la media ponderata delle entropie dei sottoinsiemi:

$$Info_A(S) = \sum_{i=1}^n \frac{|S_i|}{|S|} Info(S_i)$$

La quantità di informazione guadagnata dal partizionamento di S è la riduzione dell'entropia ottenuta splittando sull'attributo A :

$$Gain(A) = Info(S) - Info_A(S)$$

L'algoritmo seleziona l'attributo A che massimizza il $Gain(A)$ (o, equivalentemente, minimizza $Info_A(S)$).

Esempio 4.1: Information gain con due classi

ia C l'insieme delle classi con due classi C_1 e C_2 , e sia S un insieme che contiene c_1 elementi di C_1 e c_2 elementi di C_2 .

La **quantità di informazione** necessaria per decidere se un elemento arbitrario in S appartiene a C_1 o C_2 è:

$$Info(c_1, c_2) = - \frac{c_1}{c_1 + c_2} \log_2 \frac{c_1}{c_1 + c_2} - \frac{c_2}{c_1 + c_2} \log_2 \frac{c_2}{c_1 + c_2}$$

Assumendo di utilizzare un attributo A con v valori $\{a_1, a_2, \dots, a_v\}$, come radice dell'albero, allora S viene partizionato in v sottoinsiemi $\{S_1, S_2, \dots, S_v\}$.

Così facendo C_1 e C_2 si dividono in $\{[C_1]_1, [C_1]_2, \dots, [C_1]_v\}$ e $\{[C_2]_1, [C_2]_2, \dots, [C_2]_v\}$.

Se S_i contiene $[c_1]_i$ elementi di C_1 e $[c_2]_i$ elementi di C_2 , allora la quantità di informazione richiesta per classificare gli oggetti nei vari S_i saranno $Info([c_1]_i, [c_2]_i)$.

Di conseguenza l'informazione richiesta per l'albero con radice A sarà la media pesata dagli $Info$ secondo le partizioni che A impone su S :

$$Info_A(S) = \sum_{i=1}^v \frac{[c_1]_i + [c_2]_i}{c_1 + c_2} Info([c_1]_i, [c_2]_i)$$

Nota 4.3: Sbilanciamento dell'Information Gain

L'Information gain è fortemente sbilanciato in favore dei test che hanno molti esiti (es. un attributo ID), anche se questi esiti sono poco significativi in termini di predizione. Come soluzione a questa problematica si normalizza il gain in base alla quantità di informazione ottibibile da S stesso.

Considerando l'**informazione** contenuta da un messaggio sulla probabile partizione di S in S_i insiemi, si ha che tale informazione è data da:

$$-\log_2 \frac{|S_i|}{|S|}$$

Per analogia la definizione di $Info(S)$ è porta alla definizione di $SplitInfo$, che rappresenta la potenziale informazione generata dalla divisione di S .

$$SplitInfo(A) = - \sum_{i=1}^n \frac{|S_i|}{|S|} \log_2 \frac{|S_i|}{|S|}$$

Il **gain normalizzato**, ottenuto usando $SplitInfo$, è quindi:

$$GainRatio(A) = \frac{Gain(A)}{SplitInfo(A)}$$

Il GainRatio non risolve tutti i problemi, infatti potrebbe succedere che attributi significativi assumono un qualche valore in più rispetto agli altri risultando svantaggiati.

Una strategia comune è:

1. Calcolare il $Gain(A)$ per ogni attributo.
2. Calcolare la media dei guadagni.
3. Selezionare **solo** gli attributi con guadagno sopra la media.
4. Scegliere, tra gli attributi selezionati, quello con $GainRatio$ maggiore.

Nota 4.4: Attributi continui

Per attributi di tipo continuo, si valuta l'utilizzo di un valore di soglia Z , che rende il test binario: $A > Z$ o $A \leq Z$.

Si testano tutti i possibili valori di soglia v_j (o i punti medi tra valori ordinati) presenti nel training set e si sceglie la soglia che massimizza il gain. Così facendo l'insieme di dati viene diviso in due sottoinsiemi $\{v_1, v_2, \dots, v_i\}$ e $\{v_{i+1}, v_{i+2}, \dots, v_m\}$.

