CAFFÈ BELTRAMI

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PAVIA

Caffè Beltrami presenta…

Massimiliano Ghiotto

Massimiliano Ghiotto è dottorando del XXXIX ciclo presso il Dipartimento di Matematica dell'Università di Pavia. La sua ricerca si concentra nell'approssimazione di PDEs tramite operatori neurali, con particolare attenzione allo sviluppo di operatori neurali applicabili a problemi definiti su geometrie multipatch.

CAFFÈ BELTRAMI

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PAVIA

Operatori neurali

Deep Learning per matematici

Deep Learning

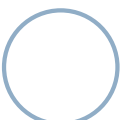
Applicazioni interessanti

Risultati teorici

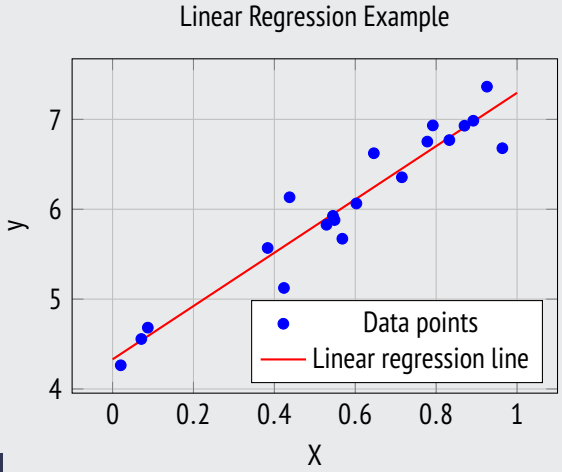
Operatori neurali

CAFFÈ BELTRAMI

Deep Learning

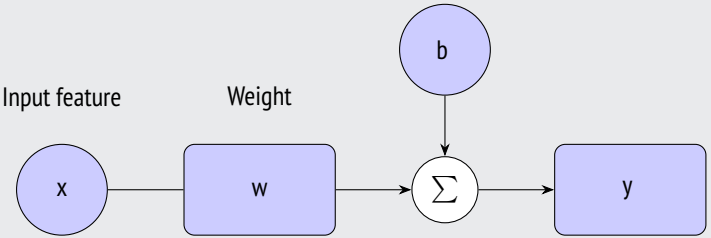


Regressione lineare



Dove $\{x_i\}_i \subset \mathbb{R}$ sono i dati di input e $\{y_i\}_i \subset \mathbb{R}$ sono i dati di output. Noi vogliamo trovare la retta $y = w \cdot x + b$ che meglio approssima i dati.

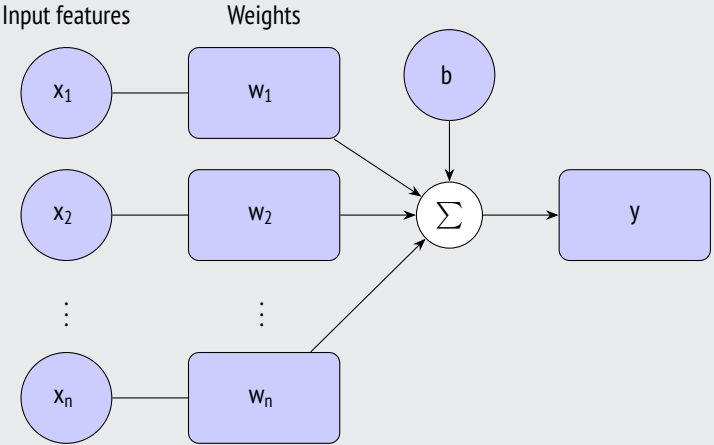
Regressione lineare



$$y = w \cdot x + b$$

- $x \in \mathbb{R}$ input,
- $w \in \mathbb{R}$ weight,
- $b \in \mathbb{R}$ bias.

Regressione lineare

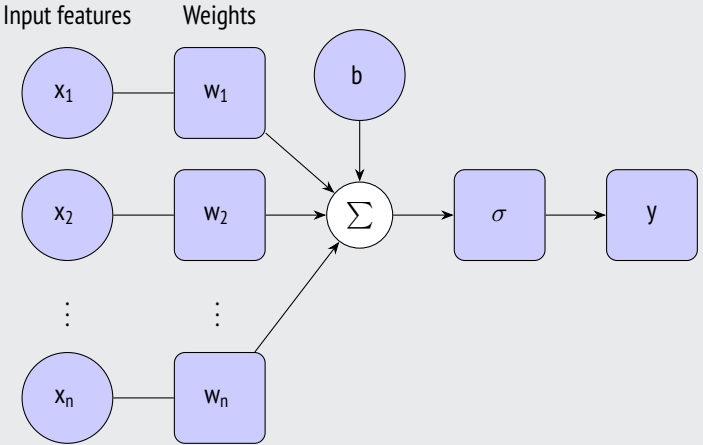


$$y = \mathbf{w} \cdot \mathbf{x} + b$$

- $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ inputs,
- $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^n$ weights,
- $b \in \mathbb{R}$ bias.

CAFFÈ BELTRAMI

Percettrone



Problema di classificazione.

$$y = \sigma\left(\mathbf{w} \cdot \mathbf{x} + b\right),$$

con $\sigma(z) = 1$ se $z \geq 0$ e nulla altrove.

CAFFÈ BELTRAMI

Percettrone

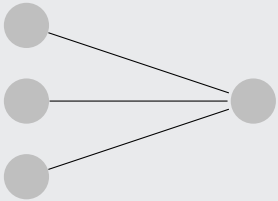
Chiamiamo $\hat{y}(\mathbf{x})$ la label corretta associata ad $\mathbf{x}$, l'algoritmo per trovare $\mathbf{w}$ e b é:

- calcolare $y(\mathbf{x}) = \sigma(\mathbf{w} \cdot \mathbf{x} + b)$,
- se $y(\mathbf{x}) = \hat{y}(\mathbf{x})$ no aggiornamento,
- se $y(\mathbf{x}) = 1$ e $\hat{y}(\mathbf{x}) = 0$ allora aggiorniamo $\mathbf{w} = \mathbf{w} + \eta\mathbf{x}$ e $b = b + \eta$.
- se $y(\mathbf{x}) = 0$ e $\hat{y}(\mathbf{x}) = 1$ allora aggiorniamo $\mathbf{w} = \mathbf{w} - \eta\mathbf{x}$ e $b = b - \eta$.

