Advanced Machine Learning

Giuseppe Magazzù

2021 - 2022

Contents

Chapter 1

Introduction

1.1 Non Linearity

Per estendere i modelli lineari a funzioni non lineari possiamo applicare una trasformazione non lineare $\phi(x)$ all'input.

La funzione $\phi(x)$ definisce una nuova rappresentazione di x.

La funzione $\phi(x)$ può essere generica come nelle *kernel machines* oppure può essere imparata aggiornando i parametri θ.

$$f(x;\theta;\omega) = \phi(x;\theta)^T\omega \,,$$

dove θ sono i parametri e ω i pesi del modello.

Una rete con 1 hidden layer può imparare una qualsiasi funzione $f(x)$ non lineare. La difficoltà consiste nel trovare i pesi per determinare $f(x)$.

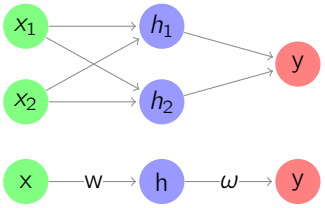
XOR Example

XOR function: $y = f^*(x)$

$X = \{[0,0]^T, [0,1]^T, [1,0]^T, [1,1]^T\}$

$y = f(x;\theta) \Rightarrow f^*(x)$

Supponiamo di scegliere un mapping lineare $f(x;\theta) = f(x;\omega,b) = x^T\omega + b$



$h = f^{(1)}(x;w,c)$

$y = f^{(2)}(h;\omega,c)$

$f(x;w,c,\omega,b) = f^{(2)}(f^{(1)}(x))$

$f(x;w,c,\omega,b) = max\{0, xw + c\}\ \omega + b$

Supponiamo di inizializzare i parametri nel seguente modo:

$$w = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \quad c = \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \end{bmatrix} \quad \omega = \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \end{bmatrix} \quad b = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$max(0, xw + c)\ \omega = [0,1,1,0]^T$

Multi-Layer Neural Networks:

- Feed Forward Neural Network (FFNN)
  non hanno connessioni che formano loop
- Recurrent Neural Network (RNN)
  hanno loop, utili per informazioni sequenziali
- Convolutional Neural Network (CNN)
  catturano informazioni spaziali attraversi molteplici filtri

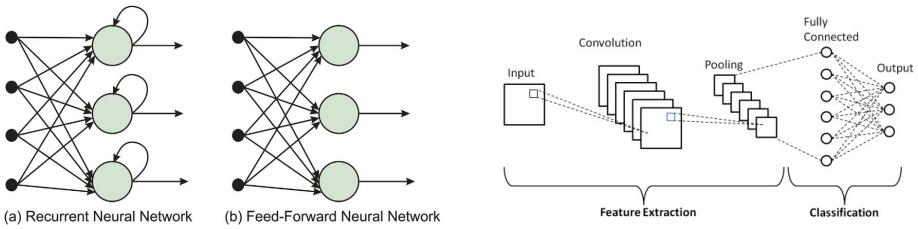


Figure 1.1: Differenza tra RNN, FFNN [1] e CNN [5]

1.2 Feed Forward Neural Network

Una FFNN è una rete fully connected, ovvero che ogni neurone in un layer e collegato a tutti gli altri del layer successivo. Una FFNN può essere pensata come una concatenazione di funzioni applicate all'input x, $f(x) = f^{(3)}(f^{(2)}(f^{(1)}(x)))$.

La lunghezza della catena corrisponde alla **depth** del modello. La dimensionalità degli hidden layer determina la **width** del modello.

Il training del modello consiste nel trovare una funzione $f(x)$ che si avvicini il più possibile a una funzione target $f^*(x)$. $f(x) \rightarrow f^*(x)$.