Questo criterio va ad introdurre implicitamente un'altra restizione, richiedendo che gli insiemi generati abbiano almeno un certo numero minimo di elementi.

Nota 4.5: Gestione dei valori mancanti

Durante la costruzione dell'albero, può capitare che alcuni record abbiano valori mancanti (nulli) per alcuni attributi. Tra le varie opzioni per gestire questi casi, si possono usare varie strategie:

- Assegnare il valore più comune per quell'attributo.
- Assegnare una probabilità a ognuno dei possibili valori.
- Attribuire un peso ai record.

In queste situazioni è necessario adattare il calcolo del $Gain(A)$:

$$Gain(A) = F \cdot (Info(S) - Info_A(S))$$

dove F è la percentuale di casi nel training set in cui l'attributo A è noto.

La variazione sul calcolo del $Gain(A)$ può essere estesa anche al calcolo della $SplitInfo(A)$, e di conseguenza del $GainRatio(A)$, influenzando così sul partizionamento.

Per pesare i singoli record, è necessario valutare che se un record ha un valore sconosciuto il peso è proprio la probabilità che il valore sia v_i . Ogni sottoinsieme S_i è una collezione di casi con pesi possibilmente frazionali, così che $|S_i|$ può essere reinterpretata come la somma dei pesi frazionali dei casi del sottoinsieme.

In generale, un caso di S con peso w il cui esito non è noto a ogni sotto insieme S_i con peso w^* ha la probabilità che l'esito sia v_i

4.3.4 Indice di Gini**Definizione 4.3: Indice di Gini**

L'indice di Gini è una metrica utilizzata per valutare la purezza dei nodi e guidare la costruzione degli alberi. Questa misura l'impurità di un insieme S .

Dato un insieme S con n classi, l'**indice di Gini** è definito come:

$$gini(S) = 1 - \sum_{j=1}^n p_j^2$$

dove p_j è la frequenza della classe j :

Definito questo è necessario adattare il calcolo dello split basato su Gini, definendo l'**indice di impurità dello split** come segue:

$$gini_{split}(S, A) = \sum_{i=1}^m \frac{N_i}{N} gini(S_i)$$

dove S è diviso in m sottoinsiemi S_i (di dimensione N_i) in base all'attributo A , e $N = \sum_{i=1}^m N_i$ è la dimensione totale di S .

Esempio 4.2: Indice di Gini con due classi

Date due classi P e N , tale che $S = P \cup N$, contenenti rispettivamente p e n elementi, è possibile calcolare:

$$p_p = \frac{p}{p+n}$$

$$p_n = \frac{n}{p+n}$$

$$gini(S) = 1 - p_p^2 - p_n^2$$

Da questo si può calcolare l'indice di Gini per lo split su un attributo A che divide S in due sottoinsiemi S_1 e S_2 , rispettivamente con dimensioni N_1 e N_2 .

$$gini_{split}(S, A) = \frac{N_1}{N} gini(S_1) + \frac{N_2}{N} gini(S_2)$$

Nota 4.6: Algoritmo di CART

L'algoritmo CART (che usa Gini) seleziona l'attributo a che ha il **minore** $gini_{split}(S, a)$, in quanto si cerca la massima riduzione dell'impurità. Per gli attributi numerici, CART testa tutti i possibili split binari.

4.3.5 Pruning

Un albero cresciuto molto in profondità rischia di adattarsi troppo ai dati di training, inclusi gli outlier e il rumore. Questa situazione è detta **overfitting** e porta a un aumento degli errori su dati nuovi.

La soluzione è il **pruning** (potatura), ovvero la rimozione di parti dell'albero (rami) che non contribuiscono significativamente alla classificazione corretta, producendo un modello meno complesso e più generalizzabile.