Percettrone

Chiamiamo $\hat{y}(\mathbf{x})$ la label corretta associata ad $\mathbf{x}$, l'algoritmo per trovare $\mathbf{w}$ e b é:

- calcolare $y(\mathbf{x}) = \sigma(\mathbf{w} \cdot \mathbf{x} + b)$,
- se $y(\mathbf{x}) = \hat{y}(\mathbf{x})$ no aggiornamento,
- se $y(\mathbf{x}) = 1$ e $\hat{y}(\mathbf{x}) = 0$ allora aggiorniamo $\mathbf{w} = \mathbf{w} + \eta\mathbf{x}$ e $b = b + \eta$.
- se $y(\mathbf{x}) = 0$ e $\hat{y}(\mathbf{x}) = 1$ allora aggiorniamo $\mathbf{w} = \mathbf{w} - \eta\mathbf{x}$ e $b = b - \eta$.



Ogni cerchio rappresenta un neurone, a cui è associato un bias. Ogni freccia rappresenta una connessione tra ue neuroni a cui è associato un peso.

CAFFÈ BELTRAMI

Percettrone

Notiamo che se $x_0, x_1 \in \{0, 1\}$ allora con il percettrone si puo' rappresentare le operazioni logiche di negazione, congiunzione e disgiunzione.

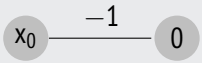


Figura: Negazione

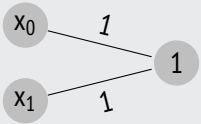


Figura: Congiunzione

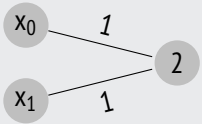


Figura: Disgiunzione

CAFFÈ BELTRAMI

Percettrone

Notiamo che se $x_0, x_1 \in \{0, 1\}$ allora con il percettrone si puo' rappresentare le operazioni logiche di negazione, congiunzione e disgiunzione.

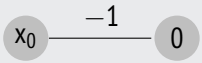


Figura: Negazione

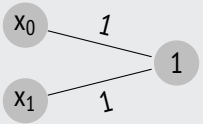


Figura: Congiunzione

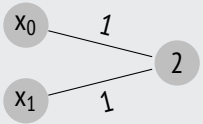


Figura: Disgiunzione

Ma non si puo' rappresentare la disgiunzione esclusiva (XOR).

Multi-layer Perceptron

Indicando lo XOR con $\times$ vale che

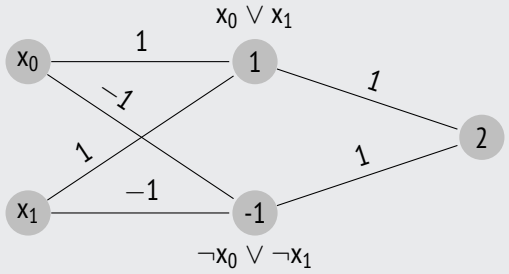
$$x_0 \times x_1 = (x_0 \vee x_1) \wedge \neg(x_0 \wedge x_1) = (x_0 \vee x_1) \wedge (\neg x_0 \vee \neg x_1).$$

Multi-layer Perceptron

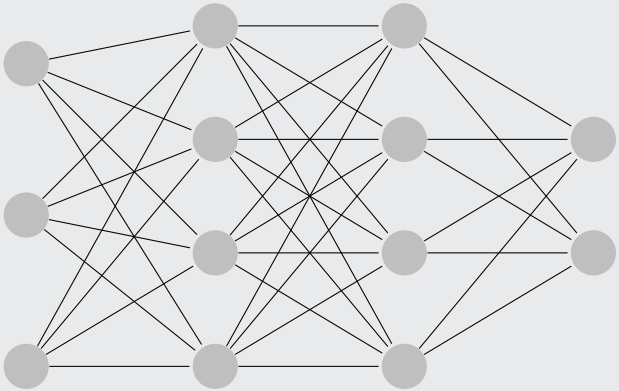
Indicando lo XOR con $\times$ vale che

$$x_0 \times x_1 = (x_0 \vee x_1) \wedge \neg(x_0 \wedge x_1) = (x_0 \vee x_1) \wedge (\neg x_0 \vee \neg x_1).$$

Dunque lo possiamo rappresentare con

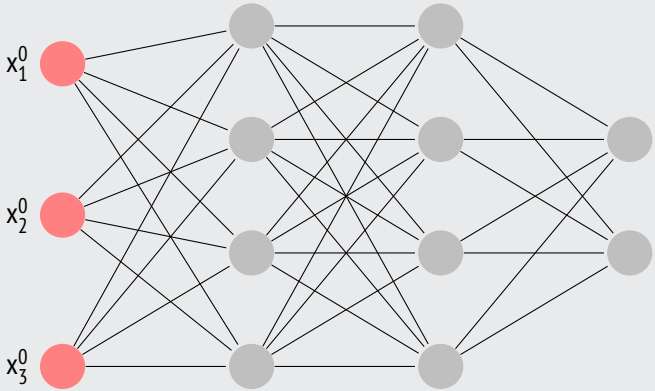


Multi-layer Perceptron



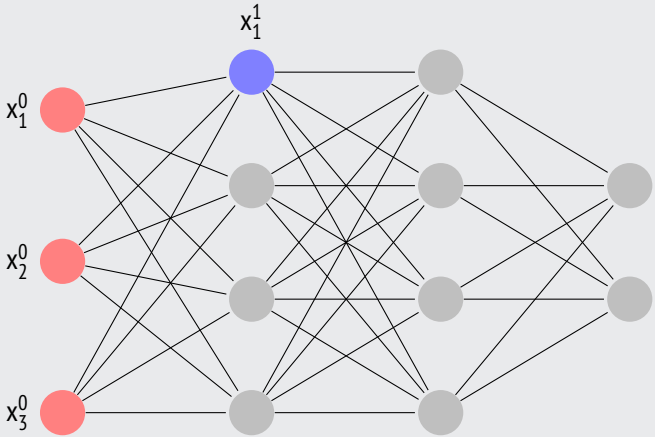
Esempio di architettura di un Multi-layer Perceptron con 3 neuroni di input, 4 neuroni nel primo hidden layer, 4 neuroni nel secondo hidden layer e 2 neuroni di output.

