Facoltà di Scienze MM. FF. NN.

Università di Verona

A.A. 2010-11

Teoria e Tecniche del Riconoscimento

Reti neurali

Sommario

- ⇨ Introduzione: approcci non algoritmici all'elaborazione dell'informazione (soft computing)

- ⇨ Le reti neurali

Approcci non algoritmici all'elaborazione dell'informazione

- Dato un problema da risolvere P, spesso esso puó essere formalizzato da {P, C, f},
  - P = formulazione del problema
  - C = $\{c_1,\ldots,c_n\}$ insieme di configurazioni, ognuna delle quali rappresenta una possibile soluzione
  - f: C $\rightarrow$ R funzione che fornisce una misura della bontá delle configurazioni rispetto allo scopo di risolvere il problema.
- Risolvere il problema significa massimizzare o minimizzare la funzione f nello spazio C

Esempi

- Problema 1: "ordinare in modo crescente un insieme di numeri $x_1 \ldots x_n$".
  - In questo caso la formalizzazione è semplice
    - P = ordinare i numeri $x_1 \ldots x_n$;
    - C = insieme delle n! permutazioni di $x_1 \ldots x_n$;
    - f = funzione che somma le distanze tra ogni numero e il successivo
- Problema 2: "Prevedere l'indice della borsa domani"
  - La formalizzazione è piú difficile

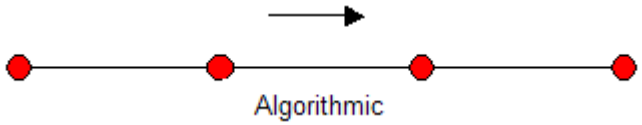
Soluzione algoritmica ai problemi

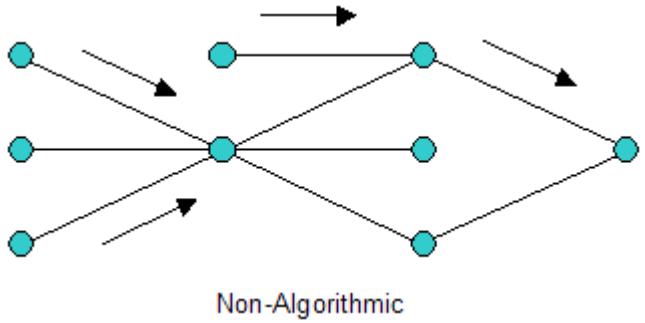
- ⇨ Trovare un algoritmo che risolva il problema
- ⇨ L'algoritmo rappresenta esso stesso la soluzione: dato l'algoritmo si trova sempre la soluzione
- ⇨ Esempio: Problema dell'ordinamento dei numeri, l'algoritmo *Bubble Sort* rappresenta esso stesso la soluzione del problema:
  - ⇨ dato un insieme di numeri, seguendo passo passo le istruzioni contenute nella descrizione dell'algoritmo, si arriva alla soluzione, l'insieme dei numeri ordinati.

- ⇨ Domanda: Esiste sempre una soluzione algoritmica?
- ⇨ Risposta: Sì!
  - ⇨ È la *Ricerca Esaustiva*, o approccio a forza bruta:
  - ⇨ Si calcola $f(c_i)$ per ogni possibile configurazione, e si sceglie quella che massimizza la funzione di bontá f
  - ⇨ Problema: ovviamente questo non è applicabile se lo spazio C è grande

Elaborazione non algoritmica

- Il problema 2 non puó essere risolto in modo algoritmico (eccetto la forza bruta) :
  - informazione incompleta
  - non specificabilitá rigorosa del problema
- Si puó quindi utilizzare un approccio di elaborazione non algoritmica dell'informazione:
  - forniscono una codifica delle configurazioni C e della funzione f e una serie di regole che fanno evolvere il sistema verso una soluzione





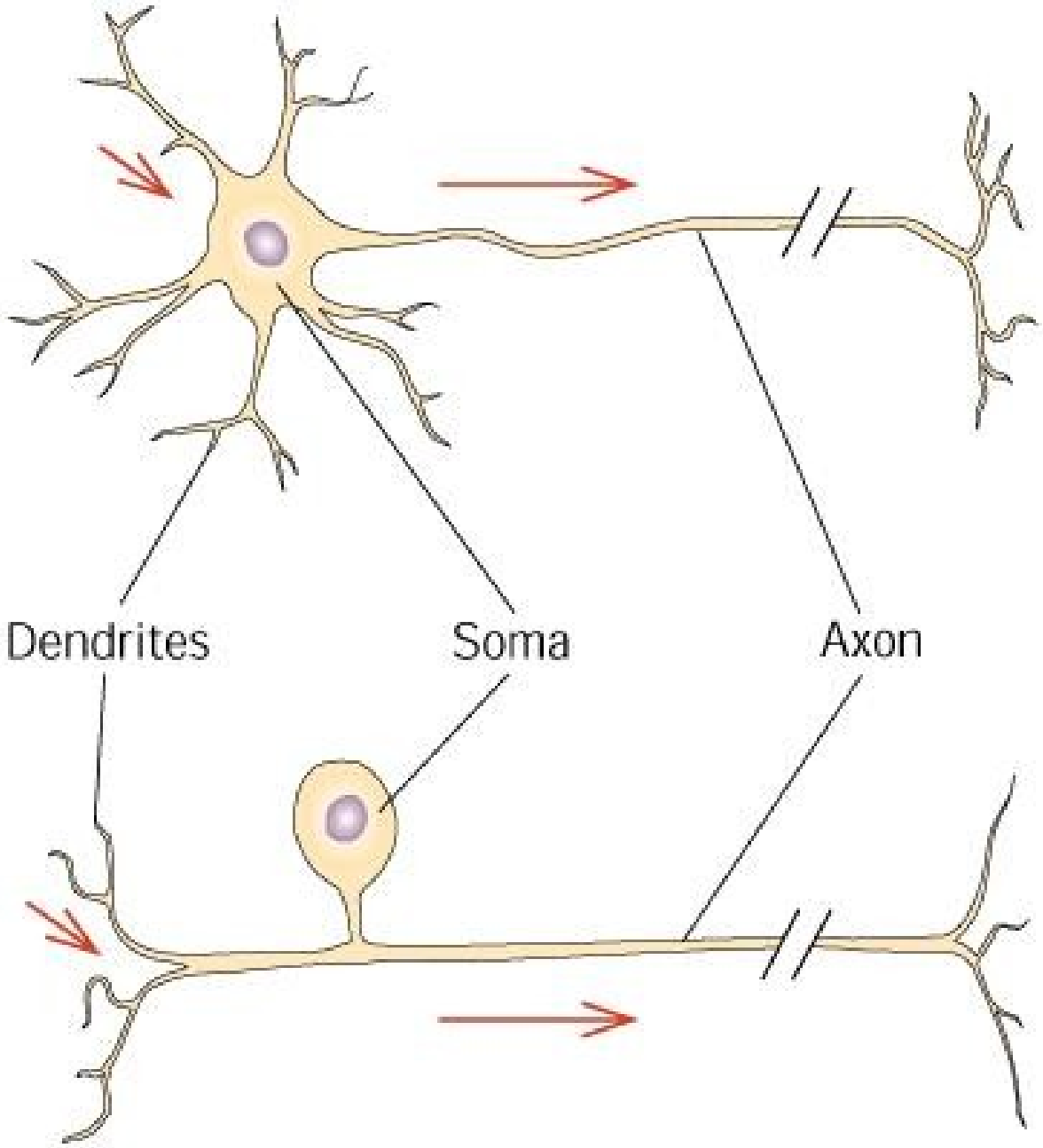
Esempi

- Algoritmi Genetici:
  - si basa sulla teoria dell'evoluzione della specie
  - la bontà di un individuo è legata alla sua "adattabilità".
- Simulated Annealing:
  - si basa sui modelli fisici: abbassando gradualmente la temperatura T di un sistema, esso tende a cristallizzare in una configurazione di minima energia
- Reti Neurali:
  - Sistema artificiale di elaborazione dell'informazione che si pone come obiettivo l'emulazione del sistema nervoso animale, ie., di emulare il sistema di computazione biologico.
  - cercano di risolvere i problemi partendo da esempi di soluzioni.

Le reti neurali

- Il sistema nervoso animale presenta numerose caratteristiche che sono attraenti dal punto di vista di un sistema di calcolo:
  - è robusto e resistente ai guasti: ogni giorno muoiono alcuni neuroni senza che le prestazioni complessive subiscano un peggioramento sostanziale;
  - è flessibile: si adatta alle situazioni nuove imparando;
  - permette una computazione altamente parallela;
  - è piccolo, compatto e dissipa poca potenza.
  - può lavorare anche con informazione
    - **approssimata:** l'informazione rappresentata dal segnale non è descritta in maniera esatta
    - **incompleta:** il segnale puó non arrivare in parte
    - **affetta da errore**: se i segnali sono affetti da errore il sistema deve essere in grado di rigenerarlo

Il neurone



Il neurone

⇨ Il flusso dell'informazione è unidirezionale:

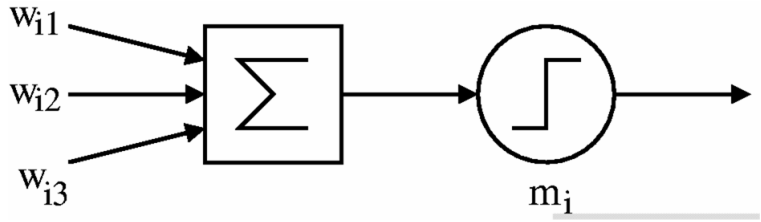
dendriti → corpo cellulare (soma) → assone

⇨ Il neurone riceve input (potenziali) dai dendriti, pesandoli in qualche modo (sinapsi).

⇨ Se la somma di questi input supera una certa soglia, il neurone si accende (emette un segnale 1).

Un po' di storia

- ⇨ 1943 - McCulloch e Pitts:
  - ⇨ primo modello di neurone: modello biologico



  - ⇨ somma pesata degli input: se superano la soglia m_i, allora l'output è 1, altrimenti è 0;
- ⇨ 1949, Hebb:
  - ⇨ dagli studi sul cervello, emerge che l'apprendimento non è una proprietà dei neuroni, ma è dovuto a una modifica delle sinapsi.