Le strategie di pruning sono:

- **Pre-pruning:** Attuato durante la costruzione. Si decide di non dividere ulteriormente un nodo se il gain è inferiore a una soglia t , o se la purezza è già sufficiente (es. tramite metodi statistici).
- **Post-pruning:** Attuato dopo la costruzione completa dell'albero. Si recidono rami analizzando l'impatto sull'errore (spesso su un validation set). È più dispendioso ma generalmente più efficace (C4.5 usa il post-pruning).

Nota 4.7: Potature e distribuzione di probabilità

Quando si pota, la foglia risultante potrebbe non essere pura. Invece di una classe, le si associa una distribuzione di probabilità delle classi presenti.

C4.5 C4.5 (Pessimistic Pruning) utilizza un post-pruning “pessimistico” basato sul set di training stesso. Stima l'errore di un sottoalbero e lo confronta con l'errore medio che si otterrebbe sostituendo il sottoalbero con una singola foglia (o, in C4.5, anche con uno dei suoi rami). Se l'errore stimato del sottoalbero potato è minore, il nodo viene potato.

Minimal cost-complexity pruning CART (minimal cost-complexity pruning) è un algoritmo di potatura parametrizzato da $\alpha \geq 0$ (parametro di complessità).

Si definisce un costo di complessità $R_\alpha(T)$ per un albero T come:

$$R_\alpha(T) = R(T) + \alpha|\tilde{T}|$$

dove $R(T)$ è il tasso di errore (impurità) dell'albero e $|\tilde{T}|$ è il numero di nodi terminali (foglie). L'algoritmo cerca il sottoalbero che minimizza $R_\alpha(T)$.

Si calcola un *alpha* effettivo, α_{eff} come seguente:

- Se il nodo t è una foglia, $R_\alpha(T_t) = R(t)$.
- Altrimenti, per un nodo non terminale:

$$\alpha_{eff} = \frac{R(t) - R(T_t)}{|T_t| - 1}$$

Si pota iterativamente il nodo non terminale con il α_{eff} più piccolo. All'aumentare di α , l'albero viene potato di più, l'impurità (errore sul training) aumenta, ma la generalizzazione (errore sul test) migliora fino a un certo punto ottimale, per poi peggiorare (underfitting).

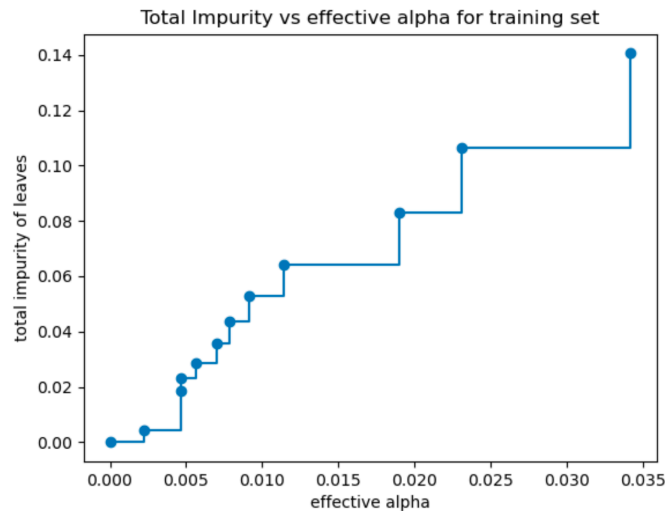


Figura 2: Allaumentare di α , viene potata una parte maggiore dell'albero, il che aumenta l'impurità totale delle sue foglie.

