Alma Mater Studiorum · Università di Bologna Campus di Cesena

SCUOLA DI SCIENZE
Corso di Laurea in Ingegneria e Scienze informatiche

Previsione di agenti inquinanti mediante reti neurali e ottimizzazione degli iperparametri attraverso random search con Hyperas

Relazione finale in:

SYSTEMS INTEGRATION

Relatore:
Prof. VITTORIO GHINI

Presentata da:
RUBEN CERONI

Seconda Sessione di Laurea
Anno Accademico: 2017-2018

ringraziamenti

Ringrazio i professori del corso di laurea per gli insegnamenti forniti. Un ringraziamento in particolare va al Prof. Vittorio Ghini per il supporto fornito durante il lavoro di tesi. Ringrazio inoltre la mia famiglia per il supporto in questi anni di studio, e gli amici che ci sono sempre stati nei momenti di difficoltà.

Indice

Introduzione

Nella società odierna l'inquinamento è un problema sempre più rilevante soprattutto nelle grandi città, più densamente abitate e trafficate. Le polveri sottili PM10 sono il principale agente inquinante dannoso per la salute umana, prodotte per buona parte dai gas di scarico delle automobili. Gli utenti della strada più colpiti, oltre ai pedoni, sono i ciclisti, che in mancanza di piste ciclabili apposite possono essere costretti a circolare in mezzo al traffico, venendo sempre più esposti ai gas di scarico.

Per limitare gli effetti dannosi sulla salute si è pensato di integrare sulle bici dei vari progetti di bike-sharing presenti a Bologna, in particolare Almabike, dei sensori in grado di rilevare i vari inquinanti, oltre ai sensori di posizione tipicamente già presenti. Basandosi su questi dati sarà possibile generare previsioni sulle concentrazioni degli agenti inquinanti e in base a queste suggerire il percorso meno inquinato agli utenti del servizio.

Per effettuare le previsioni sui dati si è deciso di utilizzare reti neurali artificiali, in particolare verrà utilizzata la libreria Keras, basata su Tensorflow, scritta in Python.

Dato che i sensori non sono ancora installati e quindi non sono ancora disponibili i dati d'interesse, questa trattazione si concentrerà sull'aspetto preliminare di individuare la rete migliore per effettuare previsioni. Per fare ciò sarà necessario prima conoscere le basi teoriche dietro l'implementazione. In seguito verranno esposti i vari modelli differenti di rete utilizzati e commentati i risultati ottenuti, al fine di individuare la rete che produce i risultati migliori. Successivamente saranno utilizzati meccanismi più avanzati di apprendimento che andranno ad estendere alcuni dei modelli analizzati in precedenza.

Ai modelli migliori individuati in precedenza saranno poi applicate tecniche di ottimizzazione automatiche degli iperparametri, al fine di migliorare ulteriormente le loro performance.

Il documento sarà così suddiviso:

Reperimento e manipolazione dei dati Descrizione del problema, del reperimento dei dati e la loro manipolazione.

Intelligenza artificiale per il forecasting Introduzione alle tecniche di machine learning utilizzate e ai principali fondamenti teorici relativi.

Progettazione e Sviluppo Introduzione alle tecnologie utilizzate per l'implementazione delle reti neurali e l'utilizzo che ne è stato fatto.

Sperimentazione e Analisi dei risultati Descrizione e commento dei risultati ottenuti con le reti implementate nel capitolo precedente.

Meccanismi avanzati di apprendimento Introduzione a tecniche di apprendimento e reti neurali avanzate e commento dei risultati ottenuti.

Ottimizzazione degli iperparametri tramite random search Introduzione teorica ai principali algoritmi di ottimizzazione automatica degli iperparamentri; Commento dei risultati ottenuti e e individuazione del modello migliore.

Conclusioni e sviluppi futuri Riassunto e commento dei risultati ottenuti.

Definizione degli obiettivi

Uno dei principali obiettivi che ci si pone in questo lavoro di tesi è di continuare e migliorare il lavoro svolto in precedenza ottenendo una buona base adattabile facilmente ai dati reali quando diverranno disponibili.

A tal scopo si è deciso di provare a includere anche dati di posizione per simulare le varie locazioni in cui si possono trovare i sensori mobili al momento della rilevazione. Ovviamente però, trattandosi di stazioni fisse nel nostro caso le coordinate rimarranno costanti, si potrebbe simulare lo spostamento associando sempre coordinate differenti ma questo potrebbe falsare i risultati ottenuti.

Un altro aspetto da analizzare è la scalabilità del sistema, in primo luogo incrementando la lungimiranza della previsione da fare valutando la possibilità di estendere la finestra di previsione oltre la giornata, per arrivare a un range temporale di una settimana. Altro aspetto di scalabilità è il numero di stazioni fornite in input, considerando che nello scenario reale le fonti di dati saranno elevate.

Capitolo 1

Reperimento e manipolazione dei dati

Uno degli obiettivi di questo progetto di tesi consiste nel definire una base solida per la previsione degli agenti inquinanti nelle varie zone della città di Bologna.

Per fare questo, si avranno a disposizione le rilevazioni metereologiche e degli agenti inquinanti ottenute dalle biciclette dei vari servizi di bike-sharing disponibili in città, tra di questi il progetto AlmaBike. In ciascuna bici saranno integrati sensori di inquinamento e di posizione che durante l'uso quotidiano raccoglieranno dati da inviare a un servizio di archiviazione centrale e attraverso l'elaborazione di essi, suggerirà agli utenti il percorso migliore, evitando le zone piú inquinate nel momento di percorrenza.

Considerando che il progetto è ancora in fase embrionale, ovvero le bici non dispongono attualmente dei relativi sensori, risulta necessario reperire dati verosimili per realizzare la parte di progetto che analizza i dati e realizza la previsione.

1.1 Fonte dei dati

In Italia sono disponibili varie fonti per il reperimento dei dati relativi all'inquinamento atmosferico e alla situazione meteorologica; la fonte più autorevole, completa e aggiornata periodicamente è l'archivio gestito dall'ARPAE (Agenzia regionale per la prevenzione, l´ambiente e l´energia dell´Emilia-Romagna) che gestisce, per la sua regione di riferimento varie stazioni di rilevamento, riportate in figura 1.1.

Dato che che il progetto AlmaBike è destinato ad essere lanciato nella città di Bologna e vista l'elevata quantità di stazioni di rilevamento presenti in Emilia-Romagna, la fonte scelta per il reperimento dei dati è stata OpenData, gestito sempre da ARPAE [10].