- ⇨ Anni 60: boom di lavoro sulle reti neurali, nel gruppo di Rosenblatt:
  - ⇨ calcolo dei pesi
  - ⇨ lavoro sui percettroni, reti in cui i neuroni sono organizzati in livelli di elaborazione sequenziale
- ⇨ 1969, Minsky e Papert:
  - ⇨ dimostrano i limiti del percettrone: crolla l'entusiasmo sulle reti neurali.
- ⇨ Anni 70: *associative content-addressable memory:*
  - ⇨ reti associative, dove patterns simili venivano in qualche modo associati

- ⇨ 1982, Hopfield:
  - ⇨ propone un modello di rete per realizzare memorie associative.
  - ⇨ viene introdotto un concetto di funzione di energia
  - ⇨ la rete converge sempre verso il più vicino punto stabile di energia
- ⇨ 1985, Rumelhart, Hinton e Williams:
  - ⇨ formalizzano l'apprendimento di reti neurali con supervisione (Back-Propagation: metodo standard per l'addestramento delle reti neurali)

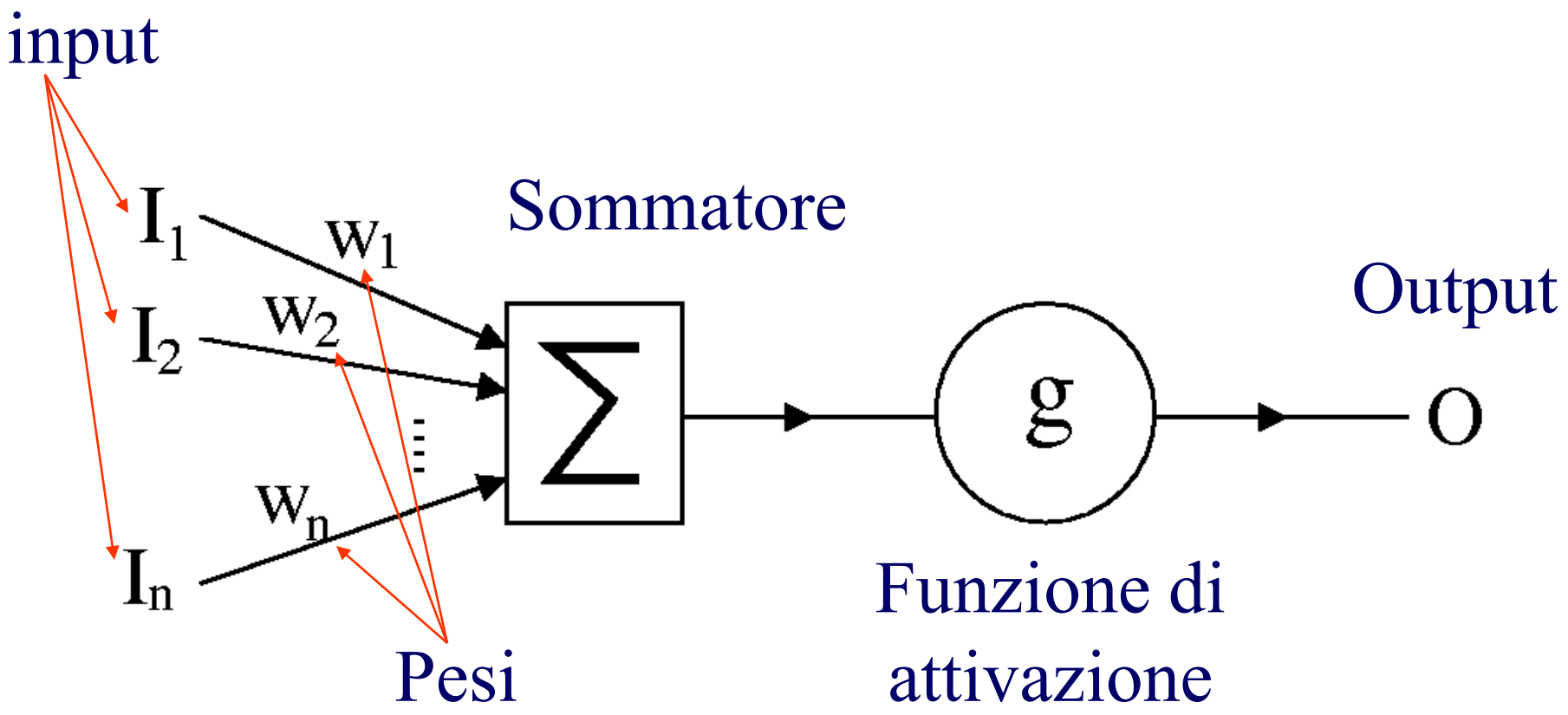
Schema di base

- ⇨ Rete Neurale:
  - ⇨ struttura complessa
  - ⇨ composta da tante unità elementari di calcolo, chiamate *neuroni*
  - ⇨ i neuroni sono collegati tra di loro tramite connessioni pesate, dette *sinapsi*
- ⇨ Ci sono dei neuroni che sono connessi all'ambiente esterno (input o output)

- ⇨ Ogni neurone possiede:
  - ⇨ un insieme di ingressi provenienti dagli altri neuroni
  - ⇨ un insieme di uscite verso gli altri neuroni
  - ⇨ un livello di attivazione
  - ⇨ un sistema per calcolare il livello di attivazione al tempo successivo

- ⇨ Le diverse reti neurali differiscono per:
  - ⇨ tipologia di neuroni
  - ⇨ tipologia di connessioni tra i neuroni

Il Neurone


input
I_1
I_2
I_n
w_1
w_2
w_n
Sommatore
Σ
g
Output
O
Pesi
Funzione di attivazione

Il neurone: componenti

- *Input* I_i: sono i segnali in ingresso al neurone:
  - input del problema
  - uscite di altri neuroni
- *Pesi* o *Sinapsi* w_i: ogni input viene pesato tramite il peso della connessione; fornisce una misura di quanto "conta" tale input nel neurone
- *Sommatore* Σ: modulo che effettua la somma pesata degli ingressi

⇨ *Funzione di attivazione g*: funzione che determina l'output del neurone sulla base dell'uscita del sommatore.

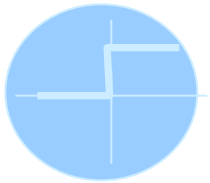
Riassumendo, l'*output* O del neurone si ottiene come

$$O = g\left(\sum_{i=1}^{n} w_i I_i\right)$$

Il Percettrone

- Nel caso più semplice (e più biologicamente plausibile) la funzione di attivazione è una funzione *a soglia θ*:
  - se la somma pesata degli input è maggiore di una certa soglia *t*, allora il neurone "si accende" (output 1), altrimenti no.

$$O = \theta\left(\sum_{i=1}^{n} w_i I_i - t\right)$$

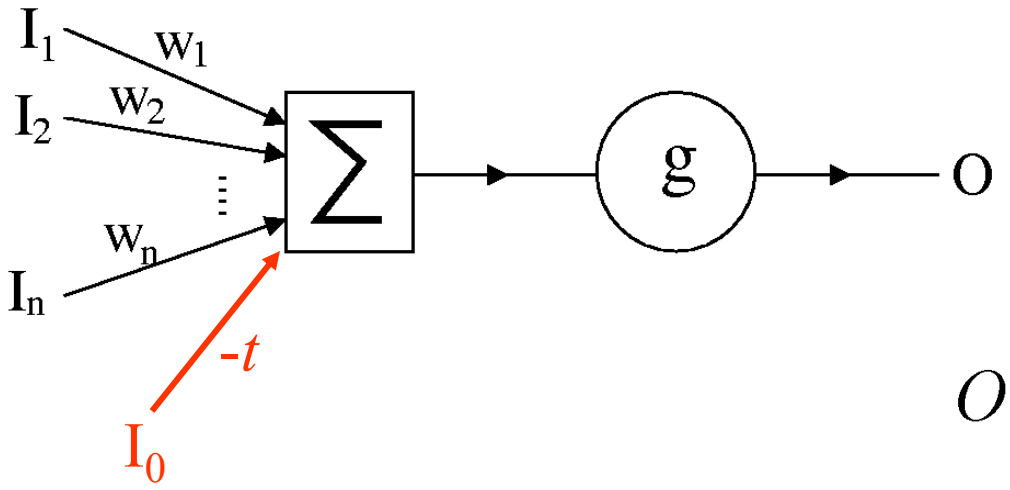


dove θ è la funzione di *Heaviside*

$$\theta : R \longrightarrow \{0, 1\}$$

$$\theta(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x < 0 \\ 1 & \text{se } x \geq 0 \end{cases}$$

- Questo semplice neurone si chiama *Percettrone (Percetron)*, introdotto da Rosenblatt nel 1962.
- Spesso si include la soglia nel modello del neurone, aggiungendo un ingresso fittizio:
  - il valore su tale ingresso è fissato a 1
  - il peso della connessione è dato da -*t;*

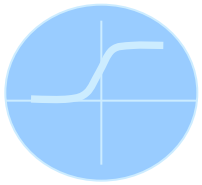


$$O = g\left(\sum_{i=0}^{n} w_i I_i\right)$$

Altre funzioni di attivazione

⇨ funzione logistica:

$$g(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$$



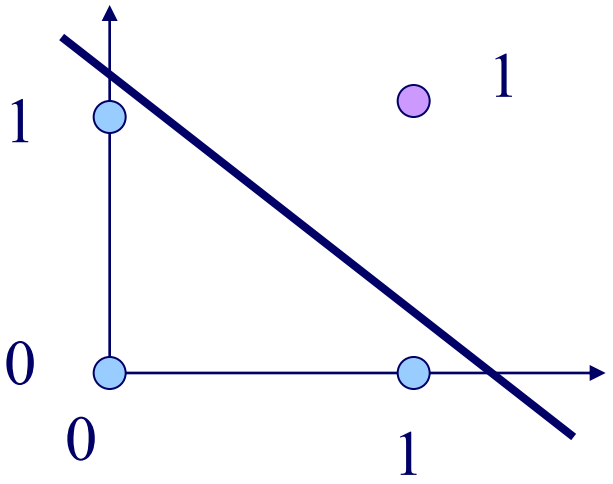
⇨ funzione tangente iperbolica:

$$g(x) = tanh(x) = \frac{e^{x} - e^{-x}}{e^{x} + e^{-x}}$$

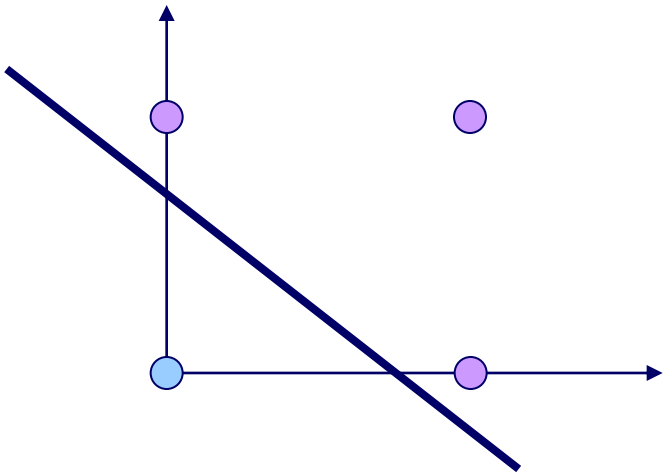
⇨ Queste funzioni sono interessanti in quanto permettono al neurone di avere un output continuo, che ne consente una interpretazione in chiave probabilistica.

Capacità espressive del percettrone

- ⇨ Ogni percettrone può rappresentare solo funzioni linearmente separabili.
- ⇨ La superficie di separazione tra gli esempi positivi e negativi è un piano.