Chapter 2

Backpropagation

Chapter 3

Gradient Based Optimization

L'ottimizzazione è il processo di minimizzare o massimizzare una funzione $f(x)$ alterando il valore di x. La funzione che vogliamo ottimizzare si chiama funzione obiettivo. La soluzione ottima viene denotata $x^* = \arg\ \text{opt}\ f(x)$, $opt = \{min, max\}$.

Possiamo trovare i punti di massimo e minimo analiticamente ponendo il gradiente della funzione pari a zero $\nabla_x f(x^*) = 0$.

Nel caso di modelli lineari possiamo usare l'ottimizzazione convessa, mentre per quelli non lineari è necessario usare una procedura iterativa di ottimizzazione numerica che trovano solo una approssimazione.

3.1 Gradient Descent

Il gradient descent (discesa del gradiente) è un algoritmo di ottimizzazione iterativo per trovare il minimo di una funzione differenziabile $f(x)$.

Ad ogni iterazione ci si muove da un punto iniziale x_i nella direzione opposta a quella di massima crescita della funzione, ovvero $-\nabla_x f(x_i)$.

$$x_{i+1} = x_i - \eta \nabla_x f(x_i)$$

Il parametro η controlla l'intensità dello spostamento (Figura 3.1). Per valori molto piccoli la convergenza sarà lenta, mentre per valori troppo grandi si rischia di arrivare in un ottimo locale sub ottimale.

L'algoritmo si ferma in base a un criterio specificato ad esempio quando lo spostamento diventa molto piccolo o dopo un numero predefinito di iterazioni.

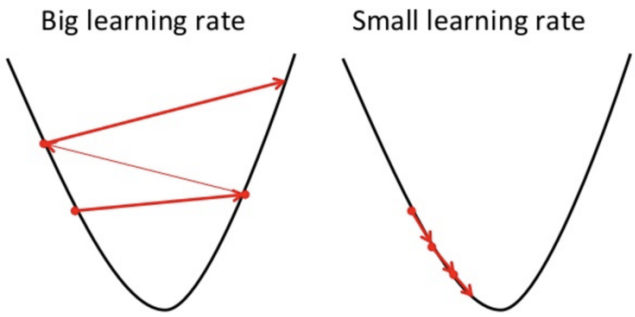


Figure 3.1: Comportamento del gradient descent con valori alti e bassi di η [4].

3.2 Training as Optimization

L'obiettivo di un algoritmo di training è quello di ritornare una funzione $f(x)$ che mappa con una certa accuratezza gli input x alle etichette corrispondenti y.

Per valutare l'accuratezza della funzione $f(x)$ introduciamo il concetto di loss function.

La funzione di loss $L(y, \hat{y})$ assegna uno score numerico (scalare) all'output predetto $\hat{y}$ dato il valore di verità atteso y.

I parametri della funzione $f(x; \theta)$ sono scelti in modo da minimizzare la loss L sugli esempi di training.

Dato un training set etichettato $(x_{1:n}, y_{1:n})$, una funzione di loss L e una funzione parametrica $f(x; \theta)$, denotiamo la **cost function** come segue:

$$J(\theta) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} L(x_i, y_i; \theta)$$

L'obiettivo dell'algoritmo di training è quindi impostare i parametri θ in modo che il valore di $J(\theta)$ sia minimizzato.

$$\hat{\theta} = \underset{\theta}{\operatorname{argmin}} J(\theta)$$

3.3 Stochastic, Batch, Mini-Batch

La cost function viene spesso decomposta come somma delle loss calcolate sui singoli esempi.

$$J(\theta) = \mathbb{E}_{x,y\sim\hat{p}_{data}} L(x, y; \theta) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} L(x_i, y_i; \theta)$$

Il gradiente della loss $J(\theta)$ può essere calcolato come media dei gradienti delle singole loss.

$$\nabla_\theta J(\theta) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \nabla_\theta L(x_i, y_i; \theta)$$

Tuttavia calcolare il gradiente per ogni esempio può essere costoso per n grandi, in quanto il costo è lineare nel numero di esempi.