Multi-layer Perceptron



Layer di input con 3 neuroni.

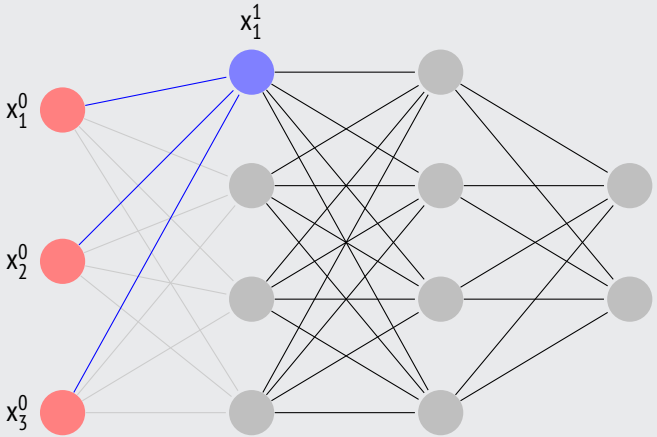
Multi-layer Perceptron



Vogliamo definire il valore del neurone x_1^1.

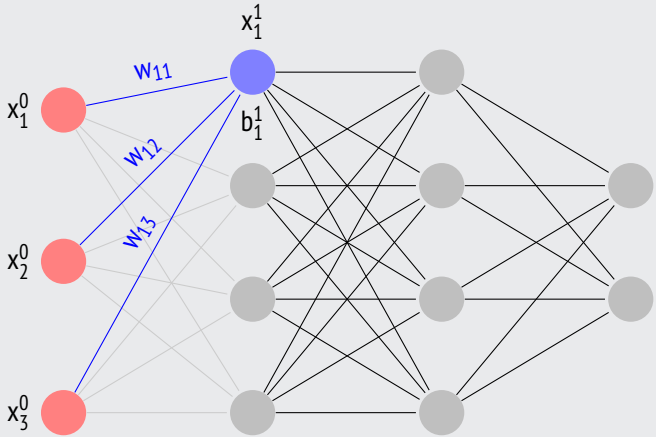
CAFFÈ BELTRAMI

Multi-layer Perceptron



Evidenziamo le connesioni con i neuroni nel layer precedente.

Multi-layer Perceptron

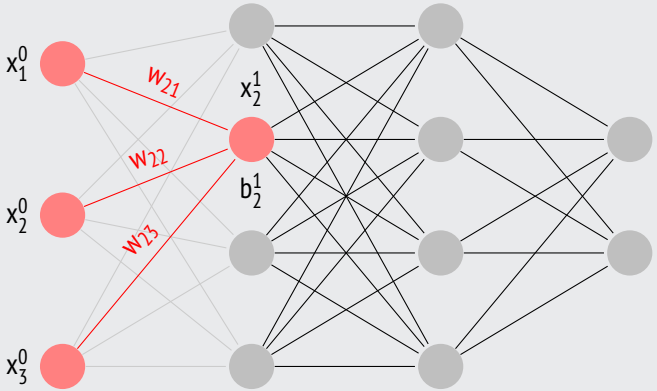


$$x_1^1 = \sigma\left(b_1^1 + \sum_{i=1}^{3} w_{1i} x_i^0\right)$$

Dove σ è una funzione di attivazione non lineare.