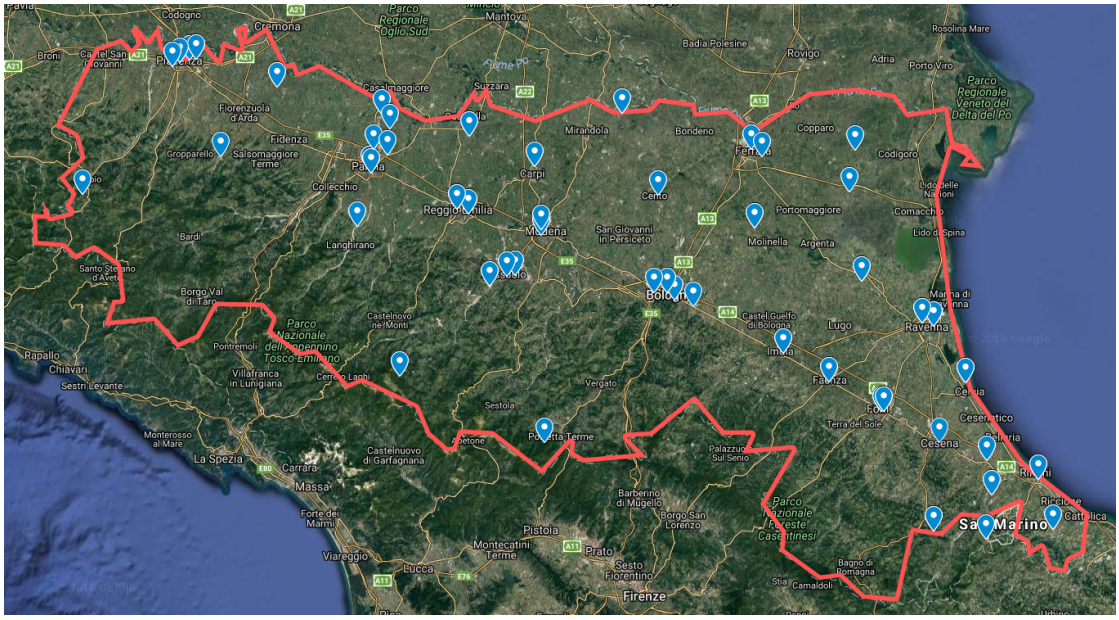


Figura 1.1: Le stazioni Arpae in Emilia-Romagna

OpenData è un archivio suddiviso per tipologia di rilevazione, all'interno del quale sono presenti i file, organizzati anno per anno, con le varie rilevazioni. Sono stati presi in esame gli archivi meteorologici e di inquinamento dell'aria;

Nel dettaglio, gli elementi climatici e relative unità di misura oggetto di rilevazione sono riportati in tabella 1.1 e gli agenti inquinanti in tabella 1.2.

Tabella 1.1: Tabella degli elementi climatici

Tipo di dato	*Unità di misura*	*Frequenza*
Temperatura	K	Oraria
Pressione	Pa	Oraria
Umidità	g/m^3	Oraria
Velocità del vento	km/h	Oraria
Direzione del vento	0°—360°	Oraria
Pioggia	mm	Oraria

Tabella 1.2: Tabella degli agenti inquinanti

Tipo di dato	*Descrizione*	*Unità di misura*	*Frequenza*
PM10	Particulate Matter	K	Giornaliera
PM2.5	Particulate Matter	Pa	Giornaliera
O_3	Ozono	g/m^3	Oraria
NO_2	Biossido di azoto	km/h	Oraria
C_6H_6	Benzene	$0°-360°$	Giornaliera
CO	Monossido di carbonio	$\mu g\, m^{-1}$	Oraria
SO_2	Biossido di zolfo	$\mu g\, m^{-1}$	Oraria
NOX	Ossidi di azoto	$\mu g\, m^{-1}$	Oraria
$C_6H_5-CH_3$	Toluene	$\mu g\, m^{-1}$	Giornaliera
NO	Monossido di azoto	$\mu g\, m^{-1}$	Oraria
C_8H_{10}	o-xylene	$\mu g\, m^{-1}$	Giornaliera

1.1.1 Descrizione degli agenti inquinanti, origine e possibili danni per la salute

Particolato PM10

Il particolato è l'inquinante atmosferico che provoca i maggiori danni alla salute umana in Europa. è costituito da particelle così leggere che possono fluttuare nell'aria. Si tratta di particelle solide e liquide aventi diametro aerodinamico variabile fra 0,1 e circa 100 µm.

Il termine PM10 identifica le particelle di diametro aerodinamico inferiore o uguale ai 10 µm (1 µm = 1 millesimo di millimetro). Le particelle PM10 penetrano in profondità nei nostri polmoni. Il loro effetto sulla nostra salute e sull'ambiente dipende dalla loro composizione e a seconda di questa, le particelle possono anche avere effetti sul clima globale, sia riscaldando che raffreddando il pianeta.

Alcune particelle vengono emesse direttamente nell'atmosfera, altre si formano come risultato di reazioni chimiche che coinvolgono i gas precursori, vale a dire l'anidride solforosa, gli ossidi di azoto, l'ammoniaca e i composti organici volatili. Gran parte delle particelle emesse direttamente derivano dalle attività umane, principalmente dalla combustione di combustibili fossili e biomasse. Un importante contributo alle emissioni di particelle è rappresentato dai gas di scarico dei veicoli con motori a combustione interna, ma anche dall'usura dei pneumatici, dei freni e dell'asfalto. Sono dovuti alle attività umane anche gran parte dei gas precursori.

L'origine dell'inquinamento da PM10 varia sensibilmente da zona a zona e nel corso del tempo. Si stima che, in media, in Emilia-Romagna la parte preponderante dell'inquinamento da PM10 sia dovuto alle attività umane, con una frazione

variabile tra il 75% in Appennino e l' 85% in pianura.

Particolato PM2.5

L'inquinamento da particolato fine (PM2.5, ossia particolato con un diametro minore di 2,5 µm) è composto da particelle solide e liquide così piccole che non solo penetrano in profondità nei nostri polmoni, ma entrano anche nel nostro flusso sanguigno, proprio come l'ossigeno.

Un recente studio dell'Organizzazione mondiale della sanità dimostra che l'inquinamento da particolato fine potrebbe essere un problema per la salute maggiore di quanto si pensasse in precedenza. Secondo il rapporto dell'OMS «Rassegna delle prove sugli aspetti sanitari dell'inquinamento atmosferico», un'esposizione prolungata al particolato fine può scatenare l'arteriosclerosi, creare problemi alla nascita e malattie respiratorie nei bambini. Lo studio inoltre suggerisce un possibile collegamento con lo sviluppo neurologico, le funzioni cognitive e il diabete, e rafforza il nesso di causalità tra PM2,5 e morti cardiovascolari e respiratorie.

Alcuni componenti del particolato fine (con un diametro minore di 2,5 µ) vengono emessi direttamente nell'atmosfera, altri si formano come risultato di reazioni chimiche che coinvolgono i gas precursori. Il nerofumo, uno dei componenti comuni della fuliggine rilevato principalmente nel particolato fine, è il risultato della combustione incompleta di combustibili - sia di combustibili fossili che del legno. Nelle aree urbane le emissioni di nerofumo sono causate principalmente dal trasporto stradale, in particolare dai motori diesel.

Ozono

L'ozono (O_3) è una forma speciale e altamente reattiva di ossigeno ed è composto da tre atomi di ossigeno. Nella stratosfera, uno degli strati più alti dell'atmosfera, l'ozono ci protegge dalle pericolose radiazioni ultraviolette provenienti dal sole.

Invece nello strato più basso dell'atmosfera – la troposfera – l'ozono è, di fatto, un'importante sostanza inquinante che influisce sulla salute pubblica e l'ambiente. Alti livelli di ozono corrodono i materiali, gli edifici e i tessuti vivi, inoltre, riduce la capacità delle piante di eseguire la fotosintesi e ostacola il loro assorbimento di anidride carbonica, indebolendone la crescita e la riproduzione, con il risultato di minori raccolti e di uno sviluppo ridotto di boschi e foreste. Nel corpo umano l'ozono provoca infiammazioni ai polmoni e ai bronchi. Non appena esposto all'ozono, il nostro corpo cerca di impedirne l'entrata nei polmoni. Questa reazione riduce l'ammontare di ossigeno che inaliamo. Inalare meno ossigeno rende il lavoro del cuore più difficile. Quindi per le persone che già soffrono di disturbi cardio-

vascolari o respiratori, come l'asma, picchi di ozono possono essere debilitanti e persino fatali.