Possiamo quindi usare un insieme di m esempi $B = \{x^1, x^2, ..., X^m\}$ che viene detto **minibatch**.

$$g = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} \nabla_\theta L(x_i, y_i; \theta)$$

Gli algoritmi di gradient descent prendono un nome diverso in base a quanti esempi vengono utilizzati per calcolare il gradiente della funzione di costo (Figura 3.2).

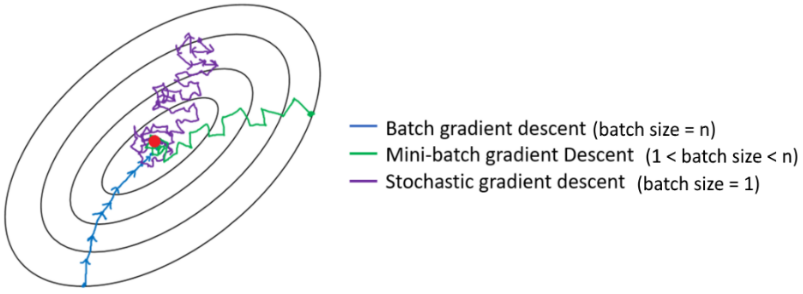


Figure 3.2: Rappresentazione del gradient descent con diverse batch size [2].

Con un numero di batch grande si ottiene una stima migliore, mentre con batch piccole una convergenza veloce. Solitamente le dimensioni scelte per la minibatch sono potenze di 2 (8, 16, 32, 64, ...) per sfruttare il calcolo parallelo su GPU.

Il numero di aggiornamenti per arrivare alla convergenza aumenta con in numero di esempi. L'aggiornamento del modello non dipende dal numero di esempi.

3.4 Empirical Risk

3.5 Ill Conditioning

3.6 Local Minima

3.7 Altri Algoritmi

Chapter 4

Cost Functions

Per valutare l'efficacia e le performance di un modello di deep learning usiamo una **cost function**.

Si usa il termine **loss function** o **error function** quando ci si riferisce un singolo esempio del training set, mentre **cost function** sull'intero training set (o mini-batch).

La **cost function** misura l'errore tra il valore predetto dal modello e il valore di verità. L'obiettivo è quello di minimizzare o massimizzare questa funzione in modo da ridurre l'errore.

La **cost function** può contenere anche un termine di regolarizzazione.

4.1 Loss Functions

Sia $y = (y_1, y_2, ..., y_k)$ un vettore che rappresenta la distribuzione multinomiale di verità definito sulle etichette $1...k$.

Sia $\hat{y} = (\hat{y}_1, \hat{y}_2, ..., \hat{y}_k)$ il vettore delle predizioni, dove $\hat{y}_i = P(y = i|x, \theta)$.

Negative Log Likelihood

$J(\theta) = -\mathbb{E}_{x,y\sim\hat{P}_{data}} \log(P_{model}(y|x))$

$J(\theta) = L_{neg\_likelihood}(y, \hat{y}) = -\sum_{i=1}^{k} y_i \log(\hat{y}_i)$

Mean Squared Error (MSE)

$$L(y, \hat{y}) = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N} (y - \hat{y}_i)^2$$

Mean Absolute Error (MAE)

$$L(y, \hat{y}) = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N} |y - \hat{y}_i|$$

4.2 Output Units

La scelta della funzione di loss è legata all'unità di output.

4.2.1 Linear - Distribuzione Gaussiana

Spesso usato per ottenere la media di una distribuzione gaussiana condizionale.

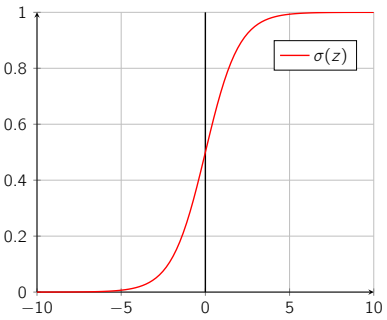
$\hat{y} = w^T h + b$

4.2.2 Sigmoid - Distribuzione Bernoulli

Usata per predire il valore di una variabile binaria $\hat{y} \in [0, 1]$.

