Università di Bologna

Attività progettuale di Sistemi Intelligenti M

Reti neurali artificiali: dal MLP agli ultimi modelli di CNN

Autore: Ali Alessio Salman

Indice

1	\mathbf{Ret}	i Neurali Artificiali: le basi	1
	1.1	Breve introduzione	1
	1.2	Multi-layer Perceptron	2
		1.2.1 Strati Nascosti	3
	1.3	Caso di studio: prevedere il profitto di un ristorante	3
2	Imp	olementazione di un MLP	5
	2.1	Dataset e Architettura	5
	2.2	Forward Propagation	6
	2.3	Backpropagation	8
	2.4	Verifica numerica del gradiente	11
	2.5	Addestramento	13
		2.5.1 Apprendimento supervisionato	13
		9	14
	2.6		14
	2.7		17
	2.8	Risultati	17
3	Ret	i Neurali Convoluzionali	19
	3.1	Breve introduzione	19
	3.2	Architettura	19
		3.2.1 Strato di Convoluzione	19
		9	19
		• /	19
	3.3	Applicazioni e risultati	19
4	$\mathbf{C}\mathbf{N}$	N: implementazione e addestramento	21
	4.1	Il framework Torch	21
	4.2	Modello di CNN basato su LeNet	21
			21
		9	21
		• /	21
	4.3	1	21
	4.4	Addestramento su CIFAR	21
5			23
	5.1		23
	5.2		23
	5.3		23
	5 /	LeNet vs Resnet: confronto	93

6	Caso d'uso attuale: fine-tuning su dataset arbitrario	25
	6.1 Dataset	25
	6.2 Fine-Tuning	25
	6.3 ModelZoo	25
	6.3.1 Fine-tuning su Resnet	25
7	Conclusioni	27
\mathbf{A}	MLP: Codice addizionale	29
	A.1 Classi in Lua	29
	A.2 La classe Neural_Network	30
	A.3 Metodi getter e setter	31
В	Il framework Torch	33

Reti Neurali Artificiali: le basi

1.1 Breve introduzione

Una rete neurale artificiale – chiamata normalmente solo rete neurale (in inglese Neural Network) – è un modello di calcolo adattivo, ispirato ai principi di funzionamento del sistema nervoso degli organismi evoluti che secondo l'approccio connessionista[WConnessionismo] possiede una complessità non descrivibile con i metodi simbolici. La caratteristica fondamentale di una rete neurale è che essa è capace di acquisire conoscenza modificando la propria struttura in base alle informazioni esterne (i dati in ingresso) e interne (tramite le connessioni) durante il processo di apprendimento. Le informazioni sono immagazzinate nei parametri della rete, in particolare, nei pesi associati alle connessioni. Sono strutture non lineari in grado di simulare relazioni complesse tra ingressi e uscite che altre funzioni analitiche non sarebbero in grado di fare.

L'unità base di questa rete è il neurone artificiale introdotto per la prima volta da McCulloch e Pitts nel 1943 (fig. 1.1).

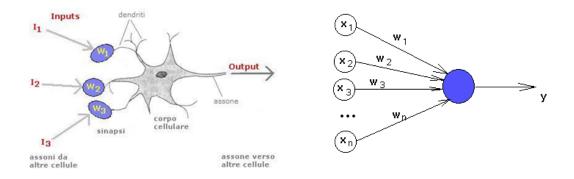


Figura 1.1: Modello di calcolo di un neurone (a sinistra) e schema del neurone artificiale (a destra)

Si tratta di un'unità di calcolo a N ingressi e 1 uscita. Come si può vedere dall'immagine a sinistra gli ingressi rappresentano le terminazioni sinaptiche, quindi sono le uscite di altrettanti neuroni artificiali. A ogni ingresso corrisponde un peso sinaptico w, che stabilisce quanto quel collegamento sinaptico influisca sull'uscita del neurone. Si determina quindi il potenziale del neurone facendo una somma degli ingressi, pesata secondo i pesi w.

A questa viene applicata una funziona di trasferimento non lineare:

$$f(x) = H(\sum_{i} (w_i x_i)) \tag{1.1}$$

ove H è la funzione gradino di Heaviside [**WHeaviside**]. Vi sono, come vedremo, diverse altre funzioni non lineari tipicamente utilizzate come funzioni di attivazioni dei neuroni. Nel '58 Rosenblatt propone il modello di Percettrone rifinendo il modello di neurone a soglia, aggiungendo un termine di bias e un algoritmo di apprendimento basato sulla minimizzazione dell'errore, cosiddetto error back-propagation[**WPercettrone**].

$$f(x) = H(\sum_{i} (w_i x_i) + b), \quad ove \quad b = bias$$
 (1.2)

$$w_i(t+1) = w_i(t) + \eta \delta x_i(t) \tag{1.3}$$

dove η è una costante di apprendimento strettamente positiva che regola la velocità di apprendimento, detta learning rate e δ è la discrepanza tra l'output desiderato e l'effettivo output della rete.

Il percettrone però era in grado di imparare solo funzioni linearmente separabili. Una maniera per oltrepassare questo limite è di combinare insieme le risposte di più percettroni, secondo architetture multistrato.

1.2 Multi-layer Perceptron

Il Multi-layer Perceptron (MLP) o percettrone multi-strato è un tipo di rete feed-forward che mappa un set di input ad un set di output. È la naturale estensione del percettrone singolo e permette di distinguere dati non linearmente separabili.

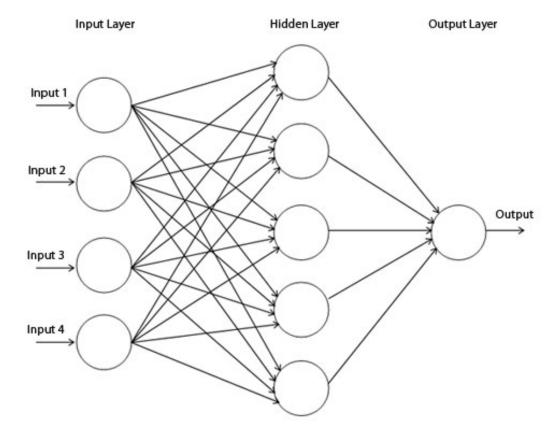


Figura 1.2: Struttura di un percettrone multistrato con un solo strato nascosto

Il mlp possiede le seguenti caratteristiche:

- ogni neurone è un percettrone come quello descritto nella sezione 1.1. Ogni unità possiede quindi una propria funzione d'attivazione non lineare.
- ullet a ogni connessione tra due neuroni corrisponde un peso sinaptico w
- è formato da 3 o più strati. In 1.2 è mostrato un MLP con uno strato di input; un solo strato nascosto (o *hidden layer*; ed uno di output.)
- l'uscita di ogni neurone dello strato precedente è l'ingresso per ogni neurone dello strato successivo. È quindi una rete *completamente connessa*. Tuttavia, si possono disconnettere selettivamente settando il peso sinaptico w a 0.
- la dimensione dell'input e la dimensione dell'output dipendono dal numero di neuroni di questi due strati. Il numero di neuroni dello strato nascosto è invece indipendente, anche se influenza di molto le capacità di apprendimento della rete.

