

Riconoscimento e recupero dell'informazione per bioinformatica

Reti Neurali

Manuele Bicego

Corso di Laurea in Bioinformatica
Dipartimento di Informatica - Università di Verona

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

3

Esempi

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

4

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.

5

- ⇒ 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 bontà f
 - ⇒ Problema: ovviamente questo non è applicabile se lo spazio C è grande

6

Elaborazione non algoritmica

- ⇒ Il problema 2 non può essere risolto in modo algoritmico (eccetto la forza bruta) :
 - ⇒ informazione incompleta
 - ⇒ non specificabilità rigorosa del problema
- ⇒ Si può 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 la soluzione (dato l'algoritmo, non si ha la soluzione)
 - ⇒ utilizza informazioni che sono tipiche del problema
 - ⇒ può utilizzare istanze di soluzioni

7

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.

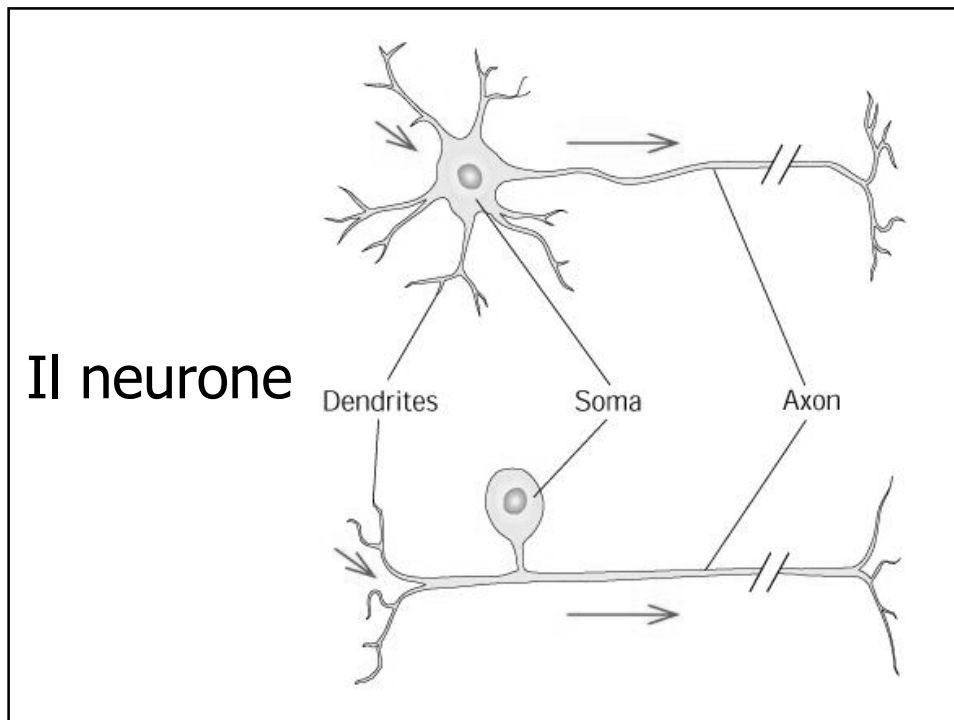
8

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 può non arrivare in parte
 - ⇒ **affetta da errore**: se i segnali sono affetti da errore il sistema deve essere in grado di rigenerarlo

10



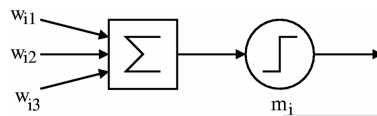
Il neurone

- ⇒ 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.

13

⇒ Anni 60: boom di lavoro sulle reti neurali, nel gruppo di Rosenblatt:

⇒ calcolo dei pesi

⇒ lavoro sui perceptron, reti in cui i neuroni sono organizzati in livelli di elaborazione sequenziale

⇒ 1969, Minsky e Papert:

⇒ dimostrano i limiti del perceptrone: crolla l'entusiasmo sulle reti neurali.