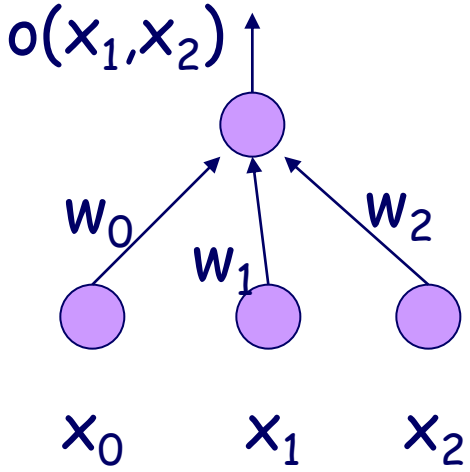
and



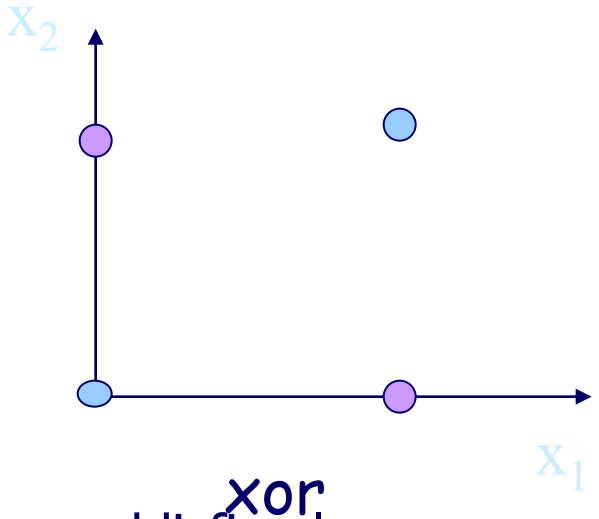
or

Limiti espressivi del percettrone

⇨ La funzione XOR non può essere rappresentata, essendo non linearmente separabile



$$-w_0 + \;).w_1 + \;).w_2 \leq \;)$$
$$-w_0 + \;).w_1 + \;\;.w_2 > \;)$$
$$-w_0 + \;\;.w_1 + \;).w_2 > \;)$$
$$-w_0 + \;\;.w_1 + \;\;.w_2 \leq \;)$$



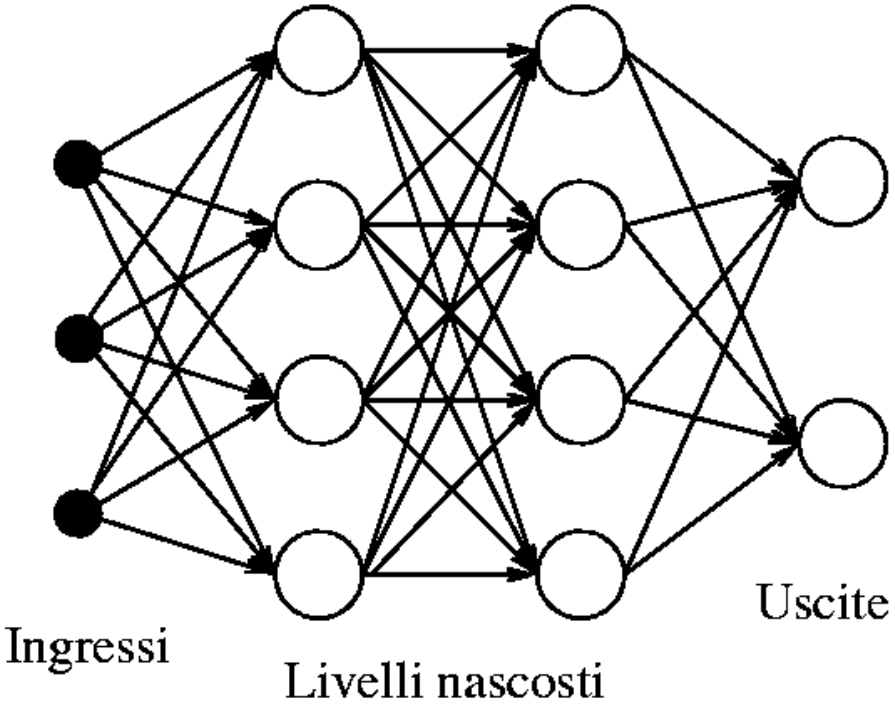
- Non è possibile trovare valori di w_0, w_1 e w_2 che soddisfino le disequazioni precedenti

La struttura delle reti

- L'aggregazione di più neuroni a formare una rete provoca un'esplosione di complessità, in quanto si possono formare topologie complesse in cui sono presenti cicli.
- Il modello più semplice, tuttavia, non prevede cicli: l'informazione passa dall'input all'output (reti *feed-forward*)
- In caso in cui siano presenti cicli, si parlerá di *reti ricorrenti*.

Le reti *feed forward*

- Topologia più semplice: non prevede cicli.
- La rete è organizzata a livelli:
  - ogni neurone di un livello riceve input solo dai neuroni del livello precedente;
  - propaga gli output solamente verso i neuroni dei livelli successivi
- I livelli compresi fra gli input e l'output vengono chiamati livelli nascosti (in questo caso 2).



- ⇨ In questo tipo di reti non sono possibili autocollegamenti o connessioni con i neuroni del proprio livello.
- ⇨ Ogni neurone ha quindi la funzione di propagare il segnale attraverso la rete, con un flusso di informazione dagli ingressi verso le uscite.
  - ⇨ Una conseguenza immediata di ciò è rappresentata dal fatto che la rete risponde sempre nello stesso modo se sollecitata con gli stessi input.
- ⇨ Nel caso in cui le unità elementari siano i percettroni, prenderà il nome di Percettrone Multilivello (o *MLP*, *Multilayer Perceptron*).

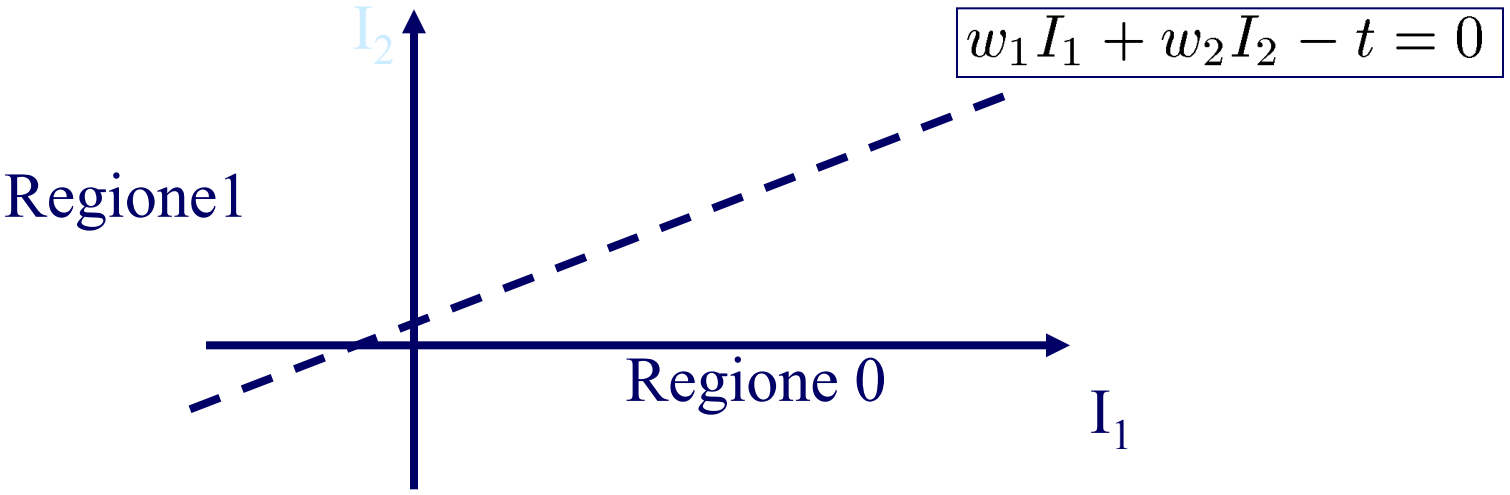
Capacitá di classificazione

- Le classi sono rappresentabili come regioni nello spazio degli input.
- Nel semplice caso di due classi, vogliamo creare uno strumento che dia in uscita 0 se l'input appartiene alla prima classe e 1 se appartiene alla seconda.
- L'obiettivo diventa quindi quello di approssimare una regione nello spazio (ad esempio la regione degli input che appartengono alla classe 1, la classe 2 è il complementare):
  - input appartenenti alla regione della classe 1 faranno "accendere" l'output della rete neurale

- ⇨ Obiettivo: costruire una rete neurale in grado di riconoscere una regione.
- ⇨ Domanda: in che modo la topologia della rete influisce sulla complessità delle regioni riconoscibili?
- ⇨ Consideriamo un percettrone con due ingressi I_1 I_2: l'output è dato da:

$$O = \begin{cases} 1 & \text{se } w_1 I_1 + w_2 I_2 - t \geq 0 \\ 0 & \text{se } w_1 I_1 + w_2 I_2 - t < 0 \end{cases}$$

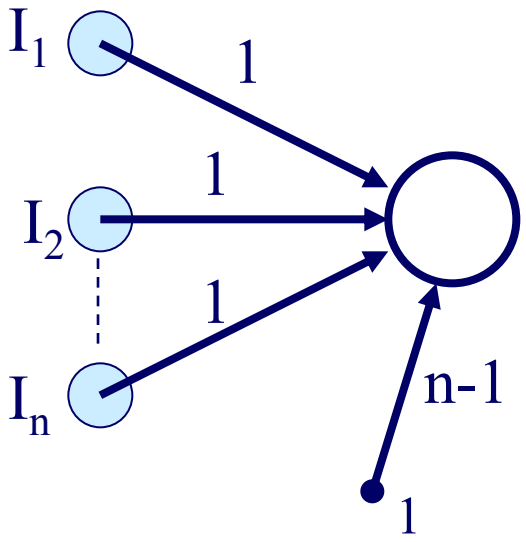
- Il neurone suddivide quindi il piano degli input in due semipiani:
  - da una parte ci sono gli input che producono come output del neurone 1, dall'altra ci sono gli input che producono output 0;



la retta che li delimita è identificata da:

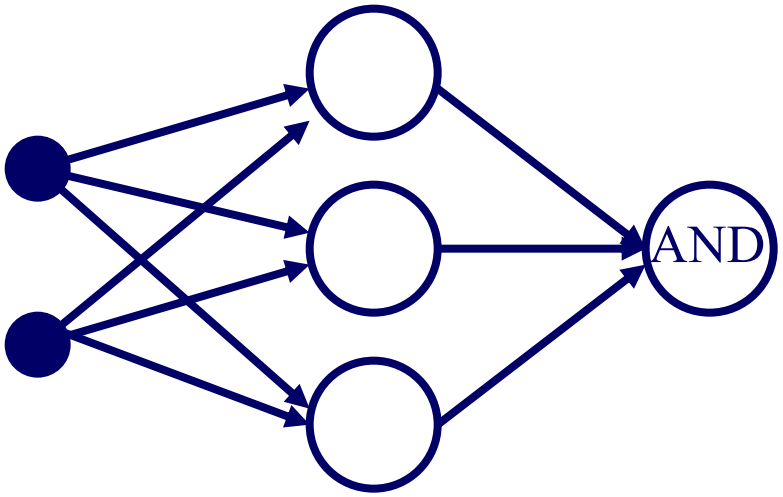
$$w_1 I_1 + w_2 I_2 - t = 0$$

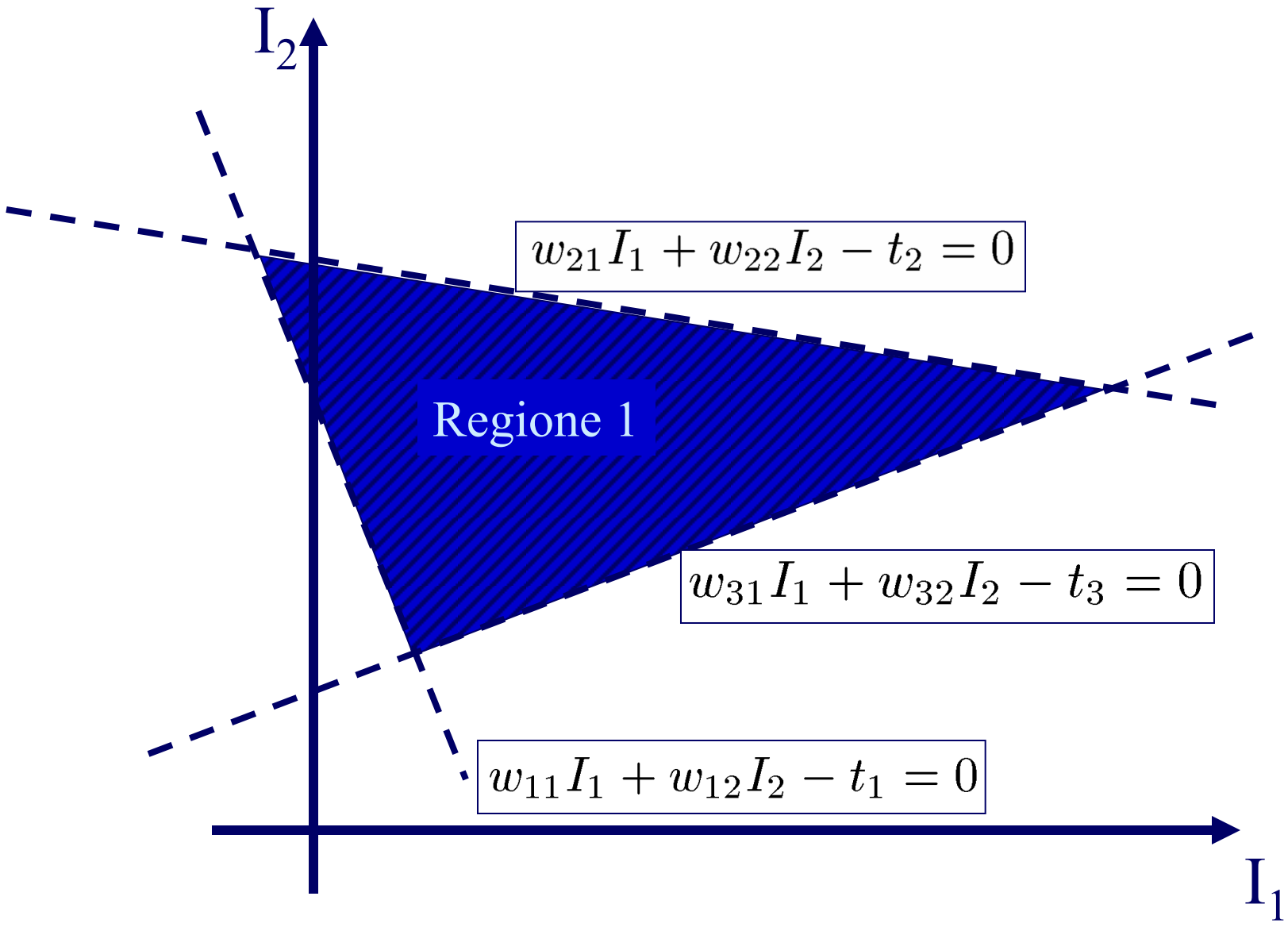
⇨ Per *n* ingressi un percettrone definisce un iperpiano di dimensionalità *n*-1, che suddivide lo spazio degli input in due semispazi: da una parte ci sono i valori per i quali il neurone si accende, dall'altra i rimanenti.



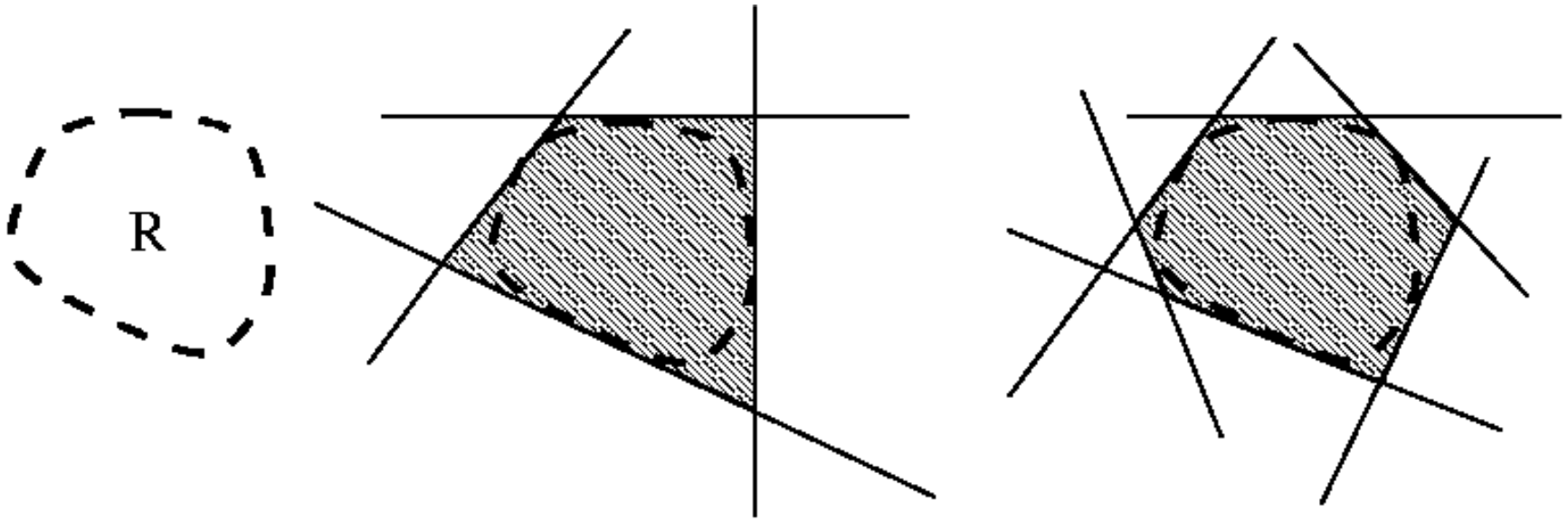
Funzione AND degli ingressi $I_1 \ldots I_n$

- Consideriamo un MLP - Percettrone Multilivello a due livelli:
  - ogni neurone identifica un semipiano
  - il neurone del secondo livello effettua un AND dell'output dei neuroni al livello precedente
  - con tre neuroni possiamo identificare una regione chiusa a forma di triangolo




I2
$w_{21}I_1 + w_{22}I_2 - t_2 = 0$
Regione 1
$w_{31}I_1 + w_{32}I_2 - t_3 = 0$
$w_{11}I_1 + w_{12}I_2 - t_1 = 0$
I1

- ⇨ Utilizzando 4 neuroni nel primo livello, possiamo ottenere un quadrilatero, e così via…
- ⇨ Data una regione R da delimitare nello spazio degli input, più sono i percettroni, più precisa sarà l'approssimazione che la rete produrrà.

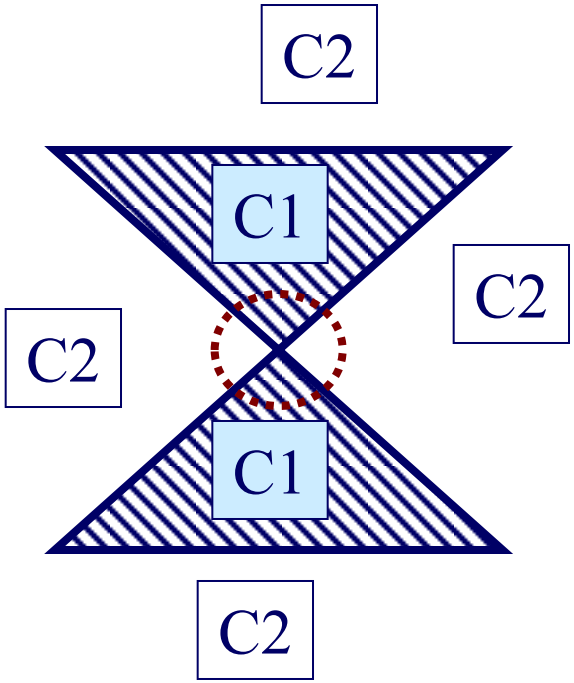


4 neuroni

6 neuroni

- ⇨ *1 livello nascosto*: riusciamo ad ottenere approssimazioni di regioni convesse e connesse
- ⇨ Domanda: ci sono delle regole per capire come varia la capacità approssimante con il variare della struttura?
- ⇨ Sí! Esistono tre teoremi
- ⇨ **Teorema 1** (Huang & Lipmann '88): Reti neurali *feed forward* con un livello nascosto riescono ad approssimare "quasi tutte" le superfici di separazione tra due classi.
  - ⇨ "Quasi tutte": aumentando il numero di neuroni nell'ultimo strato (da 1 a 2 o 3), si riesce a classificare anche regioni non connesse o convesse.

⇨ **Teorema 2** (Gibson & Lowan '90): Ci sono regioni che reti neurali con un livello nascosto non riescono ad approssimare:



Il problema sta nel punto di contatto, cerchiato in rosso

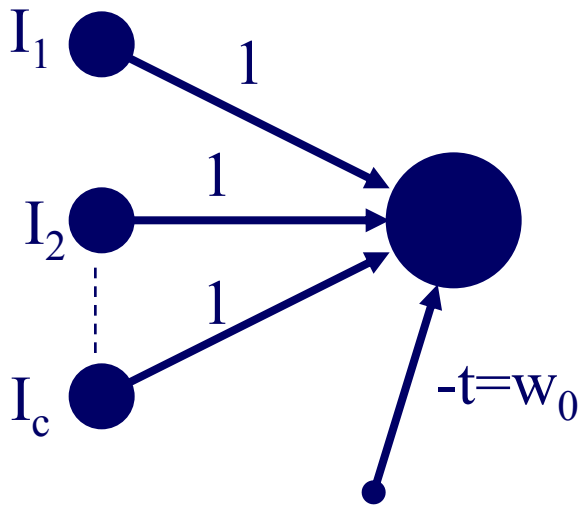
⇨ **Teorema 3** (Lipmann '87): Reti neurali con due livelli nascosti possono approssimare qualsiasi regione dello spazio (in un problema a 2 classi).