Le reazioni chimiche che producono ozono sono catalizzate dalla radiazione solare, di conseguenza questo inquinante è tipicamente estivo e assume valori di concentrazione più elevati nelle estati contrassegnate da alte temperature e elevata insolazione. L'immissione di inquinanti primari (prodotti dal traffico, dai processi di combustione, dai solventi delle vernici, dall'evaporazione di carburanti, etc.) favorisce quindi la produzione di un eccesso di ozono rispetto alle quantità altrimenti presenti in natura durante i mesi estivi.

Biossido d'azoto

Il biossido di azoto (NO_2) è un gas reattivo, di colore bruno e di odore acre e pungente. L'NO_2 è un importante inquinante dell'aria che, come l'ozono, risulta dannoso per il sistema respiratorio.

L'esposizione a breve termine all'NO_2 può causare diminuzione della funzionalità polmonare, specie nei gruppi più sensibili della popolazione, mentre l'esposizione a lungo termine può causare effetti più gravi come un aumento della suscettibilità alle infezioni respiratorie. L'NO_2 è fortemente correlato con altri inquinanti, come il PM, perciò negli studi epidemiologici è difficile differenziarne gli effetti dagli altri inquinanti. Gli ossidi di azoto giocano un ruolo principale nella formazione di ozono e contribuiscono alla formazione di aerosol organico secondario, determinando un aumento della concentrazione di PM10 e PM2,5.

Il biossido di azoto (NO_2) si forma prevalentemente dall'ossidazione di monossido di azoto (NO). Questi due gas sono noti con il nome di NOx. Le maggiori sorgenti di NO ed NO2 sono i processi di combustione ad alta temperatura (come quelli che avvengono nei motori delle automobili o nelle centrali termoelettriche). L'NO rappresenta la maggior parte degli NOx emessi; per gran parte delle sorgenti, solo una piccola parte di NOx è emessa direttamente sotto forma di NO2 (tipicamente il 5-10%). Fanno eccezione i veicoli diesel, che emettono una proporzione maggiore di NO_2, fino al 70% degli NOx complessivi, a causa del sistema di trattamento dei gas di scarico di questi veicoli.

Benzene

Il benzene (C_6H_6) è un idrocarburo aromatico monociclico, di fatto una sostanza chimica liquida e incolore dal caratteristico odore aromatico pungente. A temperatura ambiente volatilizza assai facilmente, cioè passa dalla fase liquida a quella gassosa.

L'effetto più noto dell'esposizione cronica riguarda la potenziale cancerogenicità del benzene sul sistema emopoietico (cioè sul sangue). L'Agenzia Internazionale

per la Ricerca sul Cancro (IARC) classifica il benzene come sostanza cancerogena di classe I, in grado di produrre varie forme di leucemia.

La maggior parte del benzene oggi prodotto (85%) trova impiego nella chimica come materia prima per numerosi composti secondari, a loro volta utilizzati per produrre plastiche, resine, detergenti, pesticidi, intermedi per l'industria farmaceutica, vernici, collanti, inchiostri, adesivi e prodotti per la pulizia. Il benzene è inoltre contenuto nelle benzine in cui viene aggiunto, insieme ad altri composti aromatici, per conferire le volute proprietà antidetonanti e per aumentarne il "numero di ottani", in sostituzione totale (benzina verde) o parziale (benzina super) dei composti del piombo.

Monossido di carbonio

Il monossido di carbonio (CO), incolore e inodore, è un tipico prodotto derivante dalla combustione. Il CO viene formato in modo consistente durante la combustione di combustibili con difetto di aria e cioè quando il quantitativo di ossigeno non è sufficiente per ossidare completamente le sostanze organiche.

A bassissime dosi il CO non è pericoloso, ma già a livelli di concentrazione nel sangue pari al 10-20% il soggetto avverte i primi sintomi dovuti all'esposizione a monossido di carbonio, quali lieve emicrania e stanchezza. La principale sorgente di CO è storicamente rappresentata dal traffico veicolare (circa l'80% delle emissioni a livello mondiale), in particolare dai gas di scarico dei veicoli a benzina. La concentrazione di CO emessa dagli scarichi dei veicoli è strettamente connessa alle condizioni di funzionamento del motore: si registrano concentrazioni più elevate con motore al minimo e in fase di decelerazione, condizioni tipiche di traffico urbano intenso e rallentato.

Ossidi di zolfo

Gli ossidi di zolfo sono caratterizzati dall'assenza di colore, l'odore acre e pungente e l'elevata reattività a contatto con l'acqua e sono genericamente indicati come SOx. A livello antropico, SO_2 e SO_3 sono prodotti nelle reazioni di ossidazione per la combustione di materiali in cui sia presente zolfo quale contaminante [9].

1.2 Assenza dei dati e relativo completamento

A seguito del download dei file dall'archivio e dell'importazione in apposite strutture in un database temporaneo è stato possibile notare come molti degli agenti inquinanti fossero in realtà assenti per periodi di tempo notevoli (nell'ordine dei mesi) e nei periodi in cui le rilevazioni sono presenti la loro periodicità è poco frequente (una volta al giorno o addirittura una volta a settimana).

Tabella 1.3: Tabella dei valori mancanti

Stazione	*Parametro*	*Valori mancanti*	*% mancante*
2000003	NO_2	13002	17.6
	PM10	70749	95.9
	PM2.5	71138	96.5
	O_3	4569	6.2
2000004	PM10	70769	96.0
	C_6H_6	6031	8.2
	CO	5184	7.0
	NO	5181	7.0
	NO_2	5181	7.0
	NOX	5181	7.0
2000219	PM10	71854	97.4
	NO_2	5153	7.0
	O_3	30496	41.3
	NO	5153	7.0
	PM2.5	71949	97.6
	NOX	5151	7.0
2000229	PM10	71963	97.6
	PM2.5	71924	97.5
	NO_2	31492	42.7
2000232	C_6H_6	33767	45.8
	NO_2	31478	42.7
	PM2.5	71916	97.5
	PM10	71924	97.5
4000152	PM10	72139	97.8
	O_3	10088	13.7
	PM2.5	71471	96.9
	NO_2	2242	3.0
4000155	PM10	70817	96.0
	O_3	34229	46.4
	NO_2	2083	2.8
	NO	1931	2.6
	PM2.5	72498	98.3
	NOX	23025	31.2

Considerando che il progetto di AlmaBike si pone come obiettivo quello di effettuare delle previsioni sull'andamento degli inquinanti ora per ora, si è scelto di utilizzare fra gli agenti precedentemente presi in esame il **Biossido di Azoto** che, come mostrato dalla tabella 1.3 è quello misurato più consistentemente e con la minor quantità di valori mancanti.

Nonostante le rilevazioni di questo inquinante negli archivi siano le piú complete e frequenti, sono comunque presenti tantissimi record mancanti che creano non pochi problemi nelle reti neurali che verranno descritte nei prossimi capitoli. A tale scopo si è scelto di sfruttare tecniche di interpolazione lineare per raggiungere il completamento al 100% della base di dati.

1.2.1 Interpolazione lineare

In matematica, per interpolazione si intende un metodo per individuare nuovi punti del piano cartesiano a partire da un insieme finito di punti dati, nell'ipotesi che tutti i punti si possano riferire ad una funzione $f(x)$ di una data famiglia di funzioni di una variabile reale.

Sia data una sequenza di n numeri reali distinti xk chiamati nodi e per ciascuno di questi xk sia dato un secondo numero yk. Si ponga come obiettivo quello di individuare una funzione f di una certa famiglia tale che sia $f(xk) = yk$ per $k = 1, 2, ...n$.