⇒ Anni 70: *associative content-addressable memory*:

⇒ reti associative, dove patterns simili venivano in qualche modo associati

14

⇒ 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)

15

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)

16

⇒ Ogni neurone possiede:

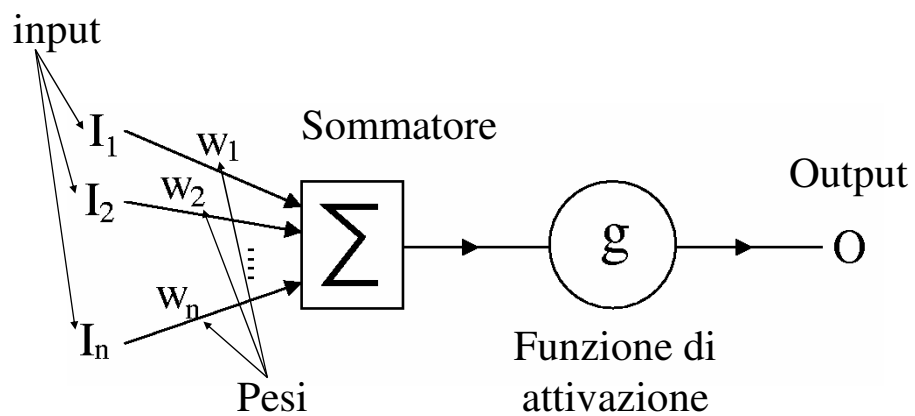
- ⇒ un insieme di ingressi provenienti dagli altri neuroni
- ⇒ un insieme di uscite verso gli altri neuroni
- ⇒ un livello di attivazione
- ⇒ un sistema per calcolare il livello di attivazione al tempo successivo

⇒ Le diverse reti neurali differiscono per:

- ⇒ tipologia di neuroni
- ⇒ tipologia di connessioni tra i neuroni

17

Il Neurone



18

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

19

- ⇒ *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

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

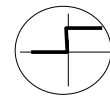
20

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

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

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

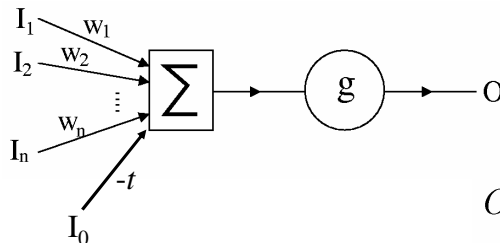
21

⇒ Questo semplice neurone si chiama *Percettrone* (*Perceptron*), 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 $-t$;



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

22

Altre funzioni di attivazione

⇒ funzione logistica:

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



⇒ funzione tangente iperbolica:

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



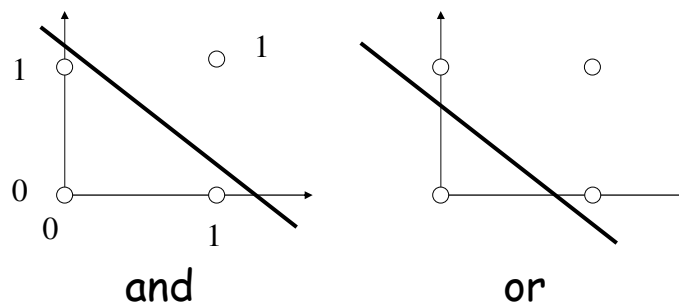
⇒ Queste funzioni sono interessanti in quanto permettono al neurone di avere un output continuo, che ne consente una interpretazione in chiave probabilistica.

23

Capacità espressive del percettrone

⇒ Ogni percettrone può rappresentare solo funzioni linearmente separabili.

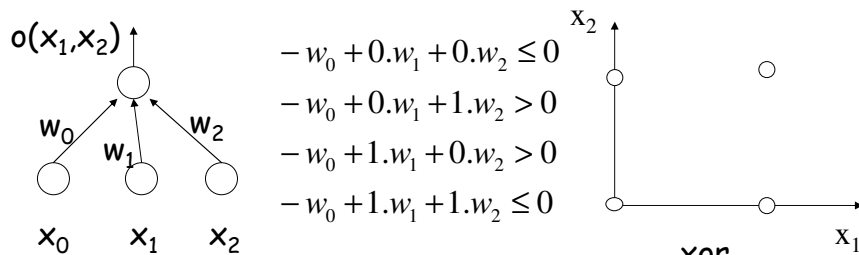
⇒ La superficie di separazione tra gli esempi positivi e negativi è un piano.



24

Limiti espressivi del perceptrone

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



$$-w_0 + 0.w_1 + 0.w_2 \leq 0$$

$$-w_0 + 0.w_1 + 1.w_2 > 0$$

$$-w_0 + 1.w_1 + 0.w_2 > 0$$

$$-w_0 + 1.w_1 + 1.w_2 \leq 0$$

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

25

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.