CAFFÈ BELTRAMI

Multi-layer Perceptron

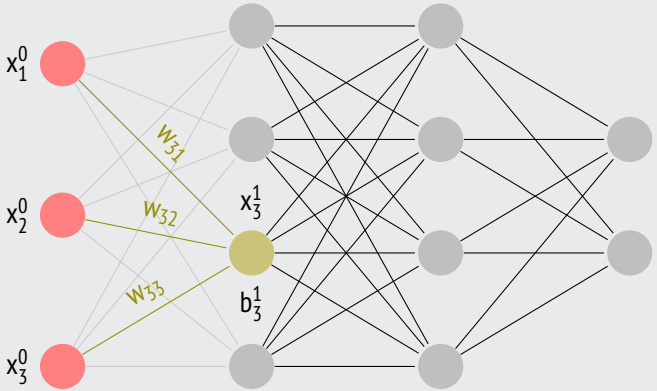


$$x_1^1 = \sigma\left(b_1^1 + \sum_{i=1}^{3} w_{1i} x_i^0\right)$$

$$x_2^1 = \sigma\left(b_2^1 + \sum_{i=1}^{4} w_{2i} x_i^0\right)$$

CAFFÈ BELTRAMI

Multi-layer Perceptron

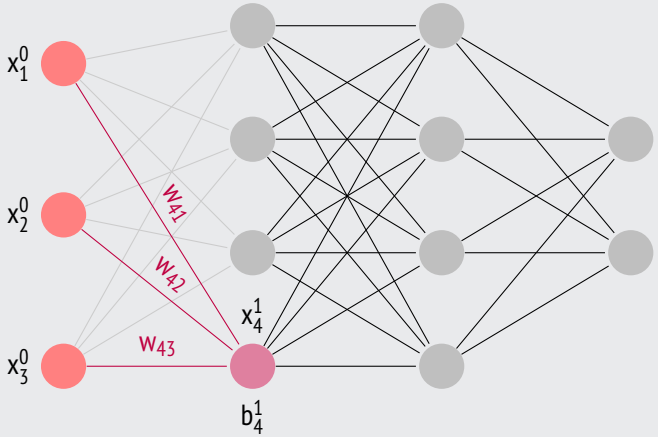


$$x_1^1 = \sigma\left(b_1^1 + \sum_{i=1}^{3} w_{1i} x_i^0\right)$$

$$x_2^1 = \sigma\left(b_2^1 + \sum_{i=1}^{4} w_{2i} x_i^0\right)$$

$$x_3^1 = \sigma\left(b_3^1 + \sum_{i=1}^{4} w_{3i} x_i^0\right)$$

Multi-layer Perceptron



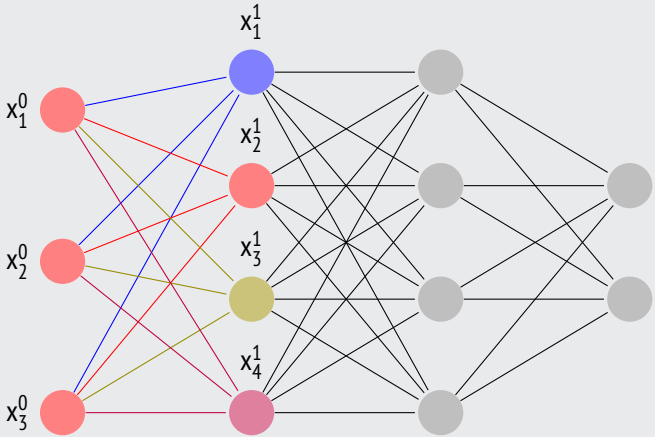
$$x_1^1 = \sigma\left(b_1^1 + \sum_{i=1}^{3} w_{1i}x_i^0\right)$$

$$x_2^1 = \sigma\left(b_2^1 + \sum_{i=1}^{4} w_{2i}x_i^0\right)$$

$$x_3^1 = \sigma\left(b_3^1 + \sum_{i=1}^{4} w_{3i}x_i^0\right)$$

$$x_4^1 = \sigma\left(b_4^1 + \sum_{i=1}^{2} w_{4i}x_i^0\right)$$

Multi-layer Perceptron

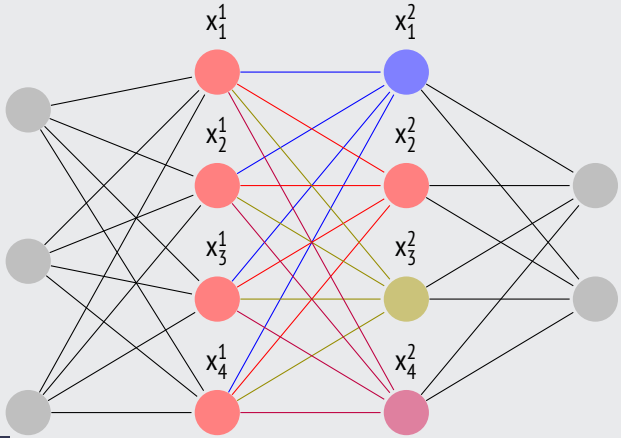


Dato $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^3$

$$\mathbf{x}^1 := \sigma\left(\mathbf{W}_1\mathbf{x}^0 + \mathbf{b}_1\right) \in \mathbb{R}^4$$

con $\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{4\times 3}$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^4$ e σ funzione di attivazione non lineare applicata componente per componente.

Multi-layer Perceptron



Dato $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^3$

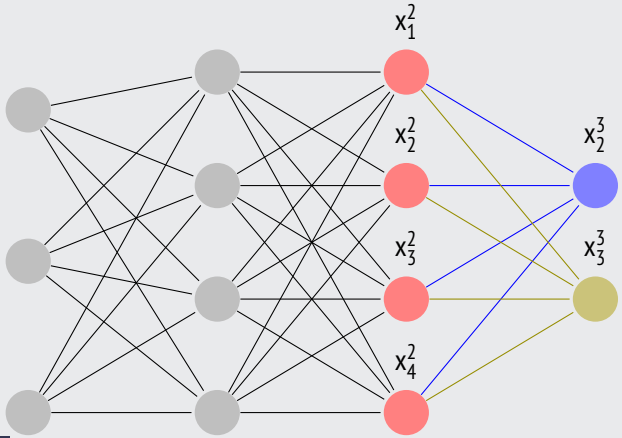
$$\mathbf{x}^1 := \sigma\left(\mathbf{W}_1\mathbf{x}^0 + \mathbf{b}_1\right) \in \mathbb{R}^4$$

$$\mathbf{x}^2 := \sigma\left(\mathbf{W}_2\mathbf{x}^1 + \mathbf{b}_2\right) \in \mathbb{R}^4$$

con $\mathbf{W}_2 \in \mathbb{R}^{4\times 4}$ e $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^4$.

CAFFÈ BELTRAMI

Multi-layer Perceptron



Dato $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^3$

$$\mathbf{x}^1 := \sigma\left(\mathbf{W}_1\mathbf{x}^0 + \mathbf{b}_1\right) \in \mathbb{R}^4$$

$$\mathbf{x}^2 := \sigma\left(\mathbf{W}_2\mathbf{x}^1 + \mathbf{b}_2\right) \in \mathbb{R}^4$$

$$\mathbf{x}^3 := \sigma\left(\mathbf{W}_3\mathbf{x}^2 + \mathbf{b}_3\right) \in \mathbb{R}^2$$

con $\mathbf{W}_3 \in \mathbb{R}^{2\times 4}$ e $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^2$.

Multi-layer Perceptron

Definizione

Un Multi-layer Perceptron (MLP) con input $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^{d_0}$, L hidden layers con $d_1, \ldots, d_L$ neuroni e output $\mathbf{x}^L \in \mathbb{R}^{d_L}$ è definito come

$$\mathbf{x}^1 := \sigma\left(\mathbf{W}_1\mathbf{x}^0 + \mathbf{b}_1\right) \in \mathbb{R}^{d_1}$$

$$\vdots$$

$$\mathbf{x}^L := \sigma\left(\mathbf{W}_L\mathbf{x}^{L-1} + \mathbf{b}_L\right) \in \mathbb{R}^{d_L}$$

dove $\mathbf{W}_\ell \in \mathbb{R}^{d_\ell \times d_{\ell-1}}$ e $\mathbf{b}_\ell \in \mathbb{R}^{d_\ell}$ per $\ell = 1, \ldots, L$ e σ è una funzione di attivazione non lineare applicata componente per componente.

Metodo del gradiente

Definito un MLP e scelta una funzione di costo $C(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ con $\mathbf{y}$ target, si vuole minimizzare C rispetto ai parametri $\mathbf{W}_\ell$ e $\mathbf{b}_\ell$.