- ⇨ La precisione dell'approssimazione dipende poi dal numero di neuroni utilizzati negli strati intermedi

⇨ In pratica? Non ci sono regole fisse, spesso ci si basa su regole empiriche o euristiche.

Esempio: riconoscitore di template

- ⇨ Obiettivo: costruire un riconoscitore di pattern binari **b** = $b_1 \ldots b_c$.
- ⇨ Utilizzo una rete semplicissima, con c input e un solo neurone: l'uscita sará 1 se il pattern presentato corrisponde al pattern di riferimento **b**, 0 altrimenti.



⇨ Come si costruisce questa rete neurale?

⇨ Il peso di ogni connessione w_i viene fissato a

$$w_i = \begin{cases} 1 & \text{se} \quad b_i = 1 \\ -1 & \text{se} \quad b_i = 0 \end{cases}$$

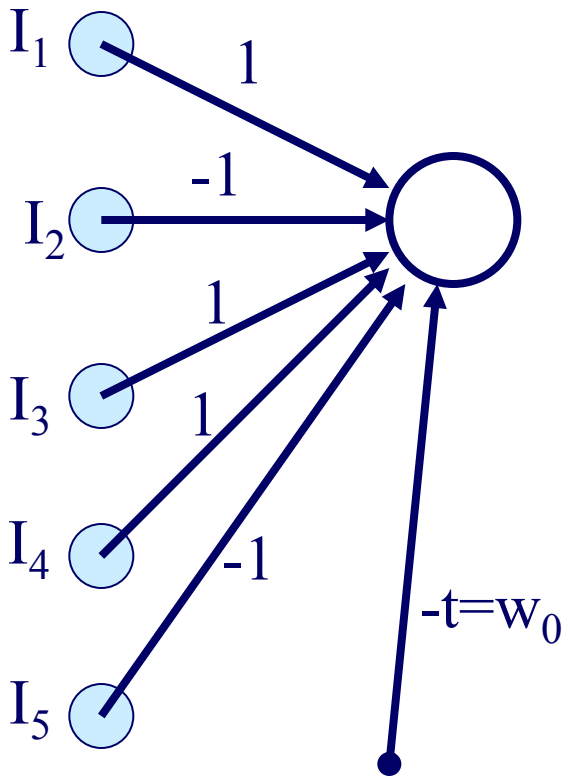
⇨ Definiamo *m* come

$$m = \sum_{i=1}^{c} b_i$$

⇨ Avremo che

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{c} I_i w_i = m & \text{se } I_i = b_i \quad \forall i = 1...c \\ \sum_{i=1}^{c} I_i w_i \leq m - 1 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

⇨ Esempio: **b**=10110, *m*=3; la rete diventa:



Proviamo a dare in input alla rete

I=10110=**b**

$$\sum_{i=1}^{c} w_i I_i =$$

$$= 1 \cdot 1 + 0 \cdot -1 + 1 \cdot 1 + 1 \cdot 1 + 0 \cdot -1 =$$

$$= 3 = m$$

Proviamo ora a dare un input sbagliato

I=11110

$$\sum_{i=1}^{c} w_i I_i =$$

$$= 1 \cdot 1 + 1 \cdot -1 + 1 \cdot 1 + 1 \cdot 1 + 0 \cdot -1 =$$

$$= 2 \leq m - 1$$

⇨ Scegliendo come soglia *m*-1, avremo che:

$$\begin{cases} \sum_{i=0}^{c} I_i w_i = 1 & \text{se } I_i = b_i \quad \forall i = 1...c \\ \sum_{i=0}^{c} I_i w_i \leq 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

⇨ Utilizzando come funzione di attivazione la funzione di *Heaviside,* otteniamo esattamente il classificatore cercato

$$O = \begin{cases} 1 & \text{se } I_i = b_i \quad \forall i = 1...c \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

⇨ Considerazione: posso approssimare con una rete neurale qualsiasi funzione booleana:

000	1	←
001	0	
010	1	←
011	0	
100	0	
101	1	←
110	0	
111	0	

Data una funzione booleana generica, posso costruire i neuroni che riconoscono i pattern che danno vero (quelli con la freccetta), mettendoli quindi in AND tra di loro.

L'addestramento della rete neurale

- Una volta stabilite tutte le caratteristiche della rete neurale, quali
  - topologia,
  - numero e tipo di neuroni,
  - collegamenti, etc.

  occorre determinare i pesi delle connessioni in modo da costruire un classificatore, avendo a disposizione una serie di esempi tratti dal problema in questione: questa operazione prende il nome di *addestramento* della rete neurale.

- Consideriamo il caso di *addestramento supervisionato,* dove, per ogni pattern dell'insieme degli esempi, viene specificato anche il valore di uscita desiderato.
- L'addestramento supervisionato consiste quindi nel:
  - presentare alla rete esempi tratti dal problema in esame
  - aggiustare i pesi delle connessioni sulla base delle discrepanze tra l'uscita prodotta e l'uscita desiderata.

L'insieme degli esempi prende il nome di insieme di apprendimento, *training set*, ed è una tabella del tipo:

In	Out
x_1	y_1
x_2	y_2
$\vdots$	$\vdots$
x_p	y_p

Il *training set*

- Training set $T=\{(x_1,y_1)...(x_p,y_p)\}$:
  - x_i vettori di input
  - y_i classe a cui il vettore di input appartiene
- Rappresenta istanze del problema: descrive alcuni dei valori che le variabili assumono nelle classi.
- Deriva da misurazioni, quindi puó contenere informazione incompleta, inesatta o approssimata.
- Rappresenta un **fattore critico**: deve essere rappresentativo del fenomeno in questione:
  - deve contenere esempi rappresentativi di ogni classe;
  - tutte le classi devono essere ben rappresentate.

Formalizzazione

- Dato il training set $T=\{(x_1,y_1)\ldots(x_p,y_p)\}$, l'obiettivo è quello di aggiustare i pesi della rete sulla base di questi esempi
  - la rete deve funzionare bene almeno su questi esempi

- Definiamo $f_W(x_i)$ l'uscita della rete per l'input x_i, che dipende dai pesi W.
- Una volta fissata la topologia, W identifica unicamente una rete neurale.

- ⇨ Si cercherà la configurazione di pesi *W* che minimizzi una funzione costo *E(W).*
- ⇨ Possono essere definiti diverse tipologie di funzione di costo: la più semplice è l'*errore quadratico medio*, definito come

$$E(W) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{p}\left(y_i - f_W(x_i)\right)^2$$

L'obiettivo diventa quindi quello di trovare la configurazione W^* che minimizzi l'errore *E(W)*.

$$W^* = \arg\min E(W)$$

La minimizzazione dell'errore

- Essendo tale funzione differenziabile, possiamo calcolarne il minimo utilizzando il metodo di *discesa lungo il gradiente*:
  - si parte da una configurazione arbitraria, spesso scelta in modo casuale, denotata con $W^{(0)}$.
  - I pesi vengono quindi aggiornati iterativamente secondo la formula

$$W^{(k+1)} = W^{(k)} + \Delta W^{(k)}$$

⇨ dove

$$\Delta W^{(k)} = -\eta \left. \frac{\partial E}{\partial W} \right|_{W=W^{(k)}}$$

⇨ dove η rappresenta un reale positivo piccolo detto parametro di apprendimento (*learning rate*).

⇨ Ad ogni iterazione l'idea è quindi quella di spostarsi, all'interno dello spazio dei pesi, lungo la direzione di massima diminuizione dell'errore, cioè in quella opposta a quella del gradiente.

⇨ L'aggiustamento che si apporta ai pesi ad ogni iterazione è determinato dal parametro di apprendimento η:

⇨ più è grande, maggiore sarà la correzione che si effettuerà ad ogni iterazione.

Aggiornamento dei pesi: due approcci

- *Approccio batch*: le modifiche ai pesi vengono apportate solo dopo che alla rete sono stati presentati tutti i patterns dell'insieme di apprendimento:
  - in altre parole si valuta l'errore della rete sull'intero insieme degli esempi prima di aggiornare i pesi;
  - l'idea è quella di fare poche modifiche ma sostanziali.
- *Approccio on-line*: le modifiche avvengono dopo la presentazione di ogni singolo pattern;
  - si procede quindi con tante piccole modifiche.

- L'approccio più utilizzato è il secondo, in quanto fissando il parametro di apprendimento η sufficientemente piccolo e scegliendo in modo casuale gli esempi da presentare alla rete, esso consente una vasta esplorazione dello spazio della funzione di costo.

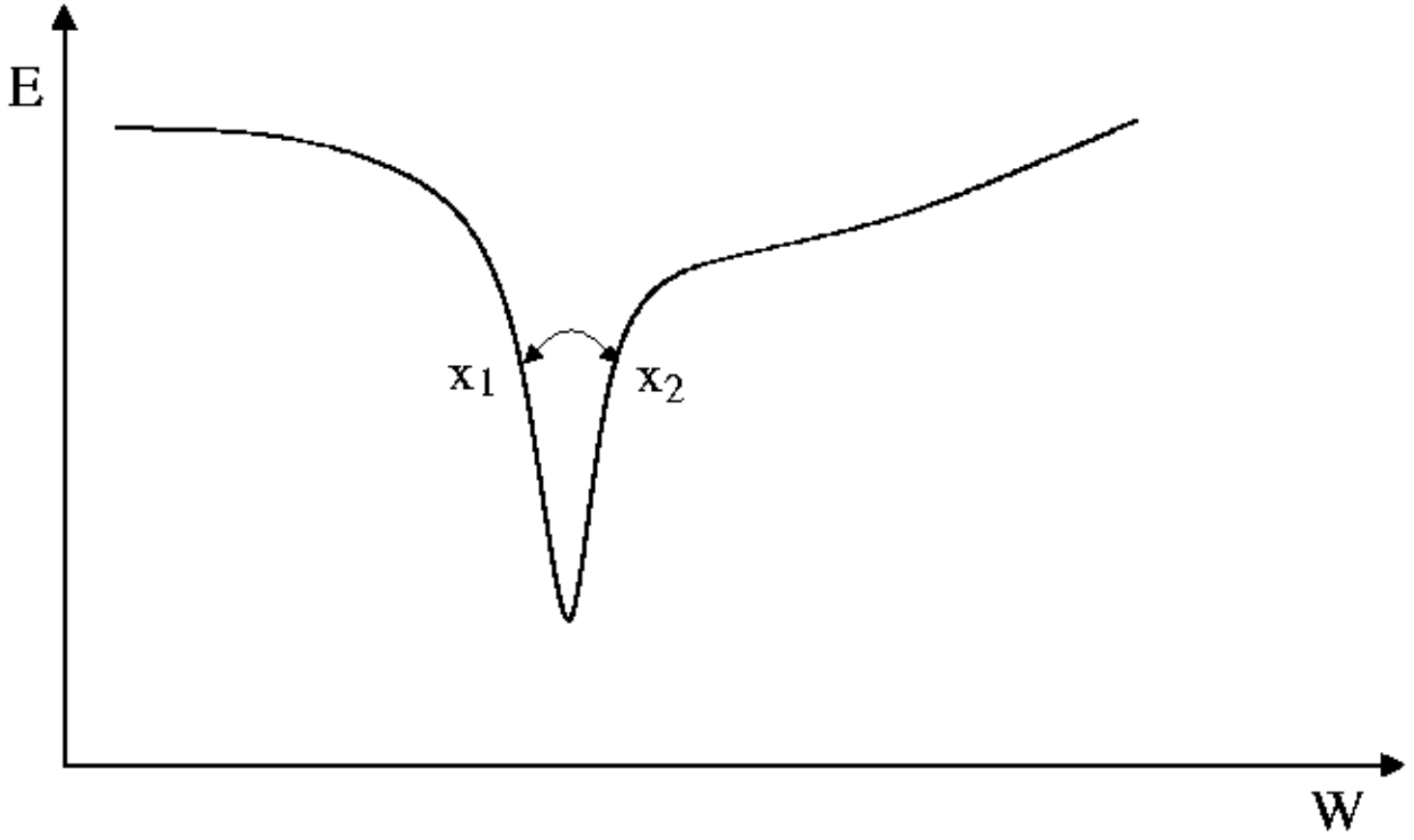
- *Epoca*: la presentazione alla rete di tutti i *patterns* dell'insieme degli esempi:
  - essa rappresenta l'unità di misura del tempo di addestramento