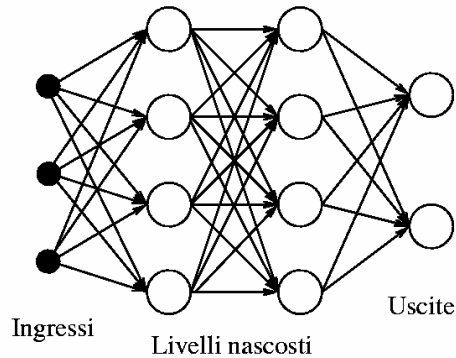
⇒ Il modello più semplice, tuttavia, non prevede cicli: l'informazione passa dall'input all'output (reti *feed-forward*)

⇒ In caso in cui siano presenti cicli, si parlerà di *reti ricorrenti*.

26

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).



27

- ⇒ 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 perceptron, prenderà il nome di Perceptrone Multilivello (o *MLP*, *Multilayer Perceptron*).

28

Capacità 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

29

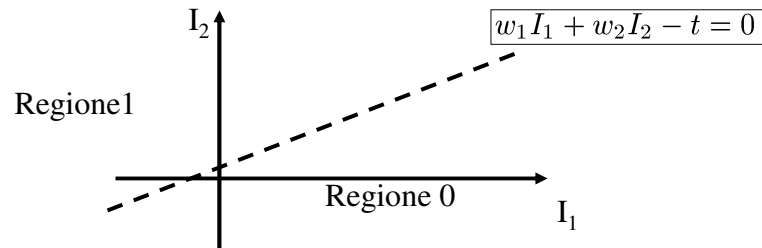
- ⇒ Obiettivo: costruire una rete neurale in grado di riconoscere una regione.
- ⇒ Domanda: in che modo la topologia della rete influisce sulla complessità delle regioni riconoscibili?
- ⇒ Consideriamo un percettrone con due ingressi I_1 I_2 : l'output è dato da:

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

30

⇒ 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;

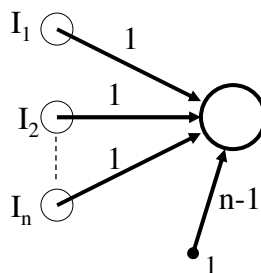


la retta che li delimita è identificata da:

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

31

⇒ Per n ingressi un perceptrone 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.