La distribuzione di output è una distribuzione di Bernoulli definita da $P(y = 1|x)$.

La funzione sigmoide [4.1] ci permette di avere un gradiente forte quando abbiamo una predizione errata.



$$\sigma(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}} \quad (4.1)$$

Per prima cosa calcoliamo l'argomento $z = \omega^T h + b$ e poi applichiamo la sigmoide per trovare $\hat{y} = \sigma(\omega^T h + b)$.

$J(\theta) = -\mathbb{E}[\log P(y|x)]$

$\log(\tilde{P}(y)) = yz \qquad \tilde{P}(y) = \exp(yz)$

$$P(y) = \frac{\exp(yz)}{\sum_{y'=0}^{1} \exp(y'z)} = \frac{\exp(yz)}{1+\exp(z)} = \sigma((2y-1)z)$$

$P(y=0) = \sigma((2*0-1)z) = \sigma(-z)$

$P(y=1) = \sigma((2*1-1)z) = \sigma(z)$

$$J(\theta) = -\mathbb{E}[\log P(y|x)] = -\log \sigma((2y-1)z)$$

4.2.3 Softmax - Distribuzione Multinoulli

Vogliamo rappresentare una distribuzione di probabilità $\hat{y}$ definita su una variabile discreta con n valori possibili.

$\hat{y} = P(y|x), \qquad \hat{y}_i = P(y=i|x),\ i = 1..n$

$z = w^T h + b \qquad z_i = \log(\tilde{P}(y=i|x))$

$$\text{Softmax}(z)_i = \frac{\exp(z_i)}{\sum_{j=1}^{n} \exp(z_j)}$$

Calcolando il logaritmo della softmax possiamo riscriverla nel seguente modo:

$$\begin{aligned}\log \text{Softmax}(z)_i &= \log(\exp(z_i)) - \log \sum_{j=1}^{n} \exp(z_j) \\ &= z_i - \log \sum_{j=1}^{n} \exp(z_j)\end{aligned}$$

Quando massimizziamo, a valori alti del primo termine corrispondono valori bassi del secondo. Quindi possiamo tenere in considerazione solo il $max_j z_j$.

Le altre funzioni di loss che non invertono l'esponenziale possono dare problemi di saturazione. Quindi è stata definita una versione più stabile

$\text{Softmax}(z) = \text{Softmax}(z - max_i z_i)$

4.2.4 Gaussian Mixtures

Chapter 5

Regularization

Le tecniche di regolarizzazione puntano a ridurre l'errore della loss function sul validation set e sul test set.

La regolarizzazione può avvenire:

- Direttamente: cambiando i vincoli o la funzione obiettivo
- Indirettamente: aggiungendo dati

Un regolarizzatore efficace riduce significativamente la varianza mentre non aumenta molto il bias.

Controllare la complessità del modello non è semplice, non basta trovare la dimensione giusta il numero giusto di parametri. Nel deep learning si basa su trovare il miglior modello che è un modello grande che è stato propriamente regolarizzato.

5.1 Norm Penalities

Si limita la capacità del modello aggiungendo una penalità $\Omega(\theta)$ alla funzione obiettivo J.

$$\tilde{J}(\theta) = J(\theta) + \alpha\Omega(\theta)$$

$\alpha \in [0, \text{inf})$ è un iperparametro che pesa il contributo della **norm penalty** nella funzione obiettivo.

Solitamente la penalty Ω penalizza solo i pesi della trasformazione affine di ogni layer. I bias nella trasformazione affine richiedono meno dati per fittare, quindi non vengono regolarizzati.

Più parametri ci sono nel modello più questi sono sensibili a varianza, e quindi creano più instabilità nel modello.