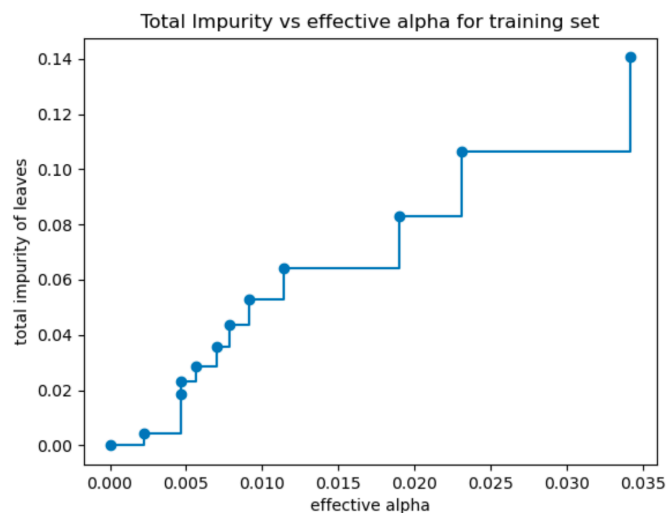


Figura 3: Il numero di nodi e la profondità dell'albero diminuiscono all'aumentare di α

Nota 4.8: Valore di α e overfitting

Quando il valore di soglia è impostato a 0 (nessuna potatura), l'albero va in overfitting, portando ad una precisione di allenamento del 100% ma ad una precisione di test dell' 80%.

All'aumento di α , viene tagliata una parte maggiore dell'albero, creando così un albero decisionale che generalizza meglio.

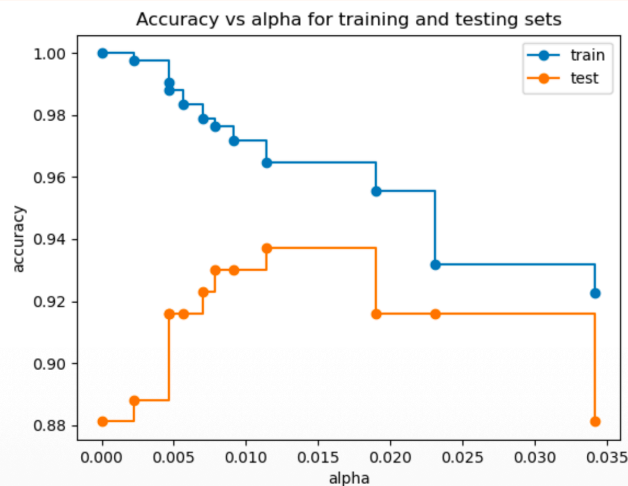


Figura 4: Andamento dell'accuratezza in funzione di α .

4.4 Metodi consenso

Gli alberi di decisione sono semplici e interpretabili, ma spesso non competitivi in termini di qualità predittiva. Inoltre, sono instabili, piccoli cambiamenti nei dati di training possono portare a un albero molto diverso (alta varianza).

Per ovviare a questi svantaggi, si utilizzano differenti strategie tra cui **bagging**, **random forests**, e **boosting**, che costruiscono molteplici alberi e li combinano in un'unica predizione **consenso**, migliorando notevolmente l'accuratezza a scapito (parziale) dell'interpretabilità.

L'obiettivo è impiegare una combinazione di modelli M^* , ottenuta combinando k modelli addestrati separatamente, per incrementare l'accuratezza. I metodi più popolari sono:

- **Bagging**: Media la predizione su una collezione di classificatori.
- **Boosting**: Impiega una collezione di classificatori tramite un voto pesato.
- **Ensemble**: Combina un insieme eterogeneo di classificatori.

4.4.1 Bagging

Il bagging (Bootstrap Aggregation) è una tecnica generale per ridurre la varianza di un metodo statistico, particolarmente utile per gli alberi di decisione.

L'idea è simulare la disponibilità di più training set, anche se se ne ha uno solo:

1. Si estraggono B diversi sottoinsiemi (campioni **bootstrap**) dall'unico training set (estraendo casualmente con reinserimento).
2. Si apprende un classificatore (un albero) f_i per ciascun sottoinsieme i .
3. Si aggregano (ensemble) le predizioni sulle nuove istanze x di test:

$$f_{bag}(x) = \frac{1}{B} \sum_{i=1}^B f_i(x)$$

4.4.2 Random Forest

Una Random Forest è un metodo consenso costituito da un **bagging di alberi di decisione non potati** (complessi), con un'aggiunta cruciale: **una scelta casuale di un sottoinsieme delle feature (predittori) ad ogni split**.