Se ogni neurone utilizzasse una funzione lineare allora si potrebbe ridurre l'intera rete ad una composizione di funzioni lineari. Per questo - come detto prima - ogni neurone possiede una funzione di attivazione non lineare.

1.2.1 Strati Nascosti

I cosiddetti hidden layers sono una parte molto interessante della rete. Per il teorema di approssimazione universale [WApprox], WApprox [WConnessionismo] una rete con un singolo strato nascosto e un numero finiti di neuroni, può essere addestrata per approssimare una qualsiasi funzione continua su uno spazio compatto di \mathbb{R}^n . In altre parole, un singolo strato nascosto è abbastanza potente da imparare un ampio numero di funzioni. Precisamente, una rete a 3 strati è in grado di separare regioni convesse con un numero di lati \leq numero neuroni nascosti.

Reti con un numero di strati nascosti maggiore di 3 vengono chiamate reti neurali profonde o deep neural network; esse sono in grado di separare regioni qualsiasi, quindi di approssimare praticamente qualsiasi funzione. Il primo e l'ultimo strato devono avere un numero di neuroni pari alla dimensione dello spazio di ingresso e quello di uscita. Queste sono le terminazioni della "black box" che rappresenta la funzione che vogliamo approssimare.

L'aggiunta di ulteriori strati non cambia formalmente il numero di funzioni che si possono approssimare; tuttavia vedremo che nella pratica un numero elevato di strati migliori di gran lunga le performance della rete su determinati task, essendo gli hidden layers gli strati dove la rete memorizza la propria rappresentazione astratta dei dati in ingresso. Nel capitolo 4 vedremo un'architettura all'avanguardia con addirittura 152 strati.

1.3 Caso di studio: prevedere il profitto di un ristorante

Prendendo spunto dalla traccia d'esame di Sistemi Intelligenti M del 2 Aprile 2009:

"Loris è figlio della titolare di una famoso spaccio di piadine nel Riminese e sta tornando in Italia dopo aver frequentato con successo un prestigioso Master in Business Administration ad Harvard, a cui si è iscritto insequendo il sogno di esportare in tutto il mondo la piadina romagnola. Nel lungo viaggio in prima classe, medita su come presentare alla mamma, che sa essere un tantino restia alle innovazioni, il progetto di aprire un ristorantino a New York City."

Loris ha esportato con successo la piadina a NY, si veda [**WGradisca**] ma col passare degli anni ha notato alcuni problemi e vuole utilizzare di nuovo le sue brillanti capacità analitiche per migliorare il profitto del suo ambizioso ristorante. I problemi sono 2:

- 1. il ristorante è conosciuto ormai si sa che tutti vogliono mangiare italiano ma il numero dei coperti era rimasto a 22, come quelli iniziali;
- 2. gli orari di apertura sono troppo lunghi e vi sono alcune zone morte dove il costo di mantenere aperto il ristorante è maggiore rispetto al ricavo dei pochi clienti che si siedono a mangiare durante quelle ore;

Secondo la National Restaurant Association [WProfit] [WRRG] il profitto medio lordo annuo di un ristorante negli Stati Uniti varia dal 2 al 6%. Così Loris ha collezionato alcuni dati riguardo gli ultimi anni e - attratto da tutta quest'entusiasmo attorno alle reti neurali - decide di provare ad utilizzarle per trovare il trade-off ottimale di coperti e di orari di apertura settimanali per massimizzare il profitto del suo ristorante.

Dati questi presupposti, si vedrà nel capitolo 3 come implementare da zero un multi-layer perceptron e addestrarlo al suddetto scopo.

Implementazione di un MLP

Per il caso di studio introdotto nel Capitolo 1 si è implementato da zero un percettrone multistrato a 3 strati come quello illustrato in sezione 1.2. Vediamo qui di seguito le varie parti da implementare passo passo per costruire un MLP, addestrarlo e verificare che l'addestramento sia stato eseguito in maniera corretta. Il progetto è realizzato in Lua, per utilizzare il framework per il *Machine Learning* **Torch**(si veda B) e mantenere le consistenza con i capitoli successivi, nei quali si userà ancora Torch per addestrare reti neurali molto più complesse.

2.1 Dataset e Architettura

Nei vari anni, Loris ha cambiato le due variabili in gioco annotando di volta in volta i risultati. Siccome i coperti erano troppo pochi e le file d'attesa erano troppo lunghe, il ristorante perdeva alcuni clienti. Quindi Loris ha portato i coperti a 25 e diminuendo le ore settimanali a 38, ed i profitti sono aumentati. Tuttavia, non era raro che ancora qualche cliente dovesse aspettare in piedi per troppo tempo (si sa la vita a NY è frenetica), finendo poi per scegliere un ristorante adiacente. Inoltre, aveva diminuito le ore di troppo; nel weekend i clienti arrivavano fino a tardi, quindi rimanere aperti un'ora in più sarebbe stato lungimirante. Così, dopo l'allargamento della sala principale, ha aggiunto altri coperti ed aumentato le ore settimanali a 40, segnando un record personale di 4.4% di profitti annui.

Quindi, i dati in ingresso ed in uscita, in X e Y rispettivamente sono:

$$X = \begin{pmatrix} 22 & 42 \\ 25 & 38 \\ 30 & 40 \end{pmatrix} Y = \begin{pmatrix} 2.8 \\ 3.4 \\ 4.4 \end{pmatrix}$$

Osservando le dimensioni dei dati si nota che la rete deve avere 2 input e dare in uscita 1 output, che chiameremo \hat{y} , in contrapposizione a y che è l'uscita desiderata. Per quanto detto nella sezione 1.2, il MLP deve avere 2 neuroni nello strato di ingresso ed 1 solo in uscita. Inoltre, avrà uno strato nascosto con 3 neuroni. La dimensione di ogni strato fa parte di un insieme di parametri che viene deciso "a mano" sperimentando, i cosiddetti hyperparameters. Questi parametri non vengono aggiornati durante l'addestramento - come i pesi della rete - ma vengono decisi a priori. In figura 2.1 è mostrata l'architettura generale della nostra rete.