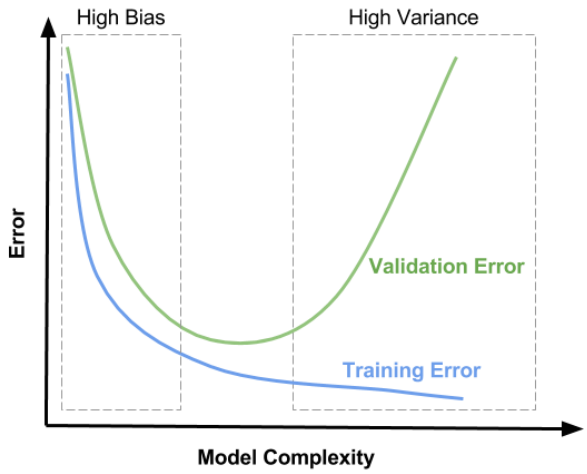


Figure 5.1: Bias-variance tradeoff example [3]. High bias → underfitting, High variance → overfitting

- somma assoluta dei pesi

$$\Omega(w, b) = \sum_{w_j} |w_j|$$

- somma quadratica dei pesi

$$\Omega(w, b) = \sqrt{\sum_{w_j} |w_j|^2}$$

Data la funzione obiettivo seguente

$$\tilde{J}(w; X, y) = \frac{\alpha}{2} w^T w + J(w; X, y)$$

Il gradiente é:

$$\nabla_w \tilde{J}(w; X, y) = \alpha w + \nabla_w J(w; X, y)$$

La regola di aggiornamento dei pesi usando la norma L2 diventa la seguente

$$\begin{aligned} w &= w - \epsilon\big(\alpha w + \nabla_w J(w; X, y)\big) \\ &= (1 - \epsilon\alpha) w + \epsilon \nabla_w J(w; X, y) \end{aligned}$$

5.2 Data Augmentation

Per evitare di trovare nuovi dati che dovrebbero essere etichettati si possono riutilizzare quelle già presenti applicando delle trasformazioni.

- Flip (Horizontal, Vertical)
- Random Noise (all'input o ai pesi)
- Rotations

E' utile effettuare l'addestramento sia sul dataset esteso che sul dataset di partenza per poterne valutare i vantaggi.

Label Smoothing

Multitask Learning

Il modello condivide i primi hidden layers e poi per i diversi task da effettuare si specificano dei task specific layers.

Si può ottenere una generalizzazione migliore per via dei parametri condivisi che necessitano di non essere specifiche.

Early Stopping

Evita di ottimizzare sul training set in modo da evitare l'overfitting.

Parameter Tying and Sharing

Bagging

E' una tecnica che riduce l'errore di generalizzazione combinando diversi modelli.

Viene effettuato l'addestramento di k modelli diversi su k insiemi del training set ottenuti tramite un campionamento casuale con rimpiazzo (boostrap). I risultati vengono aggregati calcolando una media nel caso di regressione o tramite una votazione nel caso di classificazione.

Sampling with replacement ensures each bootstrap is independent from its peers, as it does not depend on previous chosen samples when sampling.

Dropout

Bibliography

[1] Ashkan Eliasy and Justyna Przychodzen. The role of ai in capital structure to enhance corporate funding strategies. *Array*, 6:100017, 07 2020.

[2] Simon Larsson. Possible for batch size of neural network to be too small?, 05 2019. [visited on 30/10/2021, modified].

[3] Satya Mallick. Bias-variance tradeoff in machine learning — learnopencv, 02 2017. [visited on 21/10/2021].

[4] Mohamed Nagy. A modified method for detecting ddos attacks based on artificial neural networks - scientific figure on researchgate, 04 2019. [visited on 30/10/2021].

[5] Phung and Rhee. A high-accuracy model average ensemble of convolutional neural networks for classification of cloud image patches on small datasets. *Applied Sciences*, 9:4500, 10 2019.