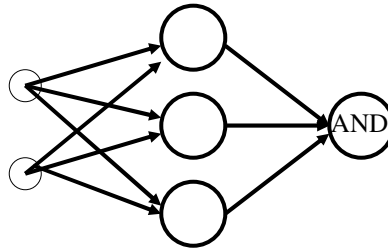


Funzione AND degli ingressi $I_1 \dots I_n$

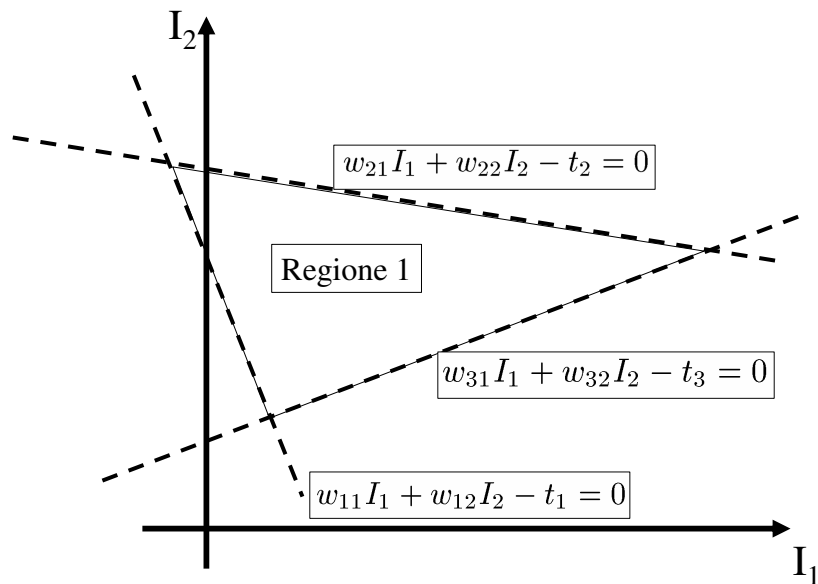
32

⇒ 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

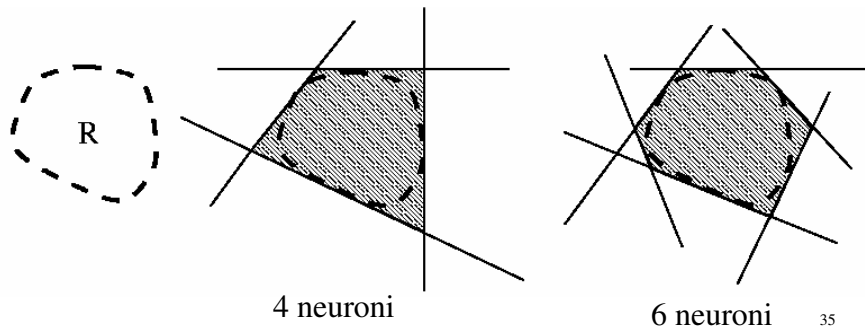


33



34

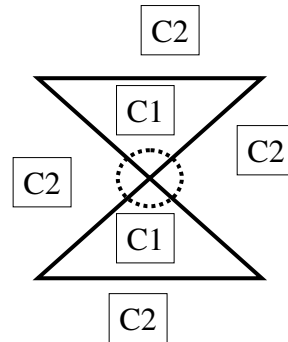
- ⇒ Utilizzando 4 neuroni nel primo livello, possiamo ottenere un quadrilatero, e così via...
- ⇒ Data una regione R da delimitare nello spazio degli input, più sono i perceptron, più precisa sarà l'approssimazione che la rete produrrà.



- ⇒ *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.

36

⇒ **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

37

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

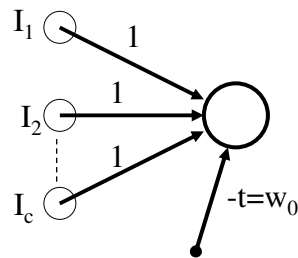
⇒ La precisione dell'approssimazione dipende poi dal numero di neuroni utilizzati negli strati intermedi

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

38

Esempio: riconoscitore di template

- ⇒ Obiettivo: costruire un riconoscitore di pattern binari $\mathbf{b} = b_1 \dots b_c$.
- ⇒ Utilizzo una rete semplicissima, con c input e un solo neurone: l'uscita sarà 1 se il pattern presentato corrisponde al pattern di riferimento \mathbf{b} , 0 altrimenti.



39

- ⇒ Come si costruisce questa rete neurale?
- ⇒ Il peso di ogni connessione w_i viene fissato a

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

- ⇒ Definiamo m come

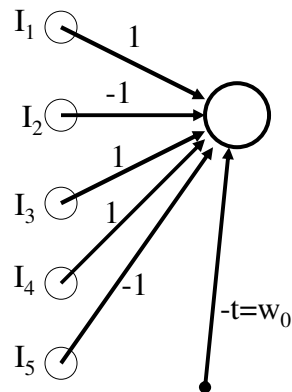
$$m = \sum_{i=1}^c b_i$$

- ⇒ Avremo che

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

39

⇒ Esempio: $\mathbf{b}=10110$, $m=3$; la rete diventa:



Proviamo a dare in input alla rete
 $\mathbf{I}=10110=\mathbf{b}$

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^c w_i I_i &= \\ &= 1 \cdot 1 + 0 \cdot -1 + 1 \cdot 1 + 1 \cdot 1 + 0 \cdot -1 = \\ &= 3 = m \end{aligned}$$

Proviamo ora a dare un input sbagliato
 $\mathbf{I}=11110$

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^c w_i I_i &= \\ &= 1 \cdot 1 + 1 \cdot -1 + 1 \cdot 1 + 1 \cdot 1 + 0 \cdot -1 = \\ &= 2 \leq m - 1 \end{aligned}$$

⇒ Scegliendo come soglia $m-1$, avremo che:

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

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

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

⇒ 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.

43

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.

44

⇒ 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

45

Il *training set*

⇒ Training set $T = \{(x_1, y_1) \dots (x_p, y_p)\}$:

- ⇒ 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 può 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.