Tabella 1.4: Dati esempio interpolazione

x	$f(x)$
0	0
1	0.8415
2	0.9093
3	0.1411
4	−0.7568
5	−0.9589
6	−0.2794

Una coppia (xk, yk) viene chiamato punto dato ed f viene detta funzione interpolante, o semplicemente interpolante, per i punti dati. L'interpolazione risolve problemi come: "quanto vale la funzione in $x = 2.5$?"

Esistono molti metodi differenti di interpolazione, l'interpolazione lineare, polinomiale e razionale: ovvero l'interpolazione mediante funzioni razionali e l'interpolazione trigonometrica che si serve di polinomi trigonometrici. Per questioni di efficienza e di semplicità a livello implementativo si è scelto di utilizzare l'in-

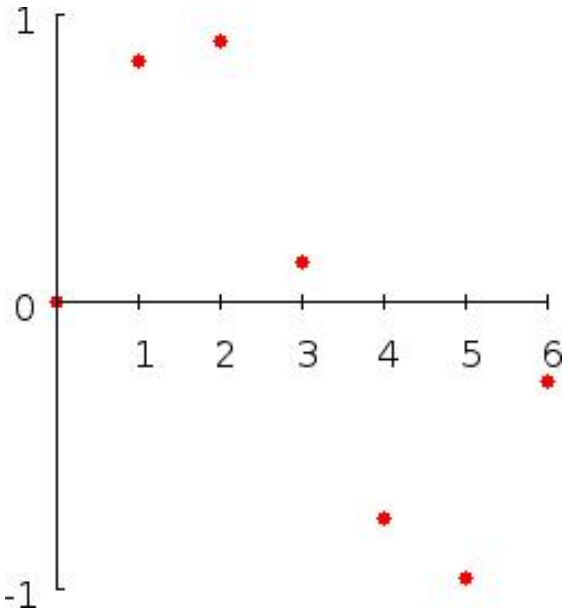


Figura 1.2: Punti del grafo ai quali si vuole applicare l'interpolazione

terpolazione lineare attraverso la libreria Numpy, che verrà descritta nei capitoli implementativi.

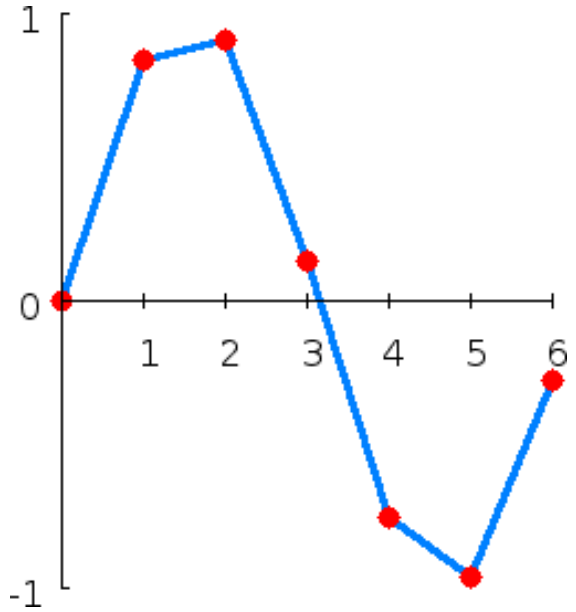


Figura 1.3: Esempio di riempimento mediante interpolazione lineare

Si consideri il suddetto esempio di determinare $f(2.5)$. Poiché 2.5 è il punto medio fra 2 e 3, è ragionevole assegnare a $f(2.5)$ come il valore medio fra $f(2) = 0.9093$ e $f(3) = 0.1411$ in tal modo si ottiene $f(2.5) = 0.5252$. In generale, l'interpolazione lineare per ogni coppia di punti dati consecutivi, (xa, ya) e (xb, yb), definisce come funzione interpolante nell'intervallo $[xa, xb]$ la

$$f(x) = \frac{x - x_b}{x_a - x_b} y_a - \frac{x - x_a}{x_a - x_b} y_b$$

Questa formula può essere interpretata come valutazione della media ponderata [25].

1.3 Manipolazione dei dati

Successivamente al riempimento dei dati mancanti mediante interpolazione lineare si è reso necessario effettuare svariate operazioni per poter passare alla rete neurale i dati.

Le operazioni più importanti effettuate e non standard (ovvero dipendenti dalla tipologia dei dati del problema) sono:

- Unione dei due set di dati, ovvero quello relativo ai dati meteorologici e quello relativo all'inquinamento;
- Associazione della posizione alle stazioni e aggiunta al dataset;
- Codifica delle informazioni sulla data e l'ora dei record di misurazione e aggiunta al dataset
- Codifica vettoriale o tramite OneHotEncoding delle informazioni del vento

1.3.1 Unione dei dati meteorologici con quelli sull'inquinamento

Le varie stazioni ARPAE presenti sul territorio regionale effettuano periodicamente le misurazioni, ma ogni stazione rileva solamente un sottoinsieme degli agenti inquinanti o degli agenti atmosferici presentati precedentemente.

Questo costituisce un problema di natura prettamente implementativa in quanto ogni stazione deve avere necessariamente gli stessi parametri misurati con la stessa frequenza. Un semplice quanto efficace metodo per risolvere questa problematica consiste nell'associare per ogni stazione di rilevamento meteo la stazione degli agenti inquinanti più vicina ad essa (geograficamente) ed eliminare eventuali agenti non presenti in tutto l'insieme delle stazioni risultanti da questa operazione

di unione. Fortunatamente tutte le stazioni meteorologiche effettuano le misurazione degli stessi agenti atmosferici, mentre per quanto riguarda gli agenti inquinanti, per i motivi definiti precedentemente, si considerano solamente il Biossido d'azoto NO_2. Delle 200 e oltre stazioni di rilevamento presenti sul territorio emiliano romagnolo, in seguito a tale operazione si è ottenuto un set di 42 stazioni.

1.3.2 Codifica della posizione delle stazioni

Le varie stazioni di rilevazione sono sparse lungo tutta l'Emilia-Romagna e per ogni provincia si hanno mediamente 3 stazioni di rilevamento. Con queste condizioni i dati per singola città non sono sufficienti per effettuare previsioni sul futuro e soprattutto atte a simulare la quantità di dati che le future biciclette in giro per Bologna genereranno. Un ottimo workaround a questa problematica è stato quello di considerare tutte le stazioni della regione come appartenenti al centro di Bologna e organizzate sotto forma di griglia (vedi figura:1.4).