Di seguito gli snippet di codice per la definizione dei dati e dell'architettura della rete secondo lo schema appena presentato.

```
1 ------
2 th = require 'torch'
3 bestProfit = 6.0
```

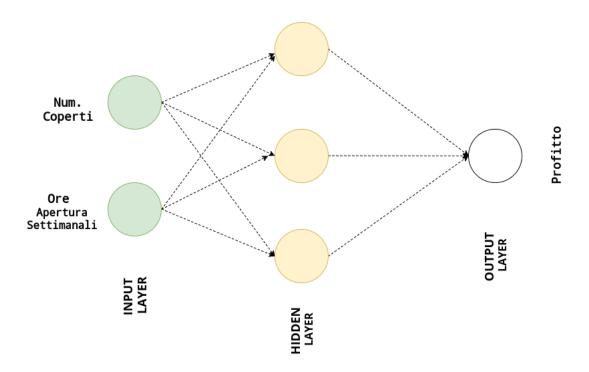


Figura 2.1: Architettura del percettrone multistrato per la previsione dei profitti

```
4 -- X = (num coperti, ore di apertura settimanali), y = profitto lordo
      annuo in percentuale
5 torch.setdefaulttensortype('torch.DoubleTensor')
6 X = th.Tensor(\{\{22,42\}, \{25,38\}, \{30,40\}\})
7 y = th.Tensor(\{\{2.8\}, \{3.4\}, \{4.4\}\})
9 --normalize
normalizeTensorAlongCols(X)
y = y/bestProfit
                     ---- Part 2 ---
  --creating the NN class in Lua, using a nice class utility
3 class=require 'class'
4 local Neural_Network = class('Neural_Network')
6 function Neural_Network:__init(inputs, hiddens, outputs)
        self.inputLayerSize = inputs
        self.hiddenLayerSize = hiddens
9
        self.outputLayerSize = outputs
        self.W1 = th.randn(net.inputLayerSize, self.hiddenLayerSize)
        self.W2 = th.randn(net.hiddenLayerSize, self.outputLayerSize)
11
12 end
```

2.2 Forward Propagation

Nella tabella 2.1 sono elencate le variabili della rete. Gli input dei layer indicati con z possono anche essere chiamati "attività dei layer" (indicando l'attività sulle loro sinapsi); e $a^{(2)}$ indica l'uscita del neurone dopo aver applicato la sommatoria e la funzione di attivazione sulle attività provenienti dal layer precedente.

Per muovere i dati in parallelo attraverso la rete si usa la moltiplicazione fra matrici, per questo è molto comodo usare framework che supportano operazioni fra

Variabili				
S. Codice	S. Matematico	Definizione	Dimensione	
X	X	Esempi, 1 per riga	(numEsempi,	
Λ		Esempi, i per riga	inputLayerSize)	
17		uscita desiderata	(numEsempi,	
У	$\parallel y$	uscita desiderata	outputLayerSize)	
W1	$W^{(1)}$	Pesi layer 1	(inputLayerSize,	
VV 1		1 est layer 1	hiddenLayerSize)	
W2	$W^{(2)}$	Pesi layer 2	(hiddenLayerSize,	
			outputLayerSize)	
z2	$z^{(2)}$	Input layer 2	(numEsempi,	
ZZ		Input layer 2	hiddenLayerSize)	
a2	$a^{(2)}$	Hagita larran 2	(numEsempi,	
a2		Uscita layer 2	hiddenLayerSize)	
z3	z(3)	Input layer 3	(numEsempi,	
ZO		input tayer 5	outputLayerSize)	

Tabella 2.1: Variabili usate nel testo e nel codice

matrici come Torch, Numpy o Matlab. Per prima cosa, gli input del tensore X devono essere moltiplicati e sommati con i pesi del primo layer $W^{(1)}$, ottenendo l'ingresso per l'hidden layer:

$$z^{(2)} = XW^{(1)} (1)$$

Si noti che $z^{(2)}$ è di dimensione 3x3, essendo X e $W^{(1)}$ di dimensione 3x2 e 2x3 rispettivamente.

Ora bisogna applicare la funzione di attivazione a $z^{(2)}$. Vi sono diverse funzioni di attivazione utilizzate per le reti neurali. Una delle prime a diventare popolare fu la funzione $sigmoide[\mathbf{WSigmoid}]$, utilizzata per questa rete. Vedremo nei capitoli successivi funzioni più efficaci.

$$a^{(2)} = f(z^{(2)}), \quad ove \quad f = sigmoide$$
 (2)

Per completare la *forward propagation*, bisogna seguire lo stesso procedimento per lo strato di output: sommare i contributi provenienti dall'hidden layer ed applicare la sigmoide:

$$z^{(3)} = a^{(2)}W^{(2)} (3)$$

$$\hat{y} = f(z^{(3)}) \tag{4}$$

Essendo $a^{(2)}$ di dimensione 3x3 e $W^{(2)}$ 3x1 l'output \hat{y} sarà anch'esso di dimensione 3x1, risultando quindi in una previsione per ogni esempio in ingresso.

Si noti come la moltiplicazione fra matrici renda tutto esprimibile in poche righe di codice.

```
1 --Note: I didn't implement manually the sigmoid function as Torch has one
        built-in.
2 --define a forward method
3 function Neural_Network:forward(X)
4 --Propagate inputs though network
```

```
self.z2 = th.mm(X, self.W1) --matrix multiplication
self.a2 = th.sigmoid(self.z2)
self.z3 = th.mm(self.a2, self.W2)
yHat = th.sigmoid(self.z3)
return yHat
end
```

2.3 Backpropagation

Come si fa ad addestrare una rete multistrato con diversi neuroni per strato, ognuno dei quali con uscita non lineare? Tramite l'algoritmo di backpropagation of errors, ideato da Rumelhart-Hinton-Williams nel 1985.