46

Formalizzazione

- ⇒ Dato il training set $T = \{(x_1, y_1) \dots (x_p, y_p)\}$, 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.

47

- ⇒ 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

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

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

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

48

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

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

49

⇒ 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 diminuzione 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.

50

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.

51

⇒ 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

52

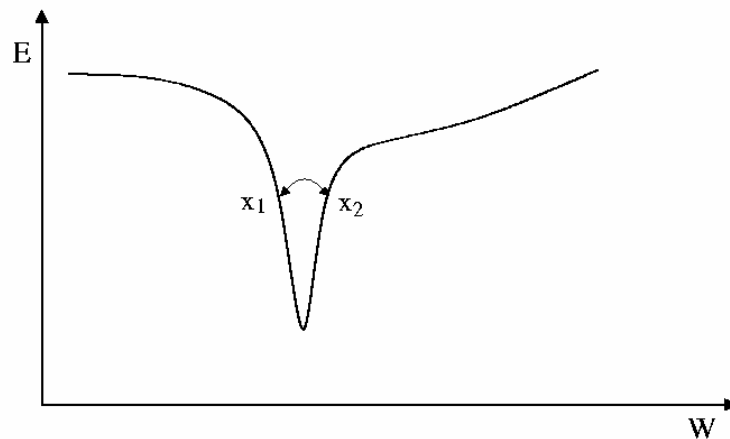
Svantaggi del metodo di discesa lungo il gradiente

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.

53

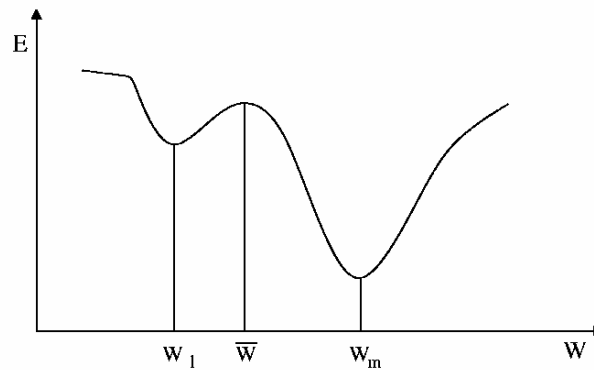


Per η troppo grande, l'algoritmo potrebbe non riuscire a scendere nella valle, oscillando tra i due punti x_1 e x_2 .

54

⇒ **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 \bar{W} , l'algoritmo riesce a raggiungere il minimo W_m della funzione di errore, altrimenti si ferma nel minimo locale W_l .

55

⇒ 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.

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

- ⇒ 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*.

56

⇒ **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.

57

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 $\mathcal{O}(W^2)$, 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 $\mathcal{O}(W)$

⇒ occorre valutare tutta la rete per avere $E(W)$, quindi occorre valutare W volte il rapporto incrementale

58

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.

59

Schema generale

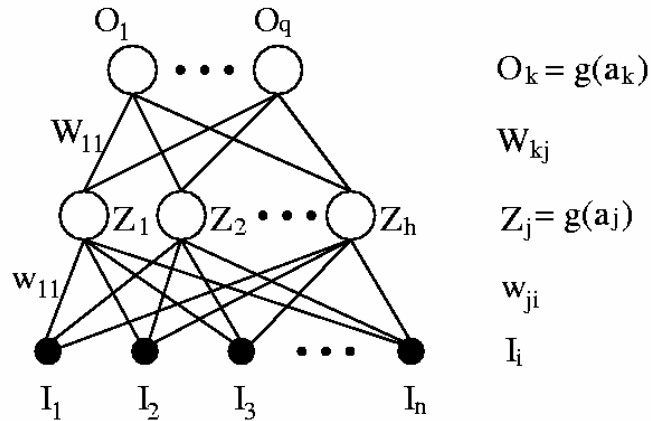
- ⇒ La *back propagation* prevede due fasi, una fase *in avanti* e una fase *indietro*:
- ⇒ *Fase in avanti (forward)*:
 - ⇒ presentare un esempio alla rete;
 - ⇒ determinare l'uscita e calcolare l'errore.
- ⇒ *Fase indietro (backward)*:
 - ⇒ l'errore viene propagato indietro nella rete, aggiustando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

60

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)



61

⇒ 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

$$Z_j = g(a_j)$$

62

⇒ 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

$$O_k = g(a_k)$$

63

L'algoritmo

⇒ (alla lavagna)

64

Riassumendo...