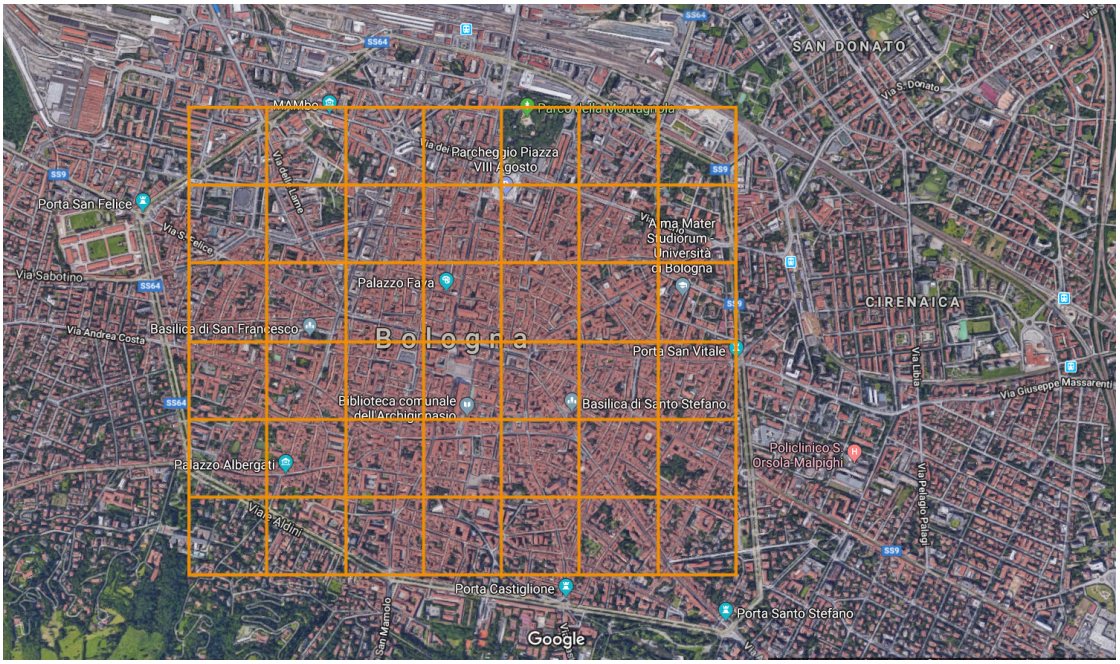


Figura 1.4: Rappresentazione logica delle stazioni a Bologna

A titolo esemplificativo, se una stazione precedentemente aveva come coordinate 50° latitudine e 70° longitudine, una volta traslate diverranno [5,7]. E' importante notare come, data la conformazione della città e il numero di stazioni (42) si sia cercato di coprire nel miglior modo possibile l'intera città adottando

una griglia 6x7 e quindi somigliante il più possibile ad un quadrato. Se il numero delle stazioni fosse stato maggiore e la città avesse avuto una conformazione differente (ad esempio simile ad un rettangolo) sarebbe necessario modificare tale configurazione aumentandone la densità e forma della griglia.

1.3.3 Codifica delle informazioni temporali

Variabili Categoriche

Una variabile categorica è una variabile che contiene valori di etichetta invece di un dato numerico, spesso in un range limitato. Per esempio una variabile categorica può essere "libro", che assume valori "fantasy", "romanzo" e "giallo" oppure la variabile "posto" con valori "primo", "secondo" e "terzo". Alcune categorie possono avere una relazione naturale tra di loro, come la variabile "posto" che ha un ordinamento naturale dei valori.

Il problema nell'uso dei dati categorici è dato dal fatto che la maggior parte dei modelli si aspetta in input valori numerici invece che etichette e ciò richiede la trasformazione di esse in valori numerici, effettuata generalmente in due step: Integer encoding e One-Hot encoding.

Integer encoding

Consiste nell'assegnare a ogni possibile valore di una variabile categorica un numero intero, facendo così nel caso di "libro" avremmo: "fantasy" $\rightarrow$ 1, "romanzo" $\rightarrow$ 2, "giallo" $\rightarrow$ 3. Nel caso di variabili ordinali come "posto" può essere sufficiente questo step, dato che l'algoritmo utilizzato potrebbe essere in grado di comprendere la relazione che intercorre tra i valori.

One-Hot encoding

Nel caso di variabili categoriche tra le quali non esiste alcune relazione ordinale viene utilizzata la tecnica del one-hot encoding, perché con il solo integer encoding si introdurrebbero relazioni di ordine naturale tra le categorie, influenzando negativamente i risultati. Consiste nel trasformare ogni variabile integer-encoded in più variabili binarie, tante quanti sono i possibili valori differenti della codifica precedente, impostando il valore "1" in corrispondenza del valore assunto dalla variabile e "0" per gli altri valori [16].

One-Hot Encoding del tempo

Si è deciso di effettuare un codifica One-hot sulle informazioni temporali, soprattutto per introdurre un'informazione di circolarità e per rappresentare situa-

zioni che si ripetono temporalmente, come il traffico di punta in certe ore e in certi giorni della settimana, oppure gli esodi estivi ed invernali, ragion per cui la codifica One-hot è stata fatta sui giorni della settimana, sui mesi e sulle ore.

Tabella 1.5: Dato temporale originale

DateTime
2017-12-30 23:00:00
2017-12-31 23:00:00

Tabella 1.6: Dato temporale codificato ad interi

Day
6
7

Tabella 1.7: Dato temporale codificato One-Hot

D_1	*D_2*	*D_3*	*D_4*	*D_5*	*D_6*	*D_7*
0	0	0	0	0	1	0
0	0	0	0	0	0	1

1.3.4 Codifica delle informazioni del vento

Il vento è un agente atmosferico molto significativo nell'ambito della meteorologia in quanto determina in modo significativo la variazione della concentrazione di tutti gli altri agenti. È opportuno pensare come le informazioni sulla velocità e sulla direzione del vento debbano essere opportunamente manipolate per esprimere nel modo più semplice ma significativo possibile la loro valenza espressiva. Di seguito verranno illustrate due differenti modalità con le quali tali informazioni sono state modificate, sono entrambe molto valide e largamente utilizzate. È importante sottolineare come queste siano mutualmente esclusive.

One-Hot Encoding del vento

Analogamente al tempo, anche per la direzione del vento può essere sfruttata la codifica One-Hot, tuttavia si rende necessario effettuare una prima semplificazione

per evitare il proliferarsi di 360 valori distinti. Tenendo in considerazione il range di valori che la direzione del vento può assumere (da 0° a 360°) si è deciso di rapportare l'intervallo nelle 8 direzioni cardinali più comuni: Est, Nord-Est, Nord, Nord-Ovest, Ovest, Sud-Ovest, Sud, Sud-Est. Di seguito la funzione utilizzata che sfrutta l'operazione di modulo e divisione:

$$f(angle) = angle \bmod 360 : 45$$

In questo modo, ogni possibile angolo viene approssimato a quello più vicino tra: 0°, 45°, 90°, 135°, 180°, 225°, 270°, 315°. Eseguita tale operazione, l'operazione di One-hot encoding della direzione risulta analoga a quella del tempo. Naturalmente la velocità del vento, con questa codifica, rimane invariata.

Codifica vettoriale del vento

Una codifica più interessante ed espressiva è la codifica delle informazioni sul vento in termini di vettori. Sfruttando i vettori è possibile combinare l'informazione della velocità con quella della direzione in una nuova informazione sicuramente più rappresentativa in termini numerici.

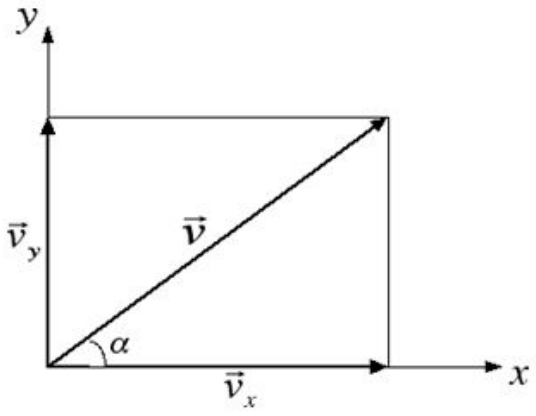


Figura 1.5: Rappresentazione di un generico vettore

In generale, posto un vettore $\vec{V}$ nel piano e scelto un opportuno sistema di riferimento cartesiano, si possono individuare le due componenti x e y del vettore; si indicheranno con $\vec{V_x}$ e $\vec{V_y}$ le due proiezioni del segmento orientato lungo i due assi [18]. Come è possibile notare in figura 1.5, il vettore risulta inclinato di un angolo α rispetto all'asse orizzontale e per questo motivo i moduli delle due componenti

x e y risultano per ragioni di trigonometria:

$$\left|\vec{V_x}\right| = \left|\vec{V}\right| \cdot \cos\alpha$$

$$\left|\vec{V_y}\right| = \left|\vec{V}\right| \cdot \sin\alpha$$

Nello specifico la direzione del vento definisce l'angolo del vettore, mentre la velocità ne costituisce la lunghezza. In tal modo abbiamo modificato due informazioni che per una persona umana sono intuitivamente correlate fra loro, mentre per una macchina che capisce solo numeri e basa le sue intuizioni su questi ultimi non lo è altrettanto.