Non si può introdurre l'algoritmo di "backprop" senza prima spiegare il concetto di funzione di costo (o loss function). Nelle reti neurali (e più specificatamente nell'apprendimento supervisionato [WSupervised], si veda anche sezione ??), la funzione di costo misura la discrepanza tra l'uscita desiderata e l'effettivo output della rete. È quindi una misura dell'errore della rete, per cui l'obiettivo dell'apprendimento è trovare il minimo di questa funzione (modificando la struttura interna della rete, ovvero i pesi sinaptici). Come per la funzione di attivazione, anche in questo caso ci sono ampie possibilità di scelta [WLoss] a seconda del task su cui la rete viene addestrata. E di nuovo, come per la funzione di attivazione, si è scelta una delle funzione di costo più popolari: l'errore quadratico medio.

$$J = \sum_{j=1}^{n} \frac{1}{2} (y - \hat{y})^2 \tag{5}$$

Da cui, il codice in Lua:

```
function Neural_Network:costFunction(X, y)
   --Compute the cost for given X,y, use weights already stored in class
   self.yHat = self:forward(X)
   J = 0.5 * th.sum(th.pow((y-yHat),2))
   return J
end
```

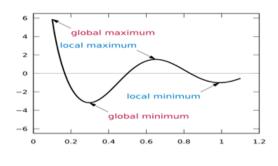
La backprop ha alcuni requisiti:

- Reti stratificate
- Ingressi a valori reali $\in [0,1]$
- Neuroni non lineari con funzione di uscita sigmoidale (o altra fz. di attivazione derivabile)

Sotto queste condizioni l'algoritmo sfrutta la regola della catena [**WChain**] per la derivazione di funzione composte, per calcolare il gradiente della funzione di costo. I pesi della rete vengono quindi aggiornati secondo la discesa del gradiente (figura 2.2); ovvero variano in maniera tale da minimizzare la funzione di costo J.

Viene chiamato backward propagation of errors poiché l'errore calcolato a partire dall'output della rete viene distribuito in maniera proporzionale all'indietro, su tutti i neuroni della rete. È importante quindi, spezzare il calcolo del gradiente dell'errore in derivate parziali, dall'ultimo strato fino al primo, e poi combinarle insieme.

Si noti che le equazioni (1-5) formano una un'unica equazione che lega J a $X, y, W^{(1)}, W^{(2)}$. Tenendo questo in mente, si applica la regola della catena.



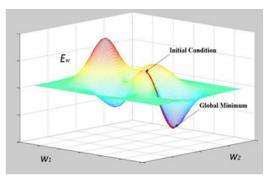


Figura 2.2: Cercare il minimo di una fz. seguendo la discesa del gradiente

Partendo dal fattore riguardante lo strato di output si ha:

$$\frac{\partial J}{\partial W^{(2)}} = \sum \frac{\partial \frac{1}{2} (y - \hat{y})^2}{\partial W^{(2)}}$$

Sviluppando i calcoli si ottiene:

$$\frac{\partial J}{\partial W^{(2)}} = -(y - \hat{y}) \frac{\partial \hat{y}}{\partial W^{(2)}}$$

L'equazione (4) indica che \hat{y} è la funzione di attivazione di $z^{(3)}$. Da cui:

$$\frac{\partial J}{\partial W^{(2)}} = -(y - \hat{y}) \frac{\partial \hat{y}}{\partial z^{(3)}} \frac{\partial z^{(3)}}{\partial W^{(2)}}$$

Il 2 membro dell'equazione è semplicemente la derivata della funzione di attivazione sigmoide:

$$f(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}}$$
$$f'(z) = \frac{e^{-z}}{(1 + e^{-z})^2}$$

Definiamola, quindi, nel codice:

```
function Neural_Network:d_Sigmoid(z)
  --Derivative of sigmoid function
  return th.exp(-z):cdiv((th.pow((1+th.exp(-z)),2)))
end
```

L'equazione così ottenuta è:

$$\frac{\partial J}{\partial W^{(2)}} = -(y - \hat{y})f'(z^{(3)})\frac{\partial z^{(3)}}{\partial W^{(2)}}$$

Infine, dobbiamo trovare $\frac{\partial z^{(3)}}{\partial W^{(2)}}$, che rappresenta la variazione dell'attività del terzo layer rispetto ai pesi del secondo layer. Richiamando l'equazione (3):

$$z^{(3)} = a^{(2)}W^{(2)}$$

Tralasciando per un attimo la somma tra i vari neuroni, si nota una semplice relazione

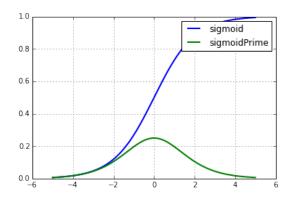


Figura 2.3: La funzione sigmoide e la sua derivata

lineare fra i termini, con a2 che rappresenta la pendenza. Indi:

$$\frac{\partial z^{(3)}}{\partial W^{(2)}} = a^{(2)}$$

Indicando con $\delta^{(3)}$, l'errore sullo strato di uscita, si ha:

$$\delta^{(3)} = -(y - \hat{y})f'(z^{(3)})$$

Ora bisogna moltiplicare l'errore con $a^{(2)}$. Come indicato nelle ottime dispense di CS231 di Stanford[WCS231vec]: guardare alle dimensioni delle matrici può essere utile in questo caso. Infatti per fare combaciare le dimensioni, c'è solo una maniera di calcolare la derivata qui, ed è facendo la trasposta di $a^{(2)}$:

$$\frac{\partial J}{\partial W^{(2)}} = (a^{(2)})^T \delta^{(3)}$$

Si noti che la sommatoria che abbiamo tralasciato all'inizio del calcolo viene inclusa

"automaticamente" dalle somme delle moltiplicazione fra matrici. L'ultimo termine da calcolare è $\frac{\partial J}{\partial W^{(1)}}$. Il calcolo è inizialmente simile a quello precedente, iniziando sempre dalla derivata sull'ultimo strato ed utilizzando i risultati trovati in precedenza:

$$\begin{split} \frac{\partial J}{\partial W^{(1)}} &= (y - \hat{y}) \frac{\partial \hat{y}}{\partial W^{(1)}} \\ \frac{\partial J}{\partial W^{(1)}} &= (y - \hat{y}) \frac{\partial \hat{y}}{\partial z^{(3)}} \frac{\partial z^{(3)}}{\partial W^{(1)}} \\ \frac{\partial J}{\partial W^{(1)}} &= -(y - \hat{y}) f'(z^{(3)}) \frac{\partial z^{(3)}}{\partial W^{(1)}} \\ \frac{\partial J}{\partial W^{(1)}} &= \delta^{(3)} \frac{\partial z^{(3)}}{\partial W^{(1)}} \end{split}$$