Svantaggi del metodo di discesa lungo il gradiente

Svantaggio 1

Il parametro di apprendimento η è un fattore critico:

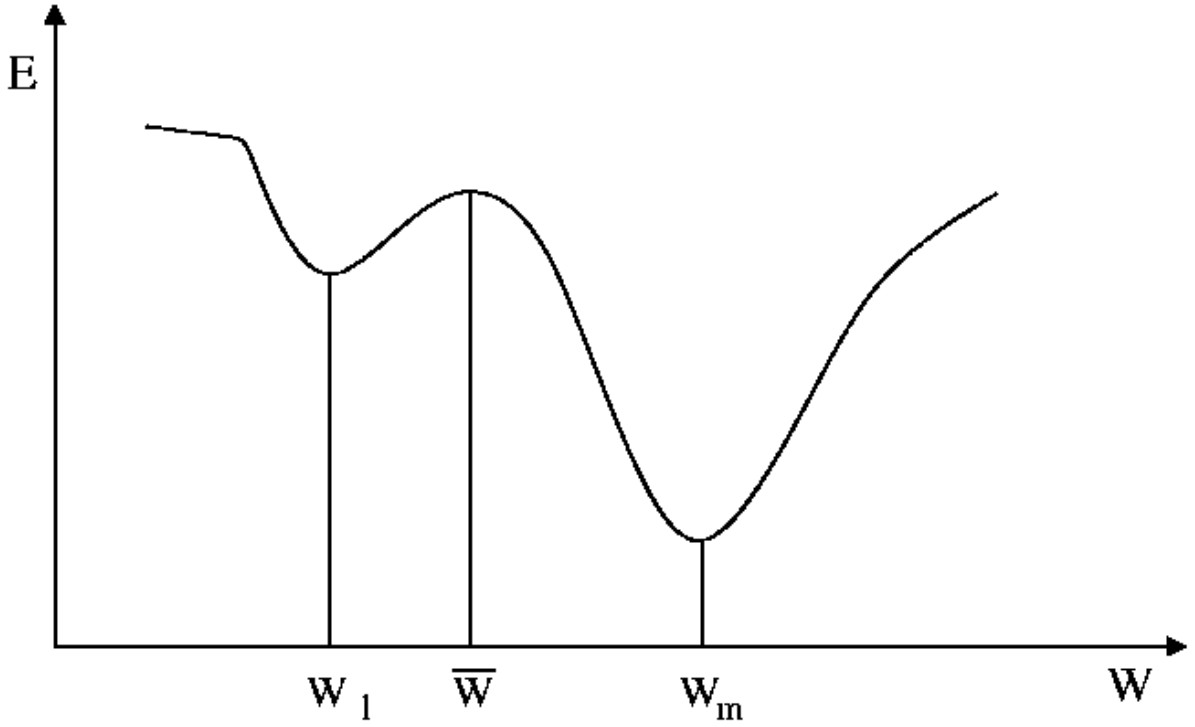
- ⇨ esso rappresenta l'entità della correzione effettuata sui pesi ad ogni iterazione dell'algoritmo e ne determina quindi la velocità di convergenza;
- ⇨ se η è troppo piccolo, la convergenza può essere troppo lenta;
- ⇨ per contro, un η troppo grande può impedire un'accurata determinazione della configurazione minima e si potrebbero avere delle oscillazioni.



Per η troppo grande, l'algoritmo potrebbe non riuscire a scendere nella valle, oscillando tra i due punti x_1 e x_2.

⇨ Svantaggio 2

Questa tecnica converge al più vicino minimo locale: la scelta iniziale dei valori dei pesi può essere critica.



- Se si sceglie come configurazione iniziale un qualsiasi punto maggiore di W, l'algoritmo riesce a raggiungere il minimo W_m della funzione di errore, altrimenti si ferma nel minimo locale W_l.

- Una soluzione potrebbe essere quella di introdurre nella formula di aggiornamento dei pesi dei termini chiamati *momenti:*
  - l'idea è quella di aggiungere alla variazione sui pesi da effettuare ad ogni iterazione un contributo che derivi dal passo precedente, imponendo una specie di *inerzia* al sistema.

$$\Delta W^{(k)} = -\eta \left.\frac{\partial E}{\partial W}\right|_{W=W^{(k)}} + \alpha \left(W^{(k)} - W^{(k-1)}\right)$$

  - con $0<\alpha<1$ detto *parametro del momento* (usualmente $\alpha = 0.9$).
- In alternativa si possono utilizzare tecniche di minimizzazione globali, quali ad esempio *simulated annealing*, o gli *algoritmi genetici*, oppure ancora la *Reactive Tabu Search*.

⇨ **Svantaggio 3**

Se con la discesa lungo il gradiente si arriva in una zona in cui le funzioni di attivazione saturano (cioè g è pressoché costante):

- ⇨ la derivata di g è quasi nulla,
- ⇨ ad ogni iterazione la correzione è molto piccola,
- ⇨ avremo una drastica riduzione della velocità di apprendimento.

⇨ Questo può essere parzialmente evitato se si sceglie una configurazione iniziale con pesi molto piccoli: almeno inizialmente le funzioni di attivazione non saturano.

L'algoritmo di *Back Propagation*

- ⇨ Tecnica ottimizzata per l'addestramento della rete
- ⇨ Motivazione: il calcolo della derivata di E rispetto a W effettuata con il rapporto incrementale, è oneroso: la sua complessità è $O(W^2)$, con W numero di pesi della rete.
  - ⇨ Occorre infatti calcolare per ogni peso il rapporto incrementale

$$\frac{E(W+h)-E(W)}{h}$$

  - ⇨ il cui calcolo ha complessità è $O(W)$
  - ⇨ occorre valutare tutta la rete per avere $E(W)$, quindi occore valutare W volte il rapporto incrementale

La Back propagation (2)

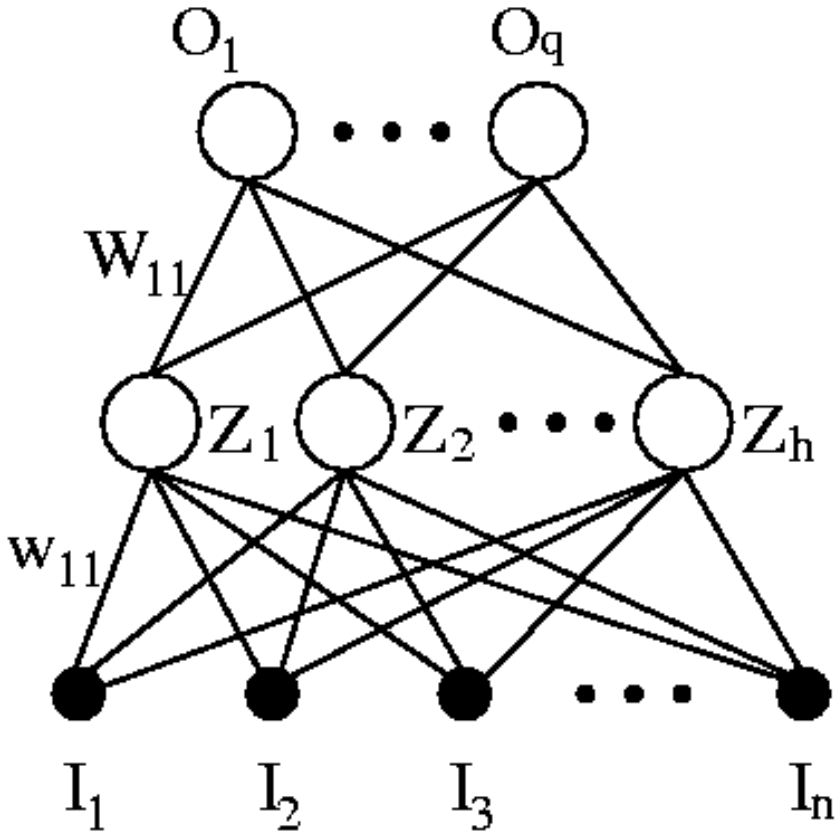
- ⇨ Metodo di addestramento delle reti neurali feed forward.
- ⇨ Si basa sul metodo di discesa lungo il gradiente.
- ⇨ Ottimizza il calcolo della derivata, arrivando ad avere una complessità totale di $O(W)$, con W numero di pesi.

Schema generale

- La *back propagation* prevede due fasi, una fase *in avanti* e una fase *indietro*:
- *Fase in avanti (forward)*:
  - presentare un esempio alla rete;
  - determinare l'uscita e calcolare l'errore.
- *Fase indietro (backward)*:
  - l'errore viene propagato indietro nella rete, aggiustando progressivamente i pesi.