Arrivati alla fine di questo capitolo i dati a disposizione sono pronti per essere dati in pasto alla rete neurale, le cui fondamenta verranno descritte nel prossimo capitolo.

Capitolo 2

Intelligenza artificiale per il forecasting

In questo capitolo verrà descritta in maniera approfondita che cos'è l'intelligenza artificiale e le reti neurali che verranno sfruttate per effettuare delle previsioni sugli agenti inquinanti nella città di Bologna. Verranno descritte le fondamenta principali di una rete neurale ed in particolare i parametri e iperparametri che ne definiscono il comportamento.

2.1 Che cos'è l'intelligenza artificiale

L'intelligenza artificiale è l'abilità di un computer ad acquisire e rappresentare la conoscenza, apprendere e sviluppare una capacità decisionale autonoma che gli consenta di risolvere i problemi e affrontare i fenomeni di un ambiente operativo complesso. In modo semplicistico potremmo definire l'intelligenza artificiale come l'abilità di un sistema tecnologico di risolvere problemi o svolgere compiti e attività tipiche della mente e delle abilità umane. Guardando al settore informatico, potremmo identificare l'AI – Artificial Intelligence - come la disciplina che si occupa di realizzare macchine (hardware e software) in grado di "agire" autonomamente al fine di risolvere problemi e decidere come e quali azioni intraprendere. Dare una definizione esatta di Intelligenza Artificiale è un compito arduo ma, osservandone le evoluzioni storiche, si è in grado di tracciarne i contorni e quindi di fare alcune importanti classificazioni.

2.1.1 Una prima classificazione

Prendendo come base di partenza il funzionamento del cervello umano e pur sapendo che ancora oggi non se ne comprende ancora a fondo l'esatto funziona-

mento, l'Intelligenza Artificiale dovrebbe saper emulare alcune azioni tipiche del cervello umano:

- agire umanamente in modo indistinto rispetto ad un essere umano;
- pensare umanamente risolvendo un problema con funzioni cognitive;
- pensare razionalmente sfruttando cioè la logica di un essere umano;
- agire razionalmente avviando un processo per ottenere il miglior risultato atteso in base alle informazioni a disposizione, che è ciò che un essere umano, spesso anche inconsciamente, compie abitualmente.

Queste considerazioni sono di assoluta importanza perché permettono di classificare l'AI in due grandi "filoni" di indagine, ricerca e sviluppo in cui la comunità scientifica si è trovata concorde, quello dell'AI debole e dell'AI forte:

Intelligenza Artificiale debole (weak AI): Identifica sistemi tecnologici in grado di simulare alcune funzionalità cognitive dell'uomo senza però raggiungere le reali capacità intellettuali tipiche di quest'ultimo, parliamo di programmi matematici di problem-solving con cui si sviluppano funzionalità per la risoluzione dei problemi o per consentire alle macchine di prendere decisioni.

Intelligenza Artificiale forte (strong AI): In questo caso si parla di "sistemi sapienti" (alcuni scienziati si spingono a dire addirittura "coscienti di sé") che possono quindi sviluppare una propria intelligenza senza emulare processi di pensiero o capacità cognitive simili all'uomo, sviluppandone una propria in modo autonomo.

Fino alla fine degli anni '80, gli studiosi hanno creduto fortemente nell'AI forte. Un esempio su tutti sono i robot di Isaac Asimov, scrittore che ha consegnato ai posteri un'opera immane dove i protagonisti sono dei robot che ragionano come un essere umano e in determinate situazioni in modo superiore ad esso. I funzionalisti, ovvero gli studiosi che più hanno creduto nell'intelligenza artificiale, sostengono quindi che è possibile creare una macchina artificiale che sia, in tutto e per tutto, uguale e superiore alla mente umana. E come si fa a stabilire se un sistema artificiale sia o meno intelligente? Tramite il test di Turing. Se una macchina supera tale test, allora può scientificamente definirsi intelligente. Tale test è semplicissimo: Un uomo chiuso in una stanza pone delle domande attraverso una tastiera remota ad un calcolatore. Se l'uomo non riesce a capire chi dall'altra parte della stanza gli fornisca le risposte, allora siamo in presenza di un calcolatore intelligente. Anche se nessuna macchina ha mai superato con successo tale test, i fervidi sostenitori dell'intelligenza artificiale forte affermano che è semplicemente una questione di tempo. È forse la teoria più affascinante e contemporaneamente quella che da un punto di vista filosofico e morale pone più interrogativi. Potrà mai

una macchina produrre opere d'arte migliori di quelle umane o risolvere questioni filosofiche?.

I sostenitori della concezione debole, come Hubert Dreyfus, affermarono un concetto semplicissimo: l'intelligenza artificiale non è una vera e propria intelligenza, come faceva pensare invece il test di Turing. Dreyfus, in particolare, contestò nel corso degli anni il concetto di AI forte. Il concetto dal quale si parte è completamente errato. Un calcolatore utilizza dati attraverso delle regole ben precise, ma è capace quindi di cogliere solo alcuni aspetti della realtà, al contrario della mente che ragiona cogliendo i vari elementi nella loro totalità. John Searle ideò un test, denominato "test della stanza cinese" da contrapporre al famoso test di Turing. Lo studioso dimostrò che una macchina, pur avendo superato con successo il primo test, non può essere definita intelligente. Questo perché il calcolatore ha svolto un'azione su una serie di dati che gli sono stati consegnati. La macchina, grazie a un opportuno programma, manipola le parole ma non ne comprende assolutamente il senso. La finalità di Searle era chiara: senza comprensione del significato del linguaggio una macchina non potrà mai essere definita intelligente. Quindi in un'ipotetica disputa tra forte e debole, qual è l'Intelligenza vincente? Le moderne teorie hanno superato questa contrapposizione offrendo una nuova risposta a tale domanda. Una macchina potrà essere definita intelligente solo quando potrà riprodurre il funzionamento del cervello a livello cellulare [23].

2.1.2 Machine Learning e Deep Learning

La classificazione AI debole e AI forte sta alla base della distinzione tra Machine Learning e Deep Learning, due ambiti di studio che rientrano nella più ampia disciplina dell'intelligenza Artificiale che meritano di essere contraddistinti. Ciò che caratterizza l'Intelligenza Artificiale da un punto di vista tecnologico e metodologico è il metodo di apprendimento, ovvero il modo con cui l'intelligenza diventa abile in un compito o azione. Questi metodi di apprendimento sono ciò che distinguono Machine Learning e Deep Learning e sono in gergo chiamati "modelli".

Machine Learning

Si tratta di un'insieme di metodi per consentire al software di adattarsi, metodi attraverso i quali si permette alle macchine di apprendere in modo che possano poi svolgere un compito o una attività senza che siano preventivamente programmati, ovvero senza che vi sia un sistema che stabilisca come deve comportarsi e reagire. In altre parole, si tratta di sistemi che servono ad "allenare" l'AI affinché imparando, correggendo gli errori, allenando sé stessa, possa poi svolgere autonomamente un determinato compito od attività.