Ora rimane l'ultimo termine da calcolare, anch'esso da scomporre in diversi fattori andando a ritroso nella rete:

$$\frac{\partial z^{(3)}}{\partial W^{(1)}} = \frac{\partial z^{(3)}}{\partial a^{(2)}} \frac{\partial a^{(2)}}{\partial W^{(1)}}$$

Come prima, c'è una relazione lineare tra le sinapsi, ma stavolta la pendenza è data

da $W_{(2)}$; anche in questo caso da trasporre.

$$\frac{\partial J}{\partial W^{(1)}} = \delta^{(3)} (W^{(2)})^T \frac{\partial a^{(2)}}{\partial W^{(1)}}$$

$$\frac{\partial J}{\partial W^{(1)}} = \delta^{(3)} (W^{(2)})^T \frac{\partial a^{(2)}}{\partial z^{(2)}} \frac{\partial z^{(2)}}{\partial W^{(1)}}$$

 $\frac{\partial a^{(2)}}{\partial z^{(2)}}$ è di nuovo la derivata della f di attivazione. Il termine finale del calcolo $\frac{\partial z^{(2)}}{\partial W^{(1)}}$, rappresenta quanto varia l'uscita del primo strato al variare dei pesi. Richiamando l'equazione (1) si nota subito che questo valore è dato dal vettore di input X - come prima - traposto:

$$\frac{\partial J}{\partial W^{(1)}} = X^T \delta^{(3)} (W^{(2)})^T f'(z^{(2)})$$

Chiamando $\delta^{(2)} = \delta^{(3)}(W^{(2)})^T f'(z^{(2)})$ diventa:

$$\frac{\partial J}{\partial W^{(1)}} = X^T \delta^{(2)}$$

Facendo un sommario:

$$\frac{\partial J}{\partial W^{(2)}} = (a^{(2)})^T \delta^{(3)} \tag{6}$$

$$\frac{\partial J}{\partial W^{(1)}} = X^T \delta^{(2)} \tag{7}$$

$$\delta^{(2)} = \delta^{(3)}(W^{(2)})^T f'(z^{(2)})$$

$$\delta^{(3)} = -(y - \hat{y})f'(z^{(3)})$$
(9)

$$\delta^{(3)} = -(y - \hat{y})f'(z^{(3)})$$
(9)

Implementando le equazioni sovrascritte in Lua, la classe Neural_Network è quindi completa (per i dettagli si veda l'appendica A).

```
function Neural_Network:d_CostFunction(X, y)
     --Compute derivative wrt to W and W2 for a given X and y
     self.yHat = self:forward(X)
     delta3 = th.cmul(-(y-self.yHat), self:d_Sigmoid(self.z3))
     dJdW2 = th.mm(self.a2:t(), delta3)
     delta2 = th.mm(delta3, self.W2:t()):cmul(self:d_Sigmoid(self.z2))
     dJdW1 = th.mm(X:t(), delta2)
10
     return dJdW1, dJdW2
11 end
```

2.4 Verifica numerica del gradiente

Siccome la Backprop è notoriamente difficile da debuggare, una volta che la si usa per l'addestramento di una rete, bisogna controllare se l'implementazione della sezione precedente è corretta prima di proseguire nel progetto. A questo scopo, è stata scritta una funzione per il calcolo numerico del gradiente che andrà poi confrontata con il calcolo computato dalla Backprop.

L'algoritmo[WGradcheck] è basato sulla seguente definizione di derivata:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}J(\theta)) = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{J(\theta + \epsilon) - J(\theta - \epsilon)}{2 * \epsilon}$$

Il gradiente che bisogna controllare è formato dai 2 vettori che contengono le derivate dei pesi di tutta la rete: $\frac{\partial J}{\partial W^{(1)}}$ e $\frac{\partial J}{\partial W^{(2)}}$.

Approssimando ϵ con un valore molto piccolo (i.e. 10^{-4}) è possibile perturbare singolarmente i singoli pesi della rete (contenuti nei vettori $W_{(1)}$ e $W_{(2)}$) e calcolare così il gradiente in maniera numerica.

Per poterlo fare, servono delle funzioni ausiliare (metodi getter e setter) per prendere e settare i pesi ed il gradiente della rete come singolo vettore "flat" di parametri (appendice A). Dopodiché basta un loop ed un array per memorizzare le derivate dei singoli pesi così calcolati:

```
1 function computeNumericalGradient(NN, X, y)
     paramsInitial = NN:getParams()
     numgrad = th.zeros(paramsInitial:size())
     perturb = th.zeros(paramsInitial:size())
     e = 1e-4
6
     for p=1,paramsInitial:nElement() do
         --Set perturbation vector
        perturb[p] = e
9
        NN:setParams(paramsInitial + perturb)
10
        loss2 = NN:costFunction(X, y)
12
        NN:setParams(paramsInitial - perturb)
13
        loss1 = NN:costFunction(X, y)
14
         --Compute Numerical Gradient
16
17
        numgrad[p] = (loss2 - loss1) / (2*e)
18
         -- Return the value we changed to zero:
20
        perturb[p] = 0
21
22
     --Return Params to original value:
23
     NN:setParams(paramsInitial)
24
     return numgrad
25
26 end
```

Si può ora inizializzare una rete, eseguire la backpropagation e confrontare i valori con quelli calcolati numericamente:

```
1 --test if we actually make the calculations correctly
2 NN = Neural_Network(2,3,1)
3
4 print('Gradient checking...')
5 numgrad = computeNumericalGradient(NN, X, y)
6 grad = NN:computeGradients(X, y)
7 --[[
8 In order to make an accurate comparison of the 2 vectors
9 we can calculate the difference as the ratio of:
10 numerator --> the norm of the difference
11 denumerator--> the norm of the sum
12 Should be in the order of 10^-8 or less
13 --]]
14 diff = th.norm(grad-numgrad)/th.norm(grad+numgrad)
15 print(string.format('The difference is %e',diff))
```

2.5. Addestramento 13

Per calcolare quanto siano effettivamente uguali i due gradienti si può usare un rapporto basato sulla norme della somma e della differenza dei gradienti (si veda il codice sopra). Se la backprop è stata implementata correttamente questa differenza dovrebbe essere nell'ordine di 10^{-8} o inferiore. Difatti, quando si esegue lo script si ottiene:

2.5 Addestramento

Una volta accertati che l'implementazione della Backprop è corretta si può procedere ad addestrare la rete. Quello che si vuole ottenere è una rete che guardando ai dati accumulati negli anni, riesca a prevedere l'andamento del profitto del ristorante. Nel nostro dataset, ogni esempio è formato da una coppia <n. coperti, n. ore settimanali> a cui è associata un'uscita desiderata. La rete cercherà di modificare la sua struttura interna (i.e. i pesi sinaptici) "creando" una funzione - la rete stessa rappresenta questa funzione - per riprodurre in maniera più precisa possibile quest'associazione. L'apprendimento sarà quindi di tipo supervisionato.