Nota 4.9: Metodologia

La random forest è un metodo non lineare (come gli alberi di decisione) e robusto, con bassa varianza e stabilità delle predizioni rispetto al variare dei dati di input.

Migliora le prestazioni di un singolo albero di decisione appreso su tutti i dati ma perde la facile interpretabilità e scala meno bene.

Addestramento della foresta Fissato un numero di alberi n_{tree} e il numero di predittori (numero di feature da testare a ogni split) m_{try} da scegliere casualmente tra quelle disponibili, viene ripetuto per n_{tree} la procedura seguente:

1. Si estrae un campione bootstrap S dai dati di training.
2. Si apprende un albero di decisione su S accurato (minsplit = 1), in cui ad ogni split solo m_{try} predittori sono scelti casualmente come candidati.
3. Non viene effettuato il pruning.
4. Si salva l'albero ottenuto tra quelli disponibili.

Predizione Si aggregano le predizioni degli n_{tree} alberi tramite voto di maggioranza (classificazione) o media (regressione).

Nota 4.10: Scelta di m_{try}

Di solito, $m_{try} \approx \sqrt{m}$ per la classificazione e $m_{try} \approx m/3$ per la regressione (dove m è il numero totale di feature).

Nota 4.11: Costruzione raffinata

Il bagging riduce la varianza mediando alberi non distorti (perché profondi) ma soggetti a errore (alta varianza). La varianza di una media di B variabili i.i.d. (indipendenti e identicamente distribuite) con varianza σ^2 è $\frac{1}{B}\sigma^2$.

Tuttavia, gli alberi del bagging non sono indipendenti, perché crescono dallo stesso TS (anche se bootstrapped). Sono correlati. Se la correlazione a coppie è $\rho > 0$, la varianza della media è:

$$\rho\sigma^2 + \frac{1-\rho}{B}\sigma^2$$

Al crescere di B , la varianza non va a zero, ma tende a $\rho\sigma^2$.

L'idea della Random Forest è **ridurre la correlazione** ρ tra gli alberi. Introducendo la selezione casuale di m_{try} feature ad ogni split, si “decorrelano” gli alberi. Questo permette di migliorare la riduzione della varianza del bagging, senza accrescere troppo la distorsione (bias).

Valutazione (OOB error): Le RF forniscono una **stima dell'errore** di test chiamata **Out-Of-Bag (OOB) error**. Per ogni istanza di training x_i , si usano per la predizione solo gli alberi che *non* contenevano x_i nel loro campione bootstrap (circa 1/3 degli alberi). L'OOB error è la media degli errori su queste predizioni.

Importanza delle features Si può stimare l'importanza di una feature in due modi:

- **Mean decrease in accuracy (permutation importance):** Si calcola l'accuratezza OOB. Poi, per una feature i , si permutano casualmente i suoi valori nei dati OOB (rompendo la correlazione con la classe). Si ricalcola l'accuratezza. La differenza media (su tutti gli alberi) nella precisione è l'importanza di quella feature.

- **Mean decrease in Gini index:** Si misura quanto lo split su una certa variabile riduce (in media) l'impurità (indice di Gini) attraverso tutti gli alberi.

Nota 4.12: Vantaggi

Le random forest (RF) presentano diversi vantaggi chiave rispetto ai singoli alberi decisionali:

- **Scalabilità:** La complessità temporale aumenta in modo contenuto, poiché ogni albero viene addestrato solo su un sottoinsieme di dati e, ad ogni split, viene considerato solo un sottoinsieme di predittori. Questo permette di gestire efficientemente anche dati di grandi dimensioni.
- **Resistenza all'Overfitting:** Le RF generalmente non soffrono di overfitting all'aumentare del numero di alberi. Ciò è dovuto alla combinazione della selezione casuale dei predittori a ogni split e all'aggregazione finale delle predizioni.
- **Stabilità:** Grazie all'uso del bagging, le RF sono più stabili rispetto alle variazioni nei dati di input.
- **Parallelizzabilità:** Gli alberi in una RF vengono appresi in modo indipendente (a differenza del boosting). Questo rende l'algoritmo facilmente parallelizzabile su hardware multi-core o multi-processore.