Deep Learning

In questo caso parliamo di modelli di apprendimento ispirati alla struttura ed al funzionamento del cervello biologico e di conseguenza della mente umana. Se il Machine Learning può essere definito come il metodo che "allena" l'AI, il Deep Learning è quello che permette di emulare la mente dell'uomo. In questo caso, però, il modello matematico da solo non basta, il Deep Learning necessita di reti neurali artificiali progettate ad hoc (deep artificial neural networks) e di una capacità computazionale molto potente capace di "reggere" differenti strati di calcolo e analisi (che è quello che succede con le connessioni neurali del cervello umano) [13].

Quest'ultima tipologia sarà quella che concretamente verrà impiegata nel corso di questo progetto in quanto la difficoltà del problema e la quantità di dati a disposizione necessitano di modelli atti ad comprendere ed in particolare apprendere nel modo più approfondito possibile le relazione fra le varie tipologie di dato tenendo in considerazione anche lo scorrere del tempo. Una tipologia specifica facente parte della branca di applicazioni del Deep Learning si identifica in quelle che sono chiamate reti neurali, ovvero dei modelli matematici composti da neuroni "artificiali".

2.2 Reti Neurali Artificiali

Una rete neurale artificiale (Artificial Neural Network ANN), in gergo chiamata rete neurale è un sistema dinamico avente la topologia di un grafo orientato avente come nodi, i neuroni artificiali ed archi, i pesi sinaptici. Il termine rete è riferito alla topologia dei collegamenti tra i neuroni. La rete può essere vista come una scatola nera di cui si può ignorare il funzionamento, che associa un input a un output. A livello scientifico non è altro che un modello matematico che applica una funzione $f(input, pesi)$ il cui comportamento varia in funzione dei pesi e naturalmente dell'input, senza specificare la forma della funzione f.

2.2.1 Tecniche di apprendimento

Nell'ambito dell'intelligenza artificiale vi sono svariate tecniche di apprendimento, ovvero metodologie che consentono al sistema di imparare dai dati forniti, per semplicità di trattazione verranno descritte le tecniche più note in letteratura dalle quali sono state derivate le altre nel corso degli anni.

Apprendimento supervisionato

L'Apprendimento supervisionato è una tecnica di apprendimento che mira a istruire un sistema informatico in modo da consentirgli di risolvere dei compiti in automatico. In questa modalità si fornisce alla rete un insieme di dati in ingresso I (tipicamente in forma vettoriale) e un insieme di dati dati in uscita O. A seconda che questi ultimi siano dei valori continui o meno ci si ritrova di fronte ad un problema di regressione o classificazione (anche comunemente chiamata etichettatura). Si definisce supervisionato in quanto oltre ai dati viene definita anche la funzione $f(x)$ che associa ai dati di ingresso I_x i dati in uscita U_k.

Tutti gli algoritmi di apprendimento supervisionato partono dal presupposto che se forniamo all'algoritmo un numero adeguato di esempi l'algoritmo sarà in grado di creare una funzione $h1$ che approssimerà la funzione h. Fornendo dei dati in ingresso mai analizzati la funzione dovrebbe essere in grado di fornire delle risposte in uscita simili a quelle fornite da h e quindi corrette. In realtà questo comportamento non si verifica mai esattamente, basta vedere le dinamiche caotiche legate al tempo. Si può facilmente intuire che il buon funzionamento di questi algoritmi dipende in modo significativo dai dati in ingresso (vedi 2.2.5).

Esempio: se un medico ha interesse nel sapere se un paziente è malato o meno di una determinata malattia, alla macchina vengono consegnate una serie di casistiche precedenti, dove l'esito malato/sano è già stato definito. Sulla base di tale casistiche, si allena il sistema a riconoscere appunto l'esito in nuovi casi non ancora capitati.

Apprendimento non supervisionato

Nel caso di apprendimento non supervisionato, la logica di classificazione non viene consegnata alla macchina, vengono forniti solo i dati di input e sarà l'algoritmo ad assegnare la classe di appartenenza. Se ad esempio si ha una popolazione da classificare in gruppi, a seconda di caratteristiche definite, si lascia al programma la definizione dei raggruppamenti.

Reinforcement learning

Il reinforcement learning è una tecnica di apprendimento che basa il suo funzionamento sull'interazione con l'ambiente circostante nel quale l'agente dotato di intelligenza artificiale viene fatto operare. Si differenzia con gli altri approcci di apprendimento automatico in quanto all'algoritmo non viene esplicitamente spiegato come eseguire un'attività. L'agente, che potrebbe essere un'auto a guida autonoma o un programma che gioca a scacchi, interagisce con il suo ambiente, ricevendo una ricompensa ("reward") in base alle sue azioni: ad esempio se arriva

a destinazione in sicurezza o vince una partita. Altrimenti, l'agente riceve una penalità per l'esecuzione scorretta, come andare fuori strada o essere sotto scacco matto. L'agente possiede come unico obiettivo iniziale quello di prendere le decisioni che massimizzino la propria ricompensa.

2.2.2 Architettura di una rete neurale

Fino ad ora si è genericamente parlato di una rete neurale in termini di nodi e archi che insieme vanno a costituire un grafo connesso al fine di realizzare una struttura che assomigli il più possibile alla rete di neuroni del cervello umano. In realtà, una rete neurale è una struttura incredibilmente più semplice di un cervello: i neuroni di una rete neurale sono soltanto dei numeri, il cui valore può andare da 0 a 1. Vengono chiamati neuroni non perché sono simili ai singoli neuroni del cervello, ma per via del modo in cui sono organizzati: essi sono infatti raggruppati in layers, o livelli.

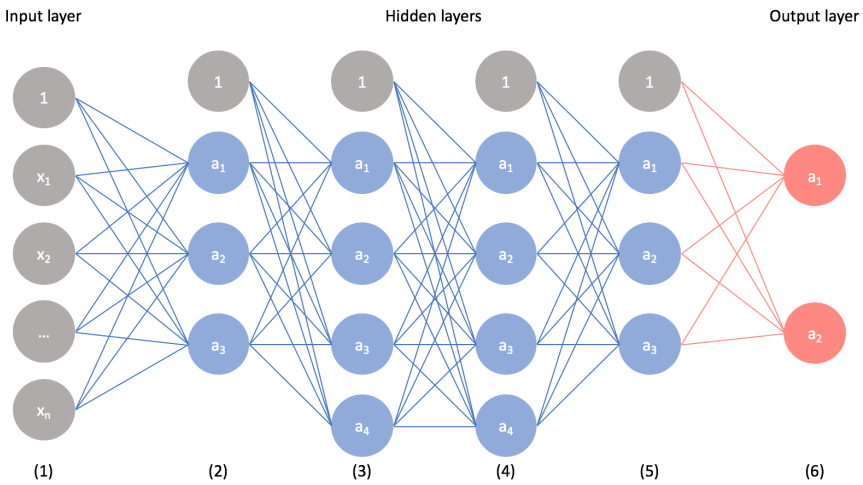


Figura 2.1: Architettura di una rete neurale con hidden layer [24]

I neuroni del primo livello sono detti neuroni di input, e sono quelli incaricati di tradurre il dato che viene fornito come input, come ad esempio una foto o un testo, in un dato che la rete neurale può comprendere. Nel caso di un'immagine, ogni neurone di input corrisponderà a un pixel, e ci sarà un numero che rappresenta il colore di quel pixel. I neuroni dell'ultimo livello sono detti neuroni di output e in questo caso ogni neurone corrisponde a una delle possibili risposte che la rete neurale può dare. Ad esempio, se la nostra rete deve riconoscere che animale è

presente in una foto, avremo un neurone di output che corrisponde all'animale "leone", uno per "criceto", uno per "pesce" e così via. Fra il livello di input e il livello di output ci sono uno o più livelli nascosti (hidden layer), che sono quelli dove avvengono le trasformazioni dei dati: ogni neurone di un livello è collegato a tutti i neuroni del livello immediatamente precedente e a tutti quelli del livello immediatamente successivo, i livelli sono quindi completamente interconnessi con quelli adiacenti. Questi collegamenti hanno un valore numerico chiamato peso, che definisce una misura di quanto importante sia il collegamento fra una specifica coppia di neuroni.