2.5.1 Apprendimento supervisionato

Con questo termine s'intende l'allenamento di un sistema tramite una serie di esempi ideali; l'insieme di questi esempi è chiamato training set. Il sistema impara quindi ad approssimare una funzione non nota a priori a partire da una serie di coppie ingresso-uscita: per ogni input in ingresso gli si comunica l'output desiderato. L'apprendimento consiste nella capacità del sistema – tramite la funzione generata con l'allenamento – di generalizzare a nuovi esempi: avendo in ingresso dati non noti deve poter predire in modo corretto l'output desiderato. Matematicamente parlando, questi esempi non noti sono punti del dominio che non fanno parte dell'insieme degli esempi di training. Esistono diversi algoritmi di apprendimento supervisionato ma tutti condividono una caratteristica: l'addestramento viene eseguito mediante la minimizzazione di una funzione di costo (si veda la sezione 2.3). Nella Learning Rule

Fase di addestramento

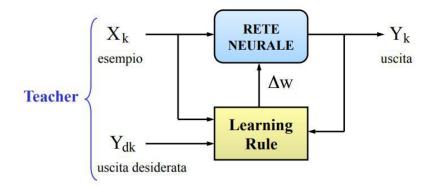


Figura 2.4: Apprendimento supervisionato: schema generale

in figura 2.4 sono compresi 2 elementi:

- Calcolo della discrepanza tra l'uscita della rete e l'uscita desiderata e backpropagation;
- 2. La strategia di aggiornamento dei parametri;

Riguardo all'ultimo punto ci sono diverse possibilità.

2.5.2 Discesa del gradiente

La loss function è una funzione che ha un numero di variabili pari al numero dei pesi della rete. Data la complessità - soprattutto in reti profonde molto più complesse di quella trattata in questo progetto - la ricerca del minimo non è semplice; si corre il rischio di rimanere bloccati in plateau o minimi locali. Per questo, si applicano metodi a raffinamento iterativo: si parte da una soluzione iniziale e si cerca di migliorarla ad ogni ciclo. Questo metodo è conosciuto come *Stochastig Gradient Descent*[WSGD]. Calcolando il gradiente ∇J si conosce la direzione di massima variazione quindi ci si sposta - lungo l'opposto di questa direzione, l'antigradiente - di una quantità pari a η . Questo parametro si chiama learning rate e regola appunto la velocità dell'apprendimento.

Tornando alla strategia di aggiornamento dei parametri, la più intuitiva è chiamata "Vanilla":

$$W_{t+1} = W_t - \eta \nabla J(W_t) \tag{2.1}$$

Questa regola di apprendimento però soffre di alcuni problemi:

- effettua uno spostamento pari a η sia per features frequenti che non. Questo problema è noto come "sparsità delle features"
- η è una costante e non è detto che garantisca la convergenza. Si potrebbe "saltare" da un lato all'altro del punto di minimo senza mai trovarlo.
- come detto sopra, i punti di sella e plateau causano problemi. In questo caso il gradiente è nullo e quindi l'aggiornamento dei pesi si azzera, fermando l'apprendimento.

Per ovviare a questo ed altri problemi, sono stati studiati numerosi metodi. La prossima sezione ne elenca qualcuno utilizzato per questo progetto.

2.6 Ottimizzazione: diverse tecniche

L'ottimizzazione dell'apprendimento delle reti neurali è un argomento vasto ed impervio, ma molto importante. Con addestramenti che possono durare mesi A seconda del tipo di apprendimento sono nate, in relativamente breve tempo, moltissimi metodi di ottimizzazione. Qui si faranno solo dei cenni ai metodi utlizzati in questo progetto.

Prima di elencare tecniche più evolute dell'aggiornamento Vanilla, occorre precisare alcuni punti dello Stochastic Gradient Descent, essendo quest'ultimo il punto di partenza di ogni altro metodo.

• SGD: lo Stochastic Gradient Descent è, come lo descrive il nome stesso, una versione stocastica della discesa del gradiente. La discesa del gradiente standard non è scalabile, poiché il gradiente da calcolare tiene conto dell'errore quadratico calcolato su ogni singolo esempio del dataset. Come detto poco fa, la loss function ha già di per sé un numero di variabili proporzionale alla complessità della rete; quando il dataset è molto largo, ed è tipico per problemi reali di

machine learning, questo calcolo diventa inefficiente. L'SGD risolve questo problema approssimando l'operazione "gradiente - aggiornamento pesi" da tutto il dataset al singolo esempio. Questo rende l'approssimazione molto inaccurata, ma molto veloce da elaborare. Nonostante le oscillazioni dovute all'inaccuratezza, questo metodo consente nella pratica, dopo molte iterazioni, di trovare il minimo globale. Questo è soprattutto vero per problemi su larga scala.

Un compromesso tra il metodo standard e quello completamente stocastico è l'utilizzo di "mini-batch", cioè piccoli sottoinsiemi del dataset su cui viene eseguita l'iterazione di apprendimento. Se il dataset è abbastanza eterogeneo ed è ordinato in maniera randomica, il mini-batch approssima abbastanza bene l'intero dataset; di conseguenza, l'approssimazione sarà più verosimile al calcolo dell'intero gradiente, aumentando quindi l'accuratezza senza intaccare la velocità del calcolo.

MOMENTUM & NAG: Il "Momentum" controlla la quantità d'inerzia nella modifica dei pesi sinaptici, inserendo nell'equazione la variazione ΔW precedente.
 INSERIRE FORMULA In questo modo si riducono le oscillazioni nella ricerca della soluzioni permettendo di usare learning rate più alti. Ispirato dal momento nella Fisica, considerando il vettore dei pesi come una particella che viaggia in uno spazio parametrico.