Definizione

Il metodo del gradiente è un metodo iterativo per minimizzare una funzione $\mathrm{MLP}(\mathbf{p})$ definita su uno spazio $\mathbb{R}^d$. Dato un punto iniziale $\mathbf{p}^{(0)}$, la sequenza $\mathbf{p}^{(t)}$ è definita come

$$\mathbf{p}^{(t+1)} = \mathbf{p}^{(t)} - \eta \nabla f(\mathbf{p}^{(t)})$$

dove η è il learning rate.

Metodo del gradiente

Definito un MLP e scelta una funzione di costo $C(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ con $\mathbf{y}$ target, si vuole minimizzare C rispetto ai parametri $\mathbf{W}_\ell$ e $\mathbf{b}_\ell$.

Definizione

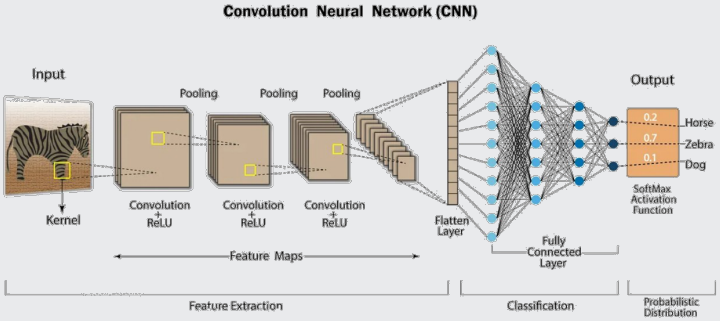
Il metodo del gradiente è un metodo iterativo per minimizzare una funzione $\mathrm{MLP}(\mathbf{p})$ definita su uno spazio $\mathbb{R}^d$. Dato un punto iniziale $\mathbf{p}^{(0)}$, la sequenza $\mathbf{p}^{(t)}$ è definita come

$$\mathbf{p}^{(t+1)} = \mathbf{p}^{(t)} - \eta \nabla f(\mathbf{p}^{(t)})$$

dove η è il learning rate.

CAFFÈ BELTRAMI

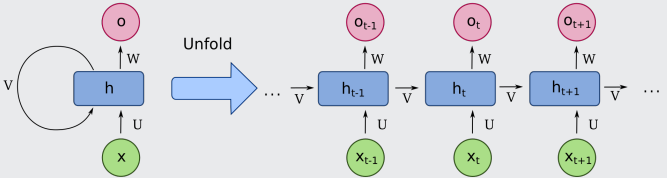
Convolutional Neural Network (CNN)



Reti neurali convoluzionali per l'applicazione alle immagini.

CAFFÈ BELTRAMI

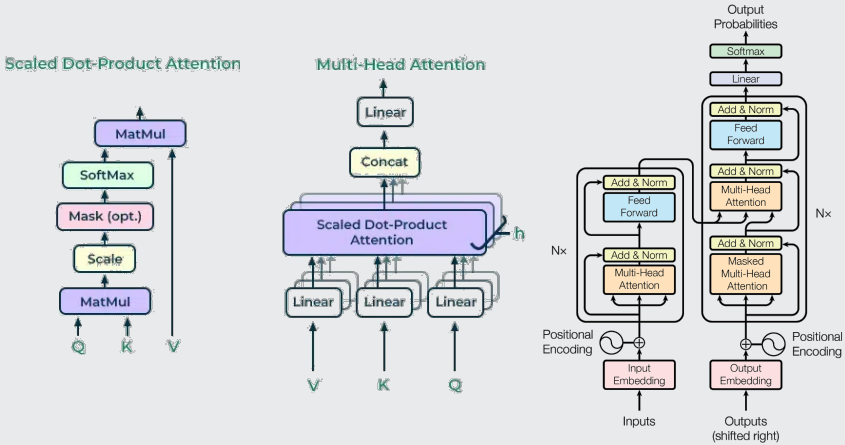
Recurrent Neural Network (RNN)



Reti neurali ricorrenti per l'applicazione al linguaggio naturale ed ai segnali, o piú in generale alle quantitá dipendenti dal tempo.

CAFFÈ BELTRAMI

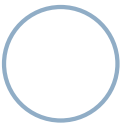
Transformer



From "Attention is All You Need", Vaswani et al. (2017)

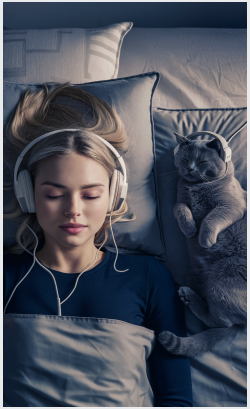
CAFFÈ BELTRAMI

Applicazioni interessanti



Applicazioni alle immagini

Siti per generazione d'immagini: DALL-E3 DALL·E, Midjourney e Ideogram.

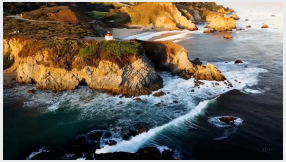


CAFFÈ BELTRAMI

Applicazioni ai video

Deep learning per la generazione di video SORA OpenAI SORA o per modificare video anche in tempo reale NVIDIA Broadcast.



Applicazioni al linguaggio

- Modelli per la generazione di testo come GPT-4 GPT-4 o Copilot.
- Esistono modelli open-source come LLaMA-3 scaricabile graatuitamente dal loro sito.
- Potete trovare modelli pre-addestrati e datasets su Hugging Face oppure su kaggle.

Applicazioni al linguaggio

- Modelli per la generazione di testo come GPT-4 GPT-4 o Copilot.
- Esistono modelli open-source come LLaMA-3 scaricabile graatuitamente dal loro sito.
- Potete trovare modelli pre-addestrati e datasets su Hugging Face oppure su kaggle.

Per allenare Chat-GPT3, formata da 175 miliardi di parametri, hanno impiegato 1023 Nvidia A100 per 34 giorni spendendo 5 milioni di dollari in corrente.

Applicazioni al linguaggio

- Modelli per la generazione di testo come GPT-4 GPT-4 o Copilot.
- Esistono modelli open-source come LLaMA-3 scaricabile graatuitamente dal loro sito.
- Potete trovare modelli pre-addestrati e datasets su Hugging Face oppure su kaggle.

Per allenare Chat-GPT3, formata da 175 miliardi di parametri, hanno impiegato 1023 Nvidia A100 per 34 giorni spendendo 5 milioni di dollari in corrente.

Anche per scaricare il modello più piccolo di LLaMA 3 8B sono necessari 20 GB di VRAM e per il modello LLaMA 3 70B sono necessari 140GB di spazio e 160GB di VRAM in FP16.

Risultati teorici

Approsimazione universale per funzioni

Definizione

Sia $K \subset \mathbb{R}^d$ compatto e con $d \in \mathbb{N}$. Una funzione continua $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ si dice discriminante se

$$\int_K f(\mathbf{a} \cdot \mathbf{x} + b)\, d\mu(x) = 0 \quad \forall \mathbf{a} \in \mathbb{R}^d,\ \forall b \in \mathbb{R} \quad \Rightarrow \quad \mu \equiv 0.$$

Approsimazione universale per funzioni

Definizione

Sia $K \subset \mathbb{R}^d$ compatto e con $d \in \mathbb{N}$. Una funzione continua $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ si dice discriminante se

$$\int_K f(\mathbf{a} \cdot \mathbf{x} + b)\, d\mu(x) = 0 \quad \forall \mathbf{a} \in \mathbb{R}^d,\ \forall b \in \mathbb{R} \quad \Rightarrow \quad \mu \equiv 0.$$

Definizione

Una funzione continua $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ si dice sigmoidale se $\lim_{x \to -\infty} f(x) = 0$ e $\lim_{x \to +\infty} f(x) = 1$.

Approsimazione universale per funzioni

Definizione

Sia $K \subset \mathbb{R}^d$ compatto e con $d \in \mathbb{N}$. Una funzione continua $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ si dice discriminante se

$$\int_K f(\mathbf{a} \cdot \mathbf{x} + b)\, d\mu(x) = 0 \quad \forall \mathbf{a} \in \mathbb{R}^d,\ \forall b \in \mathbb{R} \quad \Rightarrow \quad \mu \equiv 0.$$

Definizione

Una funzione continua $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ si dice sigmoidale se $\lim_{x \to -\infty} f(x) = 0$ e $\lim_{x \to +\infty} f(x) = 1$.

Tutte le funzioni sigmoidali sono discriminanti.

Approsimazione universale per funzioni

Teorema

Sia $K \subset \mathbb{R}^d$ compatto e con $d \in \mathbb{N}$ e $\sigma : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ funzione discriminante allora $\mathrm{MLP}(\sigma, d, 2)$ é denso in $C(K)$.

Ovvero per ogni $f \in C(K)$ e $\varepsilon > 0$ esiste una rete neurale $f_\theta \in \mathrm{MLP}(\sigma, d, 2)$ tale che $\|f - f_\theta\|_\infty < \varepsilon$.

Approsimazione universale per operatori

Teorema

Sia σ non polinomiale, X spazio di Banach, $K_1 \subset X$, $K_2 \subset \mathbb{R}^d$ compatti e V compatto in $C(K_1)$. Sia $G : V \to C(K_2)$ un operatore continuo non lineare, allora per ogni $\varepsilon > 0$ esistono $n, p, m \in \mathbb{N}$, $c_i^k, \theta_i^k, \xi_{ij}^k, \zeta^k \in \mathbb{R}$, $w^k \in \mathbb{R}^d$ e $x_j \in K_1$ tali che

$$\left| G(u)(y) - \sum_{k=1}^{p} \sum_{i=1}^{n} c_i^k \sigma \left(\sum_{j=1}^{m} \xi_{ij}^k u(x_j) + \theta_i^k \right) \sigma(w^k \cdot y + \zeta^k) \right| < \varepsilon$$

vale per ogni $u \in V$ e $y \in K_2$.

Approssimazione universale per operatori

Abbiamo $n, p, m \in \mathbb{N}$, $c_i^k, \theta_i^k, \xi_{ij}^k, \zeta^k \in \mathbb{R}$, $w^k \in \mathbb{R}^d$, $x_j \in K_1$, $y \in K_2 \subset \mathbb{R}^d$ e $u \in V$ tali che

$$\underbrace{\sum_{k=1}^{p}}_{\text{scalar product}} \underbrace{\sum_{i=1}^{n} c_i^k \sigma \left(\sum_{j=1}^{m} \xi_{ij}^k u(x_j) + \theta_i^k \right)}_{\text{branch net}} \underbrace{\sigma(w^k \cdot y + \zeta^k)}_{\text{trunk net}} . \tag{1}$$

CAFFÈ BELTRAMI

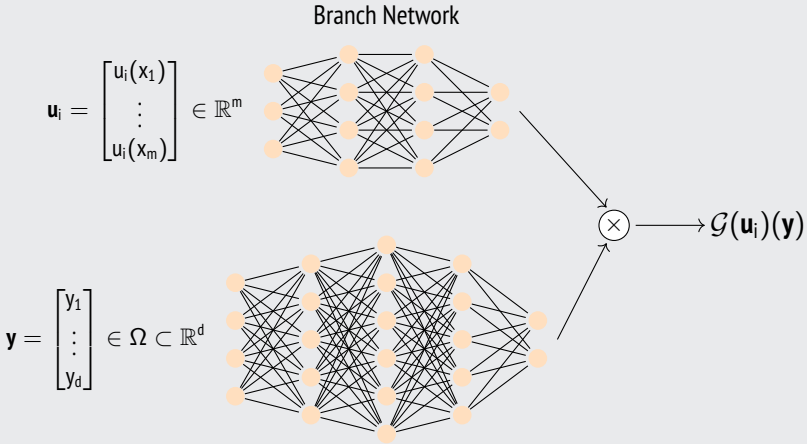
Approssimazione universale per operatori

Abbiamo $n, p, m \in \mathbb{N}$, $c_i^k, \theta_i^k, \xi_{ij}^k, \zeta^k \in \mathbb{R}$, $w^k \in \mathbb{R}^d$, $x_j \in K_1$, $y \in K_2 \subset \mathbb{R}^d$ e $u \in V$ tali che

$$\underbrace{\sum_{k=1}^{p}}_{\text{scalar product}} \underbrace{\sum_{i=1}^{n} c_i^k \sigma \left(\sum_{j=1}^{m} \xi_{ij}^k u(x_j) + \theta_i^k \right)}_{\text{branch net}} \underbrace{\sigma(w^k \cdot y + \zeta^k)}_{\text{trunk net}}. \tag{1}$$

Dove notiamo che la branch net é una rete neurale con 2 layers ed m neuroni in input e p neuroni di output e la trunk net é una rete neurale con 1 layer con d layer di input e p.

Deep Operator Network



Operatori neurali

Problema di Darcy

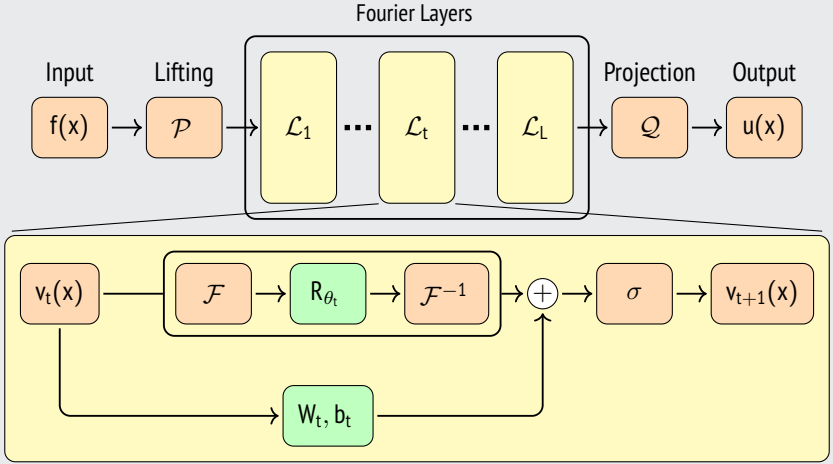
Consideriamo il problema di Darcy in due dimensioni, sottoposto a condizioni al bordo di Dirichlet omogene. L'equazione di flusso di Darcy, é un'equazione ellittica del secondo ordine, definita da

$$\begin{cases} -\nabla(a \cdot \nabla u) = f, & \text{in } D \\ u = 0, & \text{su } \partial D \end{cases} \tag{2}$$

dove $D = (0,1)^2$. Per questo problema $\mathcal{A} = L^\infty(D, \mathbb{R}^+), \mathcal{U} = H_0^1(D, \mathbb{R})$. Fissiamo come r.h.s $f \equiv 1$ e considerando la formulazione debole del problema si ha che la soluzione operatore é

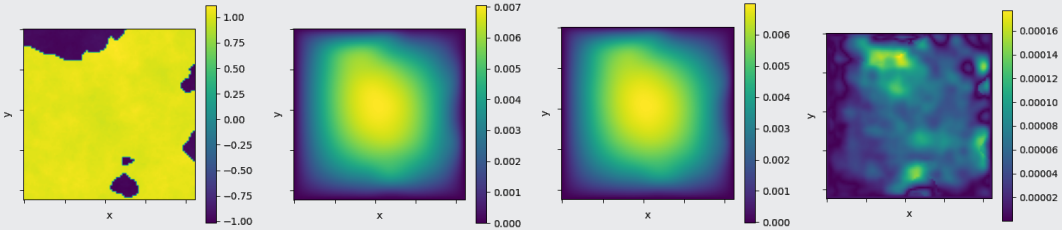
$$\mathcal{G} : L^\infty(D, \mathbb{R}^+) \to H_0^1(D, \mathbb{R}), \qquad \mathcal{G} : a \mapsto u.$$

Fourier Neural Operator



Darcy problem

Volgiamo approssimare l'operatore soluzione $\mathcal{G} : a \mapsto u$ associato al problema di Darcy.



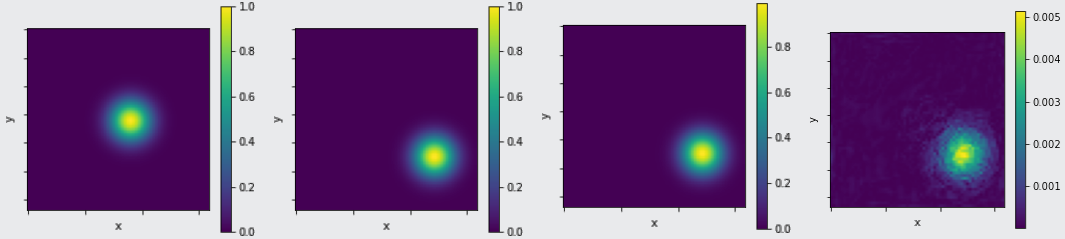
La FNO ha 2, 3M parametri, tempo di training di 2 ore, errore di test relativo in norma L^2 pari a 0.008.

CAFFÈ BELTRAMI

Transport continuous equation

$$u_t + v \cdot \nabla u = 0 \quad \text{in } \Omega \times (0, T), \qquad u_0(x, y) = f(x, y),$$

con f funzione regolare. Si fissa $v = (0.2,\ 0.2)$ e si approssima l'operatore $\mathcal{G} : f \mapsto u_{T=1}$.



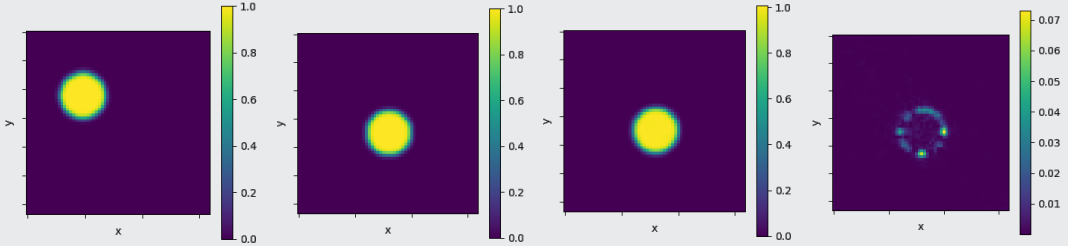
La FNO ha 21M parametri, tempo di training di 50 minuti, errore di test relativo in norma L^2 pari a 0.007.

CAFFÈ BELTRAMI

Transport discontinuous equation

$$u_t + v \cdot \nabla u = 0 \quad \text{in } \Omega \times (0, T), \qquad u_0(x, y) = f(x, y),$$

con f funzione discontinua. Si fissa $v = (0.2,\ 0.2)$ e si approssima l'operatore $\mathcal{G} : f \mapsto u_{T=1}$.

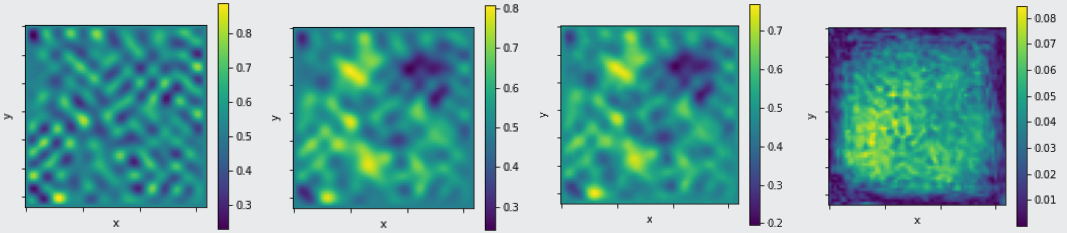


La FNO ha 16M parametri, tempo di training di 21 ore, errore di test relativo in norma L^2 pari a 0.013.

Poisson Equation

$$-\Delta u = f, \quad \text{in } \Omega = [0,1]^2, \qquad u_{|\partial\Omega} = 0.$$

Si approssima l'operatore $\mathcal{G} : f \mapsto u$.

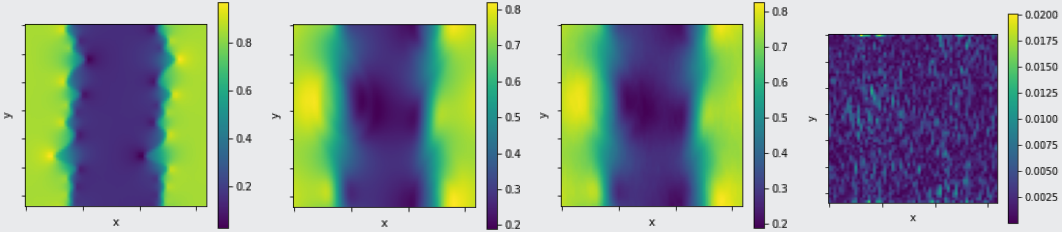


La FNO ha 1M parametri, tempo di training di 20 minuti, errore di test relativo in norma L^2 pari a 0.04.

Navier-Stokes Equation

$$u_t + (u \cdot \nabla)u + \nabla p = \nu \Delta u, \qquad \operatorname{div} u = 0, \qquad u_0(x, y) = f(x, y).$$

Dove $\nu = 4 \cdot 10^{-4}$ e si approssima l'operatore soluzione $\mathcal{G} : f \mapsto u_{T=1}$.

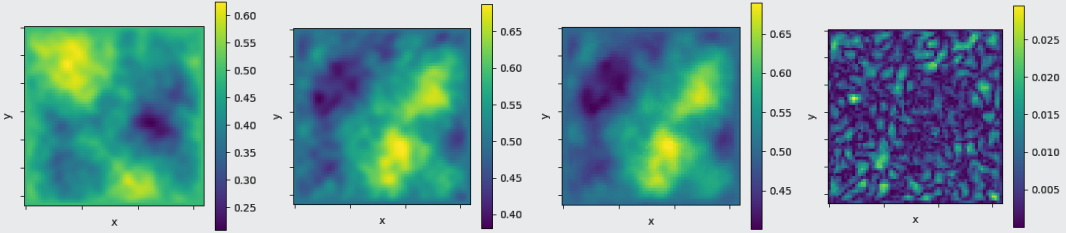


La FNO ha 32, 8M parametri, tempo di training di 30 minuti, errore di test relativo in norma L^2 pari a 0.05.

Wave Equation

$$u_{tt} - c^2 \Delta u = 0, \quad \text{in } \Omega \times (0, T), \qquad u_0(x, y) = f(x, y).$$

Dove $c = 0.1$ e si approssima l'operatore soluzione $\mathcal{G} : f \mapsto u_{T=5}$.

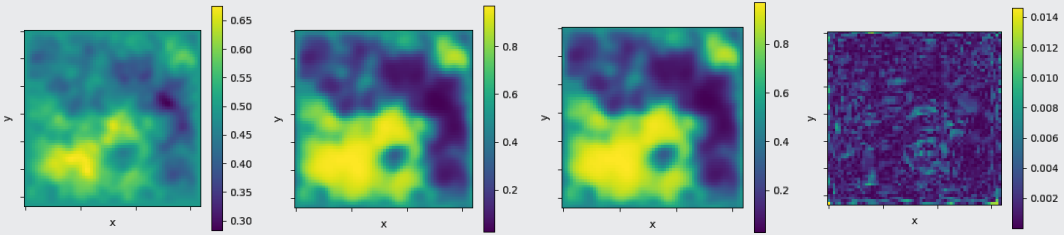


La FNO ha 4, 9M parametri, tempo di training di 7 ore, errore di test relativo in norma L^2 pari a 0.014.

Allen-Cahn equation

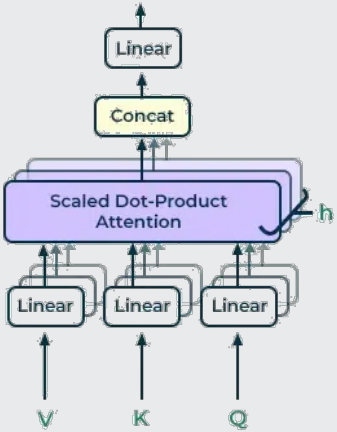
$$u_t = \Delta u - \varepsilon^2 u(u^2 - 1).$$

Dove $\varepsilon = 220$ e si approssima l'operatore soluzione $\mathcal{G} : f \mapsto u_T$ con $T = 0.0002$.



La FNO ha 4, 9M parametri, tempo di training di 2 ore, errore di test relativo in norma L^2 pari a 0.004.

Grazie per



CAFFÈ BELTRAMI