Nota 4.13: Svantaggi e limiti

Random forest non è ideale per:

- **Estrapolazione:** La regressione casuale della foresta non è ideale nell'estrapolazione dei dati (a differenza della regressione lineare, che utilizza le osservazioni esistenti per stimare i valori oltre l'intervallo di osservazione).
- **Scarsità dei dati:** Una RF non produce buoni risultati quando i dati sono molto scarsi (il sottoinsieme di funzionalità e il campione bootstrap produrranno uno spazio invariante, portando a divisioni improduttive che influenzeranno il risultato finale).

4.4.3 Boosting

Il Boosting è un altro metodo consenso.

Nota 4.14: Idea del Boosting: analogia medica

L'idea del boosting può essere paragonata a quella di "consultare diversi medici, assegnando un peso alla loro diagnosi in base all'accuratezza delle diagnosi precedenti".

L'idea è addestrare una serie di k classificatori (spesso alberi semplici, detti "weak learners") in modo **sequenziale**:

1. Le tuple in D vengono campionate con "replacement" (rimettendo una coppia in D dopo l'estrazione) per formare un training set D_i della stessa dimensione di D .

2. La probabilità di ogni tupla di essere selezionato è proporzionale al suo peso.
3. Si addestra un classificatore M_i a partire da D_i .
4. Viene calcolato il tasso di errore di M_i utilizzando D_i come test set.
5. Le tuple classificate erroneamente vedono aumentare il loro peso, altrimenti (se classificate correttamente) il loro peso diminuisce.

Adaboost Adaboost (Adaptive Boosting) è l'algoritmo di boosting più utilizzato. Dato $err(X_j)$ l'errore nel classificare la tupla X_j (0 o 1 nei casi di classificazione e non di regressione). Con questo posso definire l'errore complessivo del classificatore M_i come:

$$err(M_i) = \sum_{j=1}^d w_j err(X_j)$$

dove w_j è il peso corrente della tupla X_j .

Il peso del classificatore M_i nella vorazione consenso è definito come:

$$\log \frac{1 - error(M_i)}{error(M_i)}$$

4.5 Support vector machines

Le SVM (Macchine a vettori di supporto), introdotte da Vapnik (basate sulla statistical learning theory), sono uno strumento molto usato per la classificazione. Invece di stimare le densità di probabilità (come i classificatori Bayesiani), SVM cerca di determinare direttamente la **superficie decisionale** (classification boundary) tra le classi.

SVM nasce come classificatore binario e si estende a:

- SVM lineare (dati linearmente separabili).
- SVM lineare (dati non linearmente separabili, soft margin).
- SVM non lineare (kernel).
- Estensione multiclasse.

Date due classi linearmente separabili, esistono infiniti iperpiani in grado di separarle. SVM determina l'iperpiano che separa le due classi con il **maggior margine** possibile.

Il **margine** è la distanza minima tra i punti delle due classi (nel training set) e l'iperpiano stesso.

Nota 4.15: Importanza del margine

La massimizzazione del margine è legata alla generalizzazione, se i dati di training sono classificati con ampio margine, si spera che anche i dati di test vicini al confine siano gestiti correttamente.

4.5.1 SVM Lineari (Dati Linearmente Separabili)

Date due **classi linearmente separabili** e un training set TS contenente n campioni di coordinate $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$, dove $x_i \in \mathbb{R}^d$ sono i **record multidimensionali** e $y_i \in \{+1, -1\}$ sono le etichette di classe, esistono diversi **iperpiani** in grado di eseguire la separazione voluta.

Un generico iperpiano è definito dai parametri (w, b) come (omettendo per semplicità il prodotto scalare):

$$D(x) = w \cdot x + b = 0$$

dove w è il vettore normale all'iperpiano e $\frac{b}{\|w\|}$ è la distanza dall'origine.