Il Nesterov Accelerated Gradient è una versione più raffinata del Momentum, che elabora una correzione in maniera più furba. Per aiutare a capire la differenza tra i due, si guardi la figura 2.5

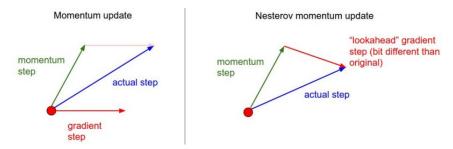


Figura 2.5: Confronto tra il momentum classico e NAG

- BFGS: l'algoritmo Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno fa parte della famiglia "Quasi-Newton" [Wquasinewton]. Questo metodo supera i limiti della discesa del gradiente classica facendo una stima della matrice Hessiana, ovvero della curvatura della superficie della funzione di costo J. Utilizzando questa stima compie degli spostamenti più informati verso la discesa. Nella pratica si usa una versione efficiente che consuma meno memoria, detta Limited-BFGS[WLBFGS].
- ADAM: l'Adaptive Moment Estimation cerca di ovviare ai problemi dell'aggiornamento vanilla modificando il learning rate in maniera diversa per ogni parametro e a seconda dello stadio dell'apprendimento. Fa parte quindi della famiglia dei metodi adattivi. In particolare, l'algoritmo calcola la media con decadimento esponenziale del gradiente e del quadrato del gradiente; i parametri β_1 e β_2 controllano il decadimento di queste medie mobili. Gli autori forniscono i valori consigliati per questi parametri, che sono infatti i valori di default anche in ogni framework che supporta Adam[WAdam].

Per riuscire effettivamente ad addestrare la rete, si è utilizzato un package di ottimizzazione di Torch: optim. Quest'ultimo fornisce il supporto a tutte (e più) le tecniche di ottimizzazione viste prima. Si può quindi procedere all'addestramento della rete. Utilizzando un logger per mantenere tutti i dati sul training, si possono successivamente plottare le diverse curve di apprendimento per confrontare i diversi metodi.

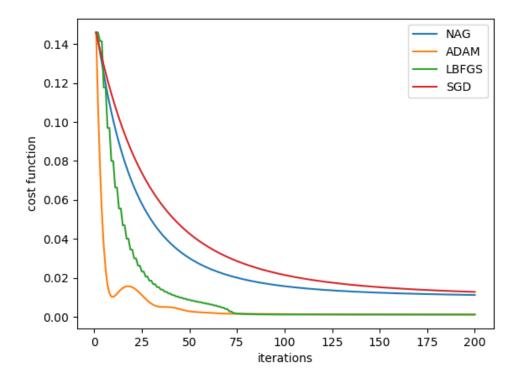
Definita quindi una classe Trainer, si definisce un metodo per addestrare la rete che astrae dalla tecnica di ottimizzazione utilizzata.

```
1 Trainer = class('Trainer')
2 function Trainer:__init(NN)
    --Make Local reference to network:
    self.N = NN
4
5 end
7 --Let's train!
8 function Trainer:train(X, y)
     --variables to keep track of the training
    local neval = 0
10
    --get initial params
11
   params0 = self.N:getParams()
12
     -- create closure to evaluate f(X) and df/dX
13
     -- this is requested by the API of the optim package
14
     local feval = function(params0)
15
        local f = self.N:costFunction(X, y)
16
        print(f)
17
        local df_dx = self.N:computeGradients(X, y)
18
        neval = neval + 1
19
        logger:add{neval, f} --,timer:time().real}
20
21
        return f, df_dx
22
     if optimMethod == optim.cg then
23
        newparams,_,_ = optimMethod(feval, params0, optimState)
24
25
        for i=1,opt.maxIter do
26
           newparams,__,_ = optimMethod(feval, params0, optimState)
27
           self.N:setParams(newparams)
28
29
30
     end
```

Procedendo iterativamente con le diverse tecniche di ottimizzazione si ottiene il risultato in figura 2.6.

Dal grafico si evidenzia come le premesse teoriche dei vari metodi siano state pienamente rispettate. Nonostante il problema sia molto semplice se comparato ai reali problemi di deep learning, già su un dataset ed un numero di iterazioni così limitato si nota la superiorità di un metodo verso il precedente. In particolare, nel corso "CS231" di deep learning applicato alla visione artificiale di Stanford[WCS231-adam], sviluppato da Andrej Karpathy et. al, si raccomanda Adam come metodo di default per applicazioni di deep learning:

In practice Adam is currently recommended as the default algorithm to use. However, it is often also worth trying SGD+Nesterov Momentum as an alternative.



 $\it Figura~2.6:$ Confronto dei metodi di ottimizzazione durante il training

2.7 Overfitting: come rilevarlo e risolverlo

2.8 Risultati

Reti Neurali Convoluzionali

3.1 Breve introduzione

La reti neurali convoluzionali, alle quali ci riferiremo con l'abbrevazione CNN - dall'inglese $Convolutional\ Neural\ Network$, sono un'evoluzione delle normali reti artificiali caratterizzati da una particolare architettura che le ha rese negli anni molto efficaci su diversi compiti.

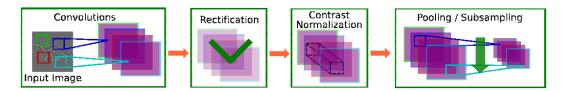


Figura 3.1: I diversi strati tipici di una CNN

- 3.2 Architettura
- 3.2.1 Strato di Convoluzione
- 3.2.2 Strato di Pooling
- 3.2.3 Strato completamente connesso (FC)
- 3.3 Applicazioni e risultati

CNN: implementazione e addestramento

- 4.1 Il framework Torch
- 4.2 Modello di CNN basato su LeNet
- 4.2.1 Strato di Convoluzione
- 4.2.2 Strato di Pooling
- 4.2.3 Strato completamente connesso (FC)
- 4.3 Dataset d'esempio: CIFAR
- 4.4 Addestramento su CIFAR

Vedremo nel capitolo seguente un confronto dei risultati di una CNN con un'archittettura allo stato dell'arte addestrata sullo stesso dataset.