⇒ 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

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

65

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 complessità 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 complessità è $O(W)$

⇒ Il tutto viene ripetuto per ogni pattern.

66

Considerazioni

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

67

La generalizzazione

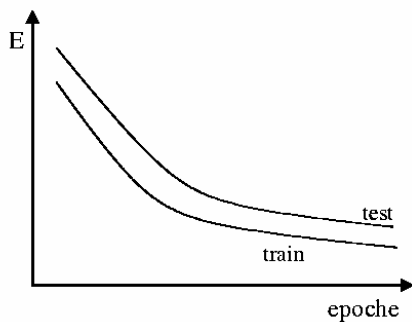
- ⇒ *Capacità di generalizzazione di una rete*
Abilità nel riconoscere e valutare correttamente esempi del problema in esame non presenti nell'insieme di apprendimento.
- ⇒ Questa capacità è determinata dalla topologia della rete (numero di livelli, neuroni per livello etc.) e dalla scelta dell'insieme di addestramento:
 - ⇒ più esso è rappresentativo del fenomeno in questione, maggiore sarà la capacità di generalizzazione.

68

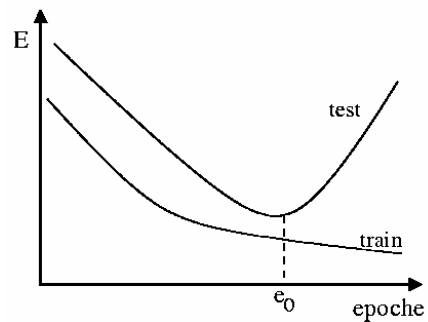
⇒ Misura della capacità di generalizzazione:

- ⇒ 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*

69



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

70

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.

71

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

72

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.

73

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

74

⇒ *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.

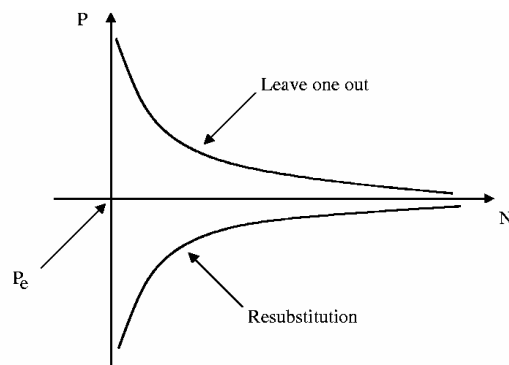
⇒ *Averaged Holdout*

- ⇒ 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.

75

⇒ *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.

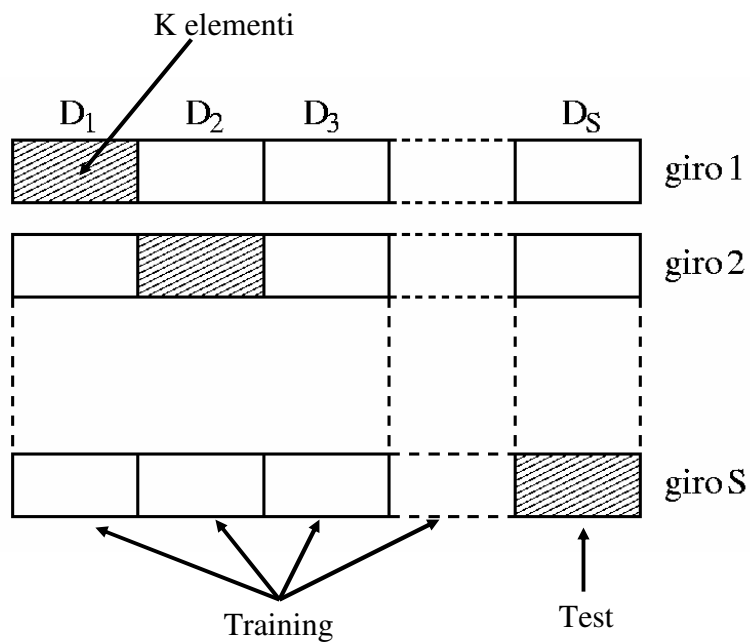


76

⇒ *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.

77



78

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.

79

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

80