Formalizzazione del problema

- Consideriamo una rete *feed forward* a 2 livelli a *n* input, *h* neuroni nel livello nascosto e *q* output
- *g* funzione di attivazione derivabile (es.: logistica)



$O_k = g(a_k)$

W_{kj}

$Z_j = g(a_j)$

w_{ji}

I_i

- I_i: input della rete.
- w_{ji}: peso della connessione dall'i-esimo input al j-esimo neurone del livello nascosto.
- a_j: somma pesata degli input del j-esimo neurone del livello nascosto

$$a_j = \sum_{i=1}^{n} w_{ji} I_i$$

- Z_j: output del j-esimo neurone del livello nascosto

$$Z_j = g(a_j)$$

- W_{kj}: peso della connessione dal *j*-esimo neurone del livello nascosto al *k*-esimo neurone del livello dell'output.
- a_k : somma pesata degli input del *k*-esimo neurone del livello di uscita

$$a_k = \sum_{j=1}^{h} W_{kj} Z_j$$

- O_k: output del *k*-esimo neurone del livello di uscita

$$O_k = g(a_k)$$

⇨ Considerando un approccio *on-line* all'addestramento, la funzione di errore (errore quadratico medio) diventa:

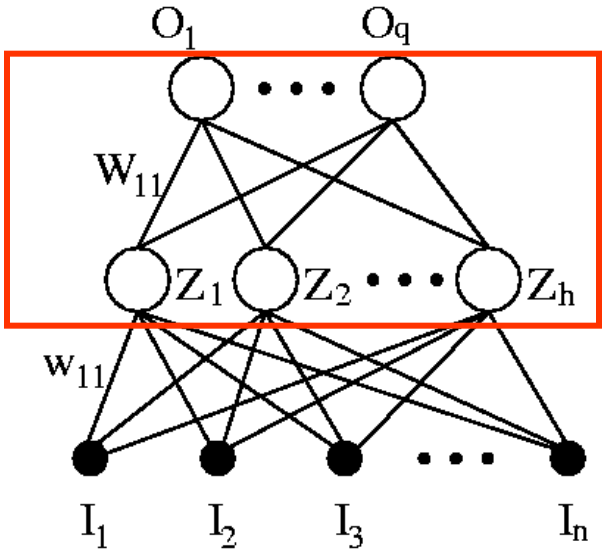
$$E(W) = \frac{1}{2}\sum_i (y_i - O_i)^2$$

$$= \frac{1}{2}\sum_i \left[y_i - g\left(\sum_j W_{kj} g\left(\sum_i w_{ji} x_i \right) \right) \right]^2$$

Calcolo derivata

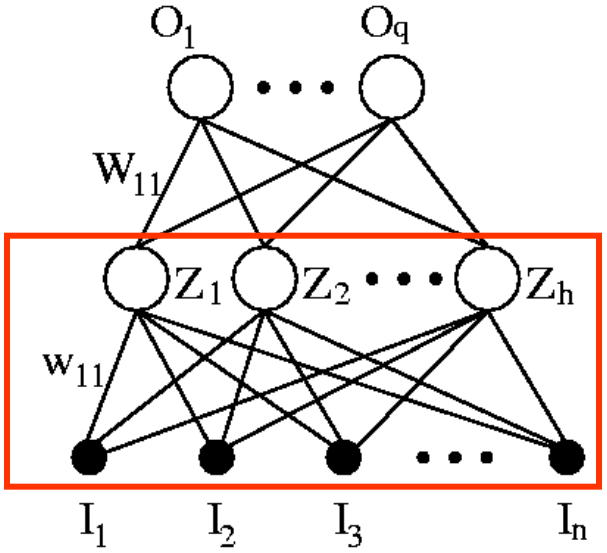
⇨ Calcoliamo la derivata di E rispetto ai pesi, in due passi separati:

Passo 1



Pesi delle connessioni livello nascosto - output

Passo 2



Pesi delle connessioni input - livello nascosto

Connessioni livello nascosto - uscita

⇨ Per ogni singolo peso w_{lm} si puó applicare la regola della catena

$$\frac{\partial E}{\partial w_{lm}} = \frac{\partial E}{\partial a_l} \frac{\partial a_l}{\partial w_{lm}}$$

⇨ Per le connessioni tra il livello nascosto e l'uscita si ha che

$$\frac{\partial E}{\partial W_{kj}} = \frac{\partial E}{\partial a_k} \frac{\partial a_k}{\partial W_{kj}}$$

con

$$\frac{\partial E}{\partial a_k} = \frac{\partial E}{\partial O_k}\frac{\partial O_k}{\partial a_k}$$

$$= (y_k - O_k)g'(a_k)$$

e

$$\frac{\partial a_k}{\partial W_{kj}} = Z_j$$

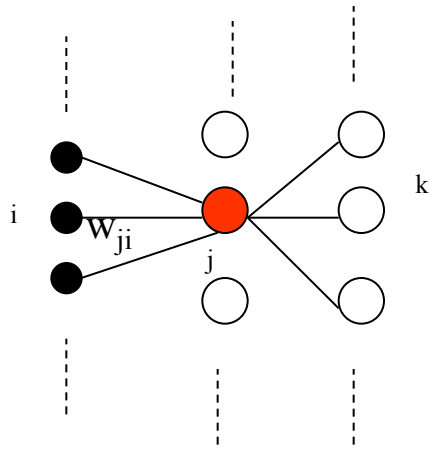
⇨ Definendo $\delta_{\cdot\cdot} = \frac{\partial \cdot'}{\partial \cdot_k} = y_k - \cdot_k)g'(a_k)$

otteniamo che $\frac{\partial E}{\partial W_{kj}} = \delta_k Z_j$

Connessione input-livello nascosto

⇨ Applicando la regola della catena:

$$\frac{\partial E}{\partial w_{ji}} = \frac{\partial E}{\partial a_j}\frac{\partial a_j}{\partial w_{ji}}$$



⇨ Abbiamo che

$$\delta_j = \frac{\partial E}{\partial a_j} = \sum_k \frac{\partial E}{\partial a_k}\frac{\partial a_k}{\partial z_j}\frac{\partial z_j}{\partial a_j} = \sum_k \delta_k \frac{\partial a_k}{\partial z_j}\frac{\partial z_j}{\partial a_j} =$$

$$= \sum_k \delta_k w_{kj}\frac{\partial z_j}{\partial a_j} = \sum_k \delta_k w_{kj} g'(a_j) = g'(a_j)\sum_k \delta_k w_{kj}$$

⇨ La derivata di a_j rispetto w_{ji} è

$$\frac{\partial a_j}{\partial w_{ji}} = I_i$$

⇨ Riassumendo, definendo

$$\delta_j = g^{'}(a_j) \sum_k \delta_k w_{kj}$$

⇨ otteniamo

$$\frac{\partial E}{\partial w_{ji}} = \delta_j I_i$$

In pratica...

- La derivata nei due passi è calcolata secondo una formula simile. Generalizzando, abbiamo che

$$\Delta W_{pq} = -\eta \delta_{output} \times V_{input}$$

dove:

- *input* e *output* rappresentano il neurone origine (*q*) e il neurone destinazione (*p*) della connessione
- *V* rappresenta il valore di uscita del neurone
- δ rappresenta "l'errore" che viene propagato all'indietro, varia da livello a livello ma mantiene una formula simile a

$$\delta_j = g'(a_j) \sum_k \delta_k w_{kj}$$

Riassumendo:

⇨ Fase *forward*:

- ⇨ l'ingresso x_i viene inserito nella rete;
- ⇨ vengono calcolate le Z e le O e memorizzate (in generale, le attivazioni delle unità nascoste e di uscita)
- ⇨ La complessitá è $O(W)$

⇨ Fase *backward*:

- ⇨ si calcola δ_k per le unità di uscita
- ⇨ si propaga δ_k all'indietro per calcolare δ_j (per ogni unità nascosta)
- ⇨ La complessitá è $O(W)$

⇨ Il tutto viene ripetuto per ogni pattern.

Considerazioni

- La complessità del calcolo della derivata è $O(W)$: si ha quindi una drastica riduzione della complessitá rispetto all'uso del rapporto incrementale
- La regola di aggiornamento dei pesi è una regola *locale*:
  - per calcolare la variazione di un peso l'algoritmo necessita solamente delle informazioni presenti alle due estremità della connessione;
  - questo permette un'alta parallellizzazione del processo di addestramento della rete neurale.

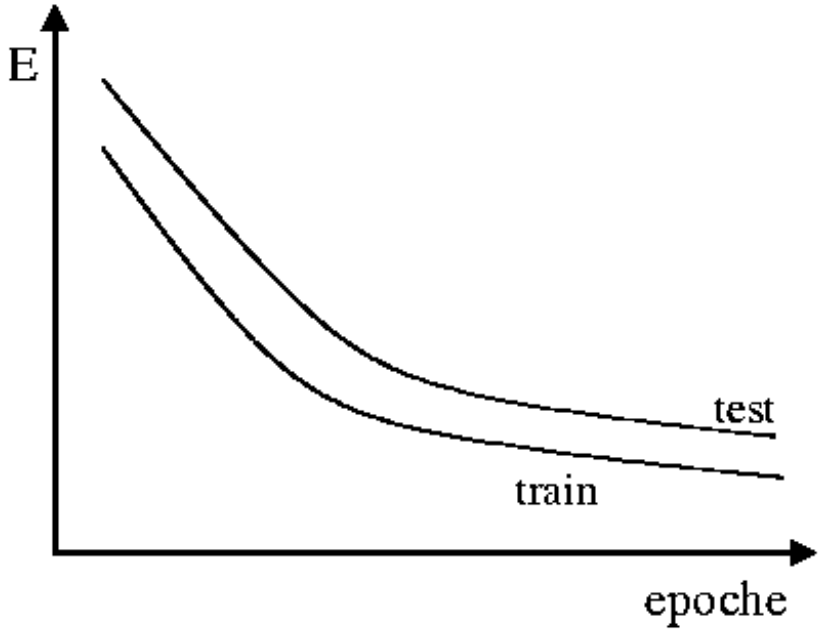
La generalizzazione

- *Capacità di generalizzazione di una rete*

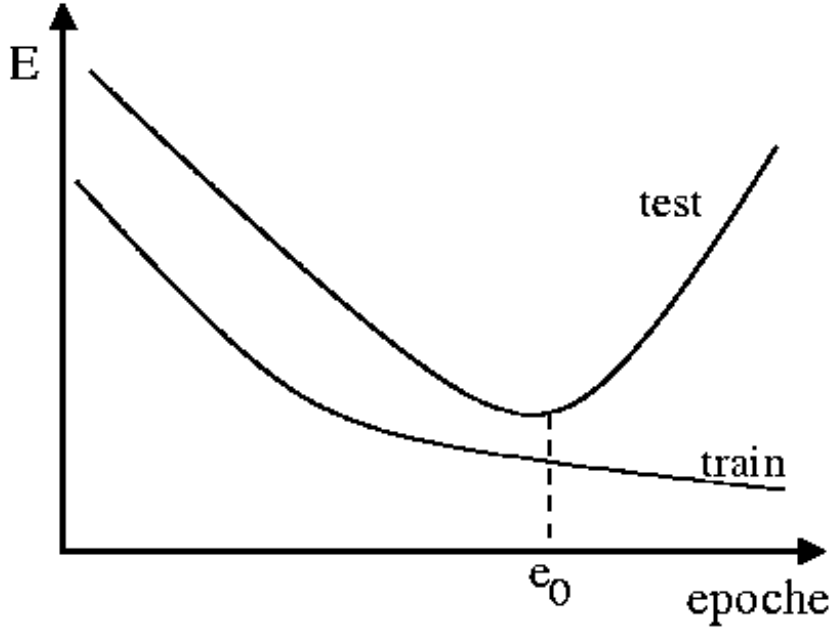
  Abilità nel riconoscere e valutare correttamente esempi del problema in esame non presenti nell'insieme di apprendimento.

- Questa capacità è determinata dalla topologia della rete (numero di livelli, neuroni per livello etc.) e dalla scelta dell'insieme di addestramento:
  - più esso è rappresentativo del fenomeno in questione, maggiore sarà la capacità di generalizzazione.