Addestrare un modello allo stato dell'arte

- 5.1 ResNet
- 5.2 Implementazione di Resnet di Facebook
- 5.3 Addestramento su CIFAR
- 5.4 LeNet vs Resnet: confronto

Caso d'uso attuale: fine-tuning su dataset arbitrario

Un caso di studio attuale è quello di prendere una rete allo stato dell'arte, già addestrata per mesi su un dataset enorme come quello di *Imagenet* per utilizzarla su un dataset arbitrario a nostra scelta, per scopi industriali o personali.

- 6.1 Dataset
- 6.2 Fine-Tuning
- 6.3 ModelZoo

6.3.1 Fine-tuning su Resnet

Facebook ha reso pubbliche le sue implementazioni di Resnet su github a tutti, cosicché possano essere utilizzate per qualsivoglia esperimento. Ci sono vari modelli, più o meno potenti a seconda degli strati della rete (da 18 a 140).

Conclusioni

Appendice A

MLP: Codice addizionale

A.1 Classi in Lua

In Lua manca il costrutto delle classi. Si può tuttavia crearle utilizzando tables e meta-tables. Per realizzare il multi-layer perceptron si è utilizzato una piccola libreria, di seguito riportata.

```
1 -- class.lua
2 -- Compatible with Lua 5.1 (not 5.0).
3 function class(base, init)
     local c = {} -- a new class instance
     if not init and type(base) == 'function' then
        init = base
6
        base = nil
     elseif type(base) == 'table' then
        -- our new class is a shallow copy of the base class!
10
        for i, v in pairs (base) do
           c[i] = v
11
12
        c._base = base
13
     end
14
     -- the class will be the metatable for all its objects,
15
     -- and they will look up their methods in it.
16
17
     c.\underline{\hspace{0.2cm}} index = c
18
19
     -- expose a constructor which can be called by <classname>(<args>)
20
     local mt = {}
     mt.__call = function(class_tbl, ...)
21
        local obj = {}
22
        setmetatable(obj,c)
2.3
        if init then
24
           init(obj,...)
25
26
             -- make sure that any stuff from the base class is initialized!
27
           if base and base.init then
              base.init(obj, ...)
31
        end
32
        return obj
33
34
     c.init = init
     c.is_a = function(self, klass)
35
        local m = getmetatable(self)
36
37
        while m do
           if m == klass then return true end
38
39
           m = m.\_base
41
        return false
42
   setmetatable(c, mt)
```

```
44 return c
45 end
```

A.2 La classe Neural Network

Nel capitolo 1 si sono mostrati i vari snippet di codice man mano che si introducevano i concetti teorici che stanno alla base di questa implementazione. Di seguito è presentata l'intera classe Neural_Network:

```
1 -- creating class NN in Lua, using a nice class utility
2 class = require 'class'
3
4 Neural_Network = class('Neural_Network')
6 --init NN
7 function Neural_Network:__init(inputs, hiddens, outputs)
        self.inputLayerSize = inputs
        self.hiddenLayerSize = hiddens
        self.outputLayerSize = outputs
10
        self.W1 = th.randn(net.inputLayerSize, self.hiddenLayerSize)
11
        self.W2 = th.randn(net.hiddenLayerSize, self.outputLayerSize)
12
13 end
14
15 --define a forward method
16 function Neural_Network:forward(X)
17
    --Propagate inputs though network
    self.z2 = th.mm(X, self.W1)
18
   self.a2 = th.sigmoid(self.z2)
    self.z3 = th.mm(self.a2, self.W2)
    yHat = th.sigmoid(self.z3)
21
     return yHat
22
23 end
24
25 function Neural_Network:d_Sigmoid(z)
   --derivative of the sigmoid function
     return th.exp(-z):cdiv((th.pow((1+th.exp(-z)),2)))
27
28 end
30 function Neural_Network:costFunction(X, y)
     --Compute the cost for given X,y, use weights already stored in class
     self.yHat = self:forward(X)
32
     --NB torch.sum() isn't equivalent to python sum() built-in method
33
     --However, for 2D arrays whose one dimension is 1, it won't make any
34
     difference
     J = 0.5 * th.sum(th.pow((y-yHat),2))
35
     return J
36
37 end
39 function Neural_Network:d_CostFunction(X, y)
    --Compute derivative wrt to W and W2 for a given X and y
    self.yHat = self:forward(X)
41
42
   delta3 = th.cmul(-(y-self.yHat), self:d_Sigmoid(self.z3))
43
    dJdW2 = th.mm(self.a2:t(), delta3)
44
     delta2 = th.mm(delta3, self.W2:t()):cmul(self:d_Sigmoid(self.z2))
45
     dJdW1 = th.mm(X:t(), delta2)
46
47
48
     return dJdW1, dJdW2
```

A.3 Metodi getter e setter

Nella sottosezione ?? del capitolo 1 si è dimostrato come calcolare numericamente il gradiente. Si è fatto cenno ai getter e setter per ottenere dei flattened gradients, ovvero "srotolare" i tensori dei gradienti in vettori monodimensionali. I metodi, qui mostrati, necessitano di una comprensione dei comandi di Torch. Data la maggiore popolarità di Python Numpy, nel caso il lettore fosse più familiare con quest'ultimo, nell'appendice B è mostrata anche una tabella di equivalenza dei metodi fra i due.

```
1 -- Helper Functions for interacting with other classes:
2 function Neural_Network:getParams()
     --Get W1 and W2 unrolled into a vector
     params = th.cat((self.W1:view(self.W1:nElement())), (self.W2:view(
     self.W2:nElement())))
5
     return params
6 end
  function Neural_Network:setParams(params)
     --Set W1 and W2 using single paramater vector.
     W1_start = 1 --index starts at 1 in Lua
    W1_end = self.hiddenLayerSize * self.inputLayerSize
11
     self.W1 = th.reshape(params[{ {W1_start, W1_end} }],
12
     self.inputLayerSize, self.hiddenLayerSize)
     W2_end = W1_end + self.hiddenLayerSize*self.outputLayerSize
13
     self.W2 = th.reshape(params[{ {W1_end+1, W2_end} }],
      self.hiddenLayerSize, self.outputLayerSize)
15 end
16
17 -- this is like the getParameters(): method in the NN module of torch, i.e.
      compute the gradients and returns a flattened grads array
18 function Neural_Network:computeGradients(X, y)
    dJdW1, dJdW2 = self:costFunctionPrime(X, y)
     return th.cat((dJdW1:view(dJdW1:nElement())), (dJdW2:view(dJdW2:
     nElement())))
21 end
```

Appendice B

Il framework Torch

 $[\mathbf{WTorch}]$