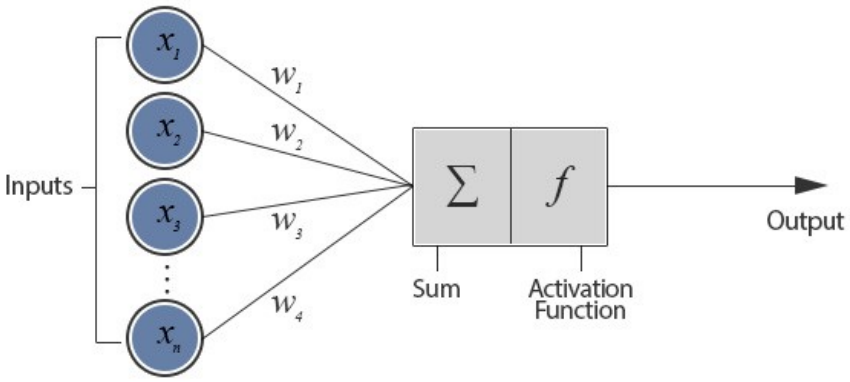


Figura 2.2: Rappresenzione di un neurone artificiale

Nell'immagine 2.2 è possibile osservare le componenti principali di un neurone artificiale, in particolare viene evidenziato come un neurone di in un livello intermedio riceva in ingresso dagli archi in un uscita di tutti i neuroni del livello precedente i vari input, ognuno col proprio peso. La prima operazione che viene effettuata è una sommatoria dei pesi moltiplicati per i vari input ricevuti al fine di ottenere un unico peso per quel determinato neurone, solitamente rappresentato con U.

$$U = \sum_{k=1}^{n} x_i \cdot w_i$$

Tale valore verrà in seguito passato alla funzione di attivazione e il risultato propagato al livello successivo.

Il funzionamento operativo appena descritto è chiamato *Feed Forward Propagation NN*, ovvero le connessioni tra le unità non formano cicli, differenziandosi dalle *Feedback Propagation NN*. Le informazioni si muovono solo in una direzione, partendo dai nodi d'ingresso, attraversando i nodi nascosti fino ad arrivare ai nodi di uscita. I neuroni ad ogni istante temporale non hanno cognizione degli input

ricevuti in passato ma hanno una visione dei soli dati attualmente in loro possesso. Da un punto di vista onnisciente, non accade altro che un continuo aggiornarsi di pesi per cercare di approssimare nel modo più accurato possibile la funzione che descrive genericamente il problema. Questo processo è chiamato *processo di apprendimento*.

Feedback Propagation Neural Network

Mentre si sta leggendo un testo, come ad esempio questa tesi, il cervello umano mantiene persistente nella memoria temporale le varie parole, ed elaborandole consente di comprendere il significato delle frasi durante la lettura.

Le reti neurali tradizionali non operano in questo modo, bensì ad ogni iterazione buttano via, ad eccezione dei pesi, qualsiasi informazione. Le reti neurali con *retropropagazione dell'errore* (*Feedback Propagation*) o *ricorrenti* adottano dei cicli affinché ad ogni iterazione l'output di un neurone non sia solamente l'input per il livello successivo per l'iterazione corrente ma anche l'input per se stesso all'iterazione successiva. Una RNN può essere pensata come più copie della stessa rete, ognuna delle quali invia messaggi alla successiva.

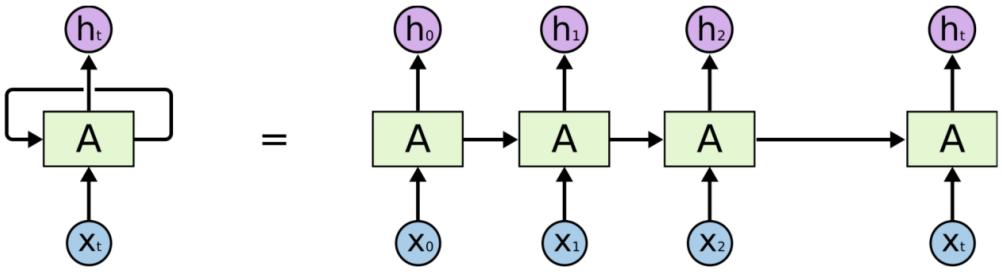


Figura 2.3: Rappresentazione di un neurone artificiale di una rete neurale ricorrente in forma compatta ed estesa

Osservando la figura 2.3 si nota subito la natura a catena intrinseca delle reti neurali ricorrenti, facilmente associabile a problemi che operano su sequenze e liste. Sono l'architettura naturale da utilizzare per problemi come il riconoscimento vocale, la modellazione linguistica, la traduzione e ovviamente per problemi di sequenze temporali come la previsione degli inquinanti.

2.2.3 Funzione di attivazione

Come anticipato, il risultato della sommatoria che precede la funzione di attivazione potrebbe essere qualsiasi valore, da $-\infty$ a $+\infty$, questo fa sorgere un problema di fondo per i neuroni dei livelli successivi: il neurone che fornisce l'input è attivo o no? La funzione di attivazione è una funzione il cui compito è controllare il valore in uscita prodotto da un neurone e definire se le connessioni esterne dovrebbero considerare questo neurone attivato o meno. In letteratura ne sono stati definiti molti tipi, dalle più semplici alle più complesse; di seguito verranno illustrate le più note.

Funzione Heaviside o Threshold

La *funzione Heaviside*, più comunemente chiamata *funzione soglia*, è une delle funzioni più semplici in quanto possiede internamente una soglia superata la quale il risultato restituito sarà 1, altrimenti 0.

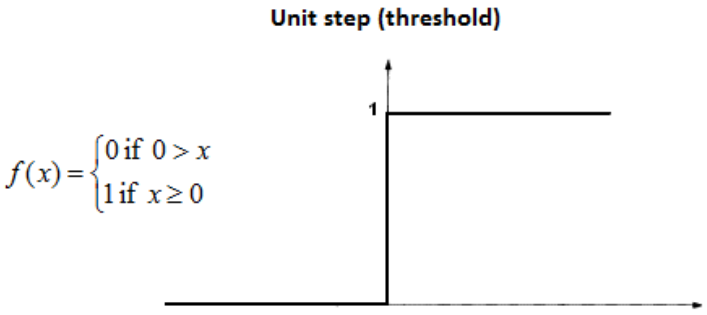


Figura 2.4: Funzione con treshold

Una funzione semplice può andar bene per problemi la cui generalizzazione è facilmente raggiungibile, tuttavia potrebbero insorgere alcuni problemi di convergenza; Immaginando uno scenario di classificazione capitare che vi siano più neuroni di output attivi quando in realtà il risultato atteso è di un solo neurone di output attivo per singolo input. Dalla necessità di avere a disposizione una funzione che non sia binaria è stata definita la funzione lineare.

Funzione lineare

La funzione di attivazione lineare è una funzione in cui l'attivazione è proporzionale all'input fornito e non possiede un comportamento a scalino come la funzione precedente.