- Misura della capacità di generalizzazione:
  - occorrerebbe riestrarre altri esempi dal problema e utilizzarli per testare la rete: purtroppo questo può risultare troppo dispendioso;
  - l'alternativa che si adotta nella maggior parte dei casi è quella di suddividere l'insieme a disposizione in due parti
    - utilizzare una parte per addestrare
    - utilizzare l'altra parte per testare la rete.
  - Calcolando l'errore sull'insieme di addestramento e su quello di test in funzione del tempo si può decidere quando smettere il *training*



La rete generalizza bene e si può arrivare ad avere un basso valore di errore



Dopo un numero di epoche e_0, l'errore sull'insieme di test comincia a crescere: si verifica una situazione di *over-training*. Questo significa che la rete comincia a perdere la capacità di generalizzare ed è quindi opportuno interrompere l'addestramento

Overtraining

⇨ situazione in cui la rete ha imparato talmente bene i pattern di esempio da aver perso la flessibilità per poter riconoscere altri pattern, ovvero la rete ha "memorizzato" i pattern del training set, senza aver imparato nulla.

⇨ Nota: l'addestramento della rete non è equivalente alla minimizzazione dell'errore sull'insieme di training (occorre tener conto dell'overtraining).

⇨ In altre parole, non è sempre detto che il minimo dell'errore corrisponda al miglior addestramento per la rete neurale.

Suddivisione Training - Testing set

- ⇨ Tipicamente l'insieme di dati a disposizione è limitato:
  - ⇨ non è pensabile di costruire insiemi di test ripetendo esperimenti.
  - ⇨ occorre sfruttare al meglio l'insieme dato:
- ⇨ Esistono diversi metodi per suddividere il training set dal testing set:
  - ⇨ metodo Resubstitution
  - ⇨ metodi di Cross Validation

Il metodo *Resubstitution*

- L'idea in questo metodo è quella di costruire il classificatore e di testarlo con lo stesso insieme, l'intero insieme dei dati a disposizione.
- Questo approccio fornisce chiaramente una stima ottimistica dell'errore, nel senso che ne è un limite inferiore.

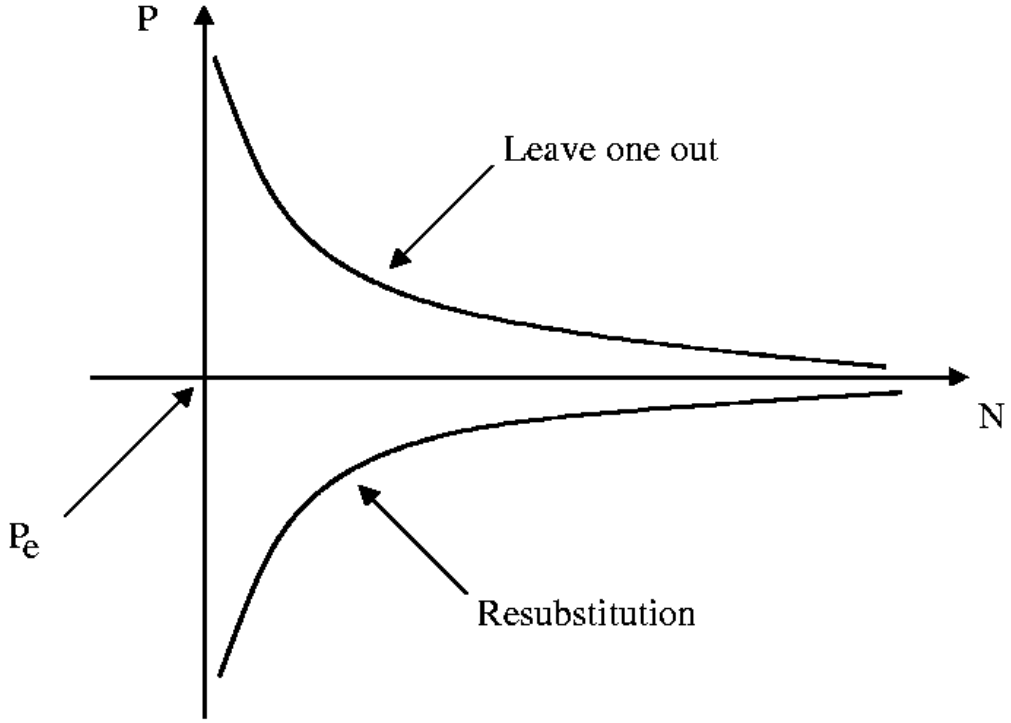
I metodi di Cross Validation

- I metodi della classe della Cross-Validation (ne esistono molte varianti) si basano sulla convinzione che sia necessario utilizzare due insiemi disgiunti per realizzare e per testare un classificatore.
- Varianti:
  - Holdout
  - Averaged Holdout
  - Leave One-Out
  - Leave K-Out

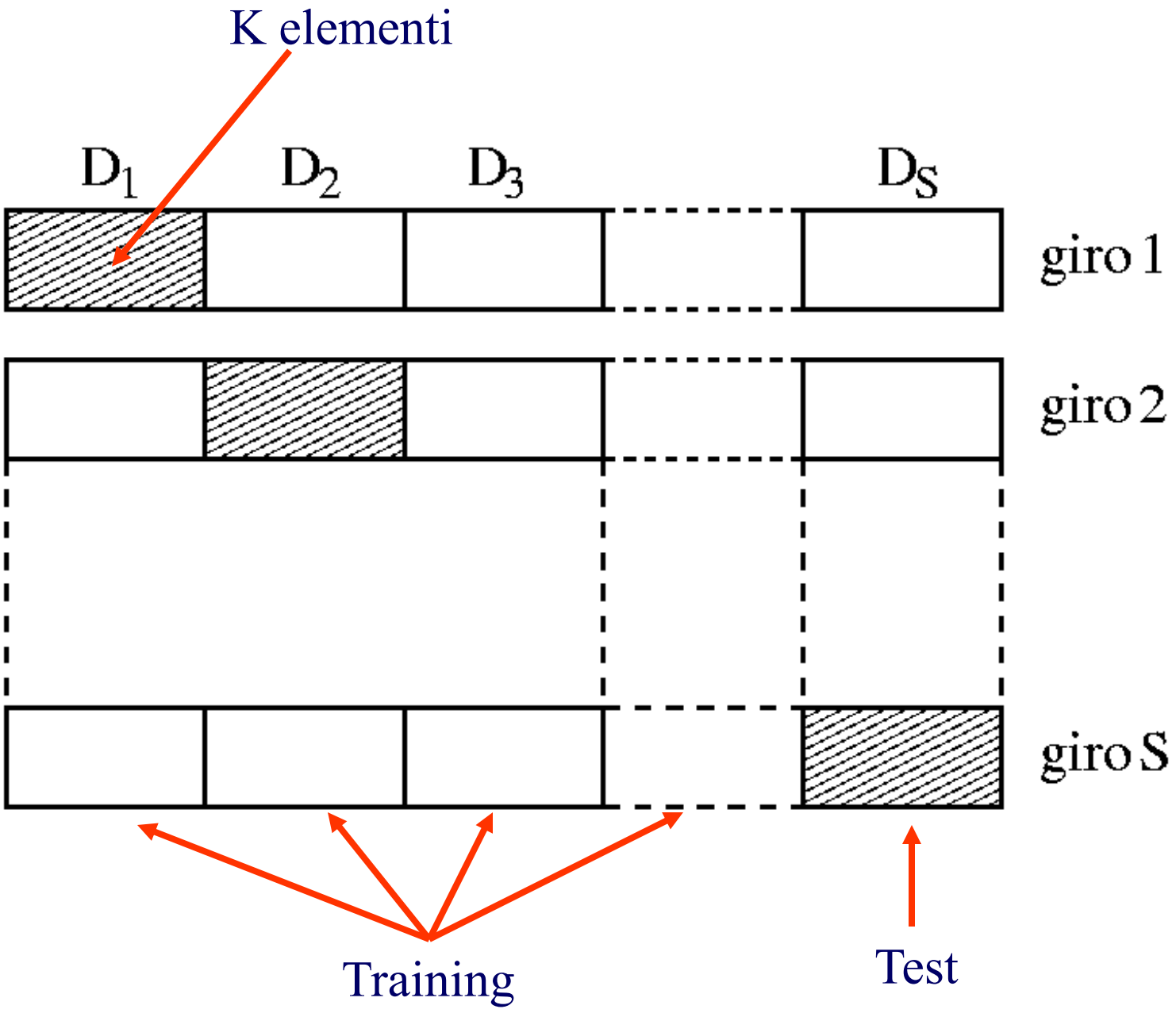
- ⇨ *Holdout*
  - ⇨ L'insieme dei dati viene partizionato casualmente in due sottoinsiemi disgiunti di eguale dimensione;
  - ⇨ uno dei due sottoinsiemi viene utilizzato come *Learning Set* e l'altro come *Test Set*;
  - ⇨ questo metodo fornisce una stima superiore dell'errore.
- ⇨ *Averaged Holdout*
  - ⇨ per rendere il risultato meno dipendente dalla partizione scelta, si mediano i risultati calcolati su più partizioni holdout;
  - ⇨ le partizioni sono costruite casualmente, oppure in modo esaustivo;
  - ⇨ questo metodo fornisce una stima superiore dell'errore.

⇨ *Leave One-Out*

- ⇨ dato un insieme di dati di cardinalità N, questo metodo ne utilizza N-1 per costruire il classificatore, mentre il dato escluso viene usato per testarlo;
- ⇨ anche qui si effettua una media sulle N partizioni effettuabili;
- ⇨ questo metodo produce una stima superiore dell'errore.



- ⇨ *Leave K-Out*:
  - ⇨ questa tecnica è una generalizzazione della tecnica precedente;
  - ⇨ l'idea è quella di suddividere l'insieme dei dati in S segmenti distinti e casuali;
  - ⇨ si realizza il classificatore utilizzando S-1 segmenti, mentre lo si testa utilizzando il segmento rimanente;
  - ⇨ questa operazione viene effettuata S volte, variando a turno il segmento del Test Set;
  - ⇨ infine l'errore viene mediato tra gli S risultati.


K elementi
D1
D2
D3
DS
giro 1
giro 2
giro S
Training
Test

Quando le reti neurali sono appropriate

- Se le istanze del problema sono date in coppie (attributi - classe)
  - è necessaria una fase di preprocessing: i valori di input devono essere scalati nel range [0-1], mentre i valori discreti devono essere convertiti in booleani.
- Se gli esempi del training set sono numerosi.
- Se sono accettabili tempi lunghi di addestramento.
- Se non è importante che la funzione determinata sia espressiva per un umano.

Vantaggi e svantaggi

- Vantaggi:
  - è un algoritmo inerentemente parallelo, ideale per hardware multiprocessori
  - rappresenta un sistema di classificazione molto potente, utilizzato in innumerevoli contesti
- Svantaggi:
  - determinare la topologia è un'arte
  - generalizzazione vs memorizzazione: con troppi neuroni, la rete tende a memorizzare i pattern e non riesce più a generalizzare
  - le reti richiedono un addestramento lungo e oneroso