


Conclusioni



Nel corso della tesi sono stati presentati dei nuovi modelli di Reti Neurali Ricorsive per l'apprendimento supervisionato di trasduzioni strutturali su grafi. I modelli proposti estendono le GraphESN attraverso un approccio costruttivo, innovativo nell'ambito del Reservoir Computing, che consente di costruire la rete progressivamente. Ereditando dalle GraphESN la capacità di apprendere trasduzioni strutturali generiche attraverso algoritmi di apprendimento efficienti, i modelli presentati sfruttano la strategia costruttiva per offrire soluzioni originali ad alcuni dei problemi aperti nell'ambito del Reservoir Computing.

L'approccio costruttivo consente infatti ai modelli proposti di determinare in maniera automatica (i.e. guidata dal task affrontato) il numero di unità che compongono la rete nel suo complesso e la sua topologia. Questa caratteristica permette dunque di non dover fissare a priori la dimensione e la struttura della rete, in contrapposizione con quanto avviene per i modelli di Reservoir Computing esistenti, che fanno affidamento su reservoir prefissati. Tale vantaggio acquista rilievo se si considera che la dimensione del reservoir risulta

essere un fattore estremamente importante per caratterizzare la complessità della rete. Intuitivamente  possiamo quindi dire che ogni iterazione nella costruzione di uno dei modelli proposti corrisponde all'istanziamento di una singola rete con reservoir prefissato. La determinazione automatica del numero di unità ha quindi anche l'effetto di ridurre il costo computazionale necessario alla selezione del modello.

L'adozione di una strategia costruttiva ha inoltre permesso la realizzazione di un meccanismo stabile di output-feedback, usato per modificare le dinamiche dei reservoir. Nel corso del procedimento incrementale di costruzione della rete, infatti, i modelli costruttivi possono avvalersi delle informazioni già apprese in precedenza. Attraverso uno schema di connessioni fra le sotto-reti è dunque stato possibile introdurre all'interno dei reservoir informazioni supervisionate, frutto di un processo di apprendimento. Anche in presenza di reservoir prefissati e non soggetti ad alcun tipo di adattamento, i modelli proposti risultano quindi in grado di sfruttare, durante il procedimento di encoding, delle informazioni direttamente dipendenti dal task affrontato. Lo schema di output-feedback realizzato, individua dunque una possibile strategia per affrontare uno dei problemi aperti caratteristici del Reservoir Computing: la presenza di reservoir fissati a priori e non adattivi, con dinamiche interne unicamente guidate dalla natura degli input e non legate anche al problema affrontato.

I modelli realizzati si caratterizzano inoltre per una notevole flessibilità ed efficienza dal punto di vista computazionale. L'opportunità di suddividere un task in sotto-problemi consente infatti di ampliare la gamma di strategie utilizzabili nell'allenamento e permette di ricorrere a strumenti caratteristici

dell'approccio costruttivo, come l'impiego di un pool. Oltre a questo, la decomposizione del problema offre la possibilità di impiegare sotto-reti di dimensioni contenute, specializzate a risolvere solo un sotto-task specifico, determinando così un notevole vantaggio computazionale nella realizzazione dell'allenamento della rete nel suo complesso. Anche guardando al solo ambito del Reservoir Computing, di per sé caratterizzato da oneri computazionali estremamente ridotti, i modelli realizzati permettono quindi di guadagnare in efficienza senza comportare perdite in accuratezza di predizione.

L'efficacia dei modelli realizzati è stata testata su problemi reali appartenenti all'ambito della Chemioinformatica. Gli esperimenti svolti hanno mostrato come i modelli proposti, nonostante richiedano un impiego inferiore di risorse computazionali, siano in grado in molti casi di migliorare le performance raggiunte attraverso l'utilizzo di modelli non costruttivi. Il ruolo degli output-feedback è stato indagato attraverso un approccio sia quantitativo che qualitativo, mettendo in luce come l'introduzione di informazione supervisionata all'interno dei reservoir sia effettivamente in grado di influenzarne le dinamiche in maniera consistente con il task affrontato, in netta contrapposizione con quanto avviene in assenza di output-feedback.

L'analisi sperimentale ha anche fatto emergere alcuni aspetti critici nei modelli proposti. L'impiego di output-feedback verso i reservoir non risulta infatti in maniera sistematica in un aumento della capacità di generalizzazione dei modelli, suggerendo quindi l'adozione di meccanismi di regolarizzazione forti, tesi ad evitare situazioni di overfitting. Benché le dimensioni della rete siano determinate in maniera automatica, inoltre, il numero di unità che compongono i reservoir delle sotto-reti risulta essere un parametro determinante per

le capacità dei modelli.



L'aver indirizzato un approccio innovativo nel campo del Reservoir Computing fornisce anche spunti per ulteriori sperimentazioni. La strategia costruttiva proposta è infatti estremamente flessibile ed è ragionevole ipotizzare che altre varianti topologiche, oltre a quelle proposte, possano essere oggetto di investigazione. I modelli sperimentati sfruttano infatti uno schema di connessioni fra le sotto-reti molto semplice, che può facilmente essere modificato in modo da implementare, ad esempio, politiche di propagazione degli output-feedback che tengano conto della topologia (e.g. collegando una sotto-rete solo alle sotto-reti più prossime) o delle performance (e.g. assegnando alle connessioni pesi differenti in base alle performance ottenute dalle singole sotto-reti). Altrettanto importante e variegata è anche la gamma degli algoritmi di learning o dei sotto-task utilizzabili per l'allenamento delle sotto-reti, anch'essa possibile oggetto di ulteriori indagini così come l'impiego di sotto-reti eterogenee (e.g. nella dimensione del reservoir) selezionate tramite un pool.

È infine opportuno sottolineare che parte dei contenuti discussi nel corso della tesi hanno permesso la realizzazione dell'articolo scientifico *Constructive Reservoir Computation with Output Feedbacks for Structured Domains*, che verrà discusso nel corso del XX European Symposium on Artificial Neural Networks, Computational Intelligence and Machine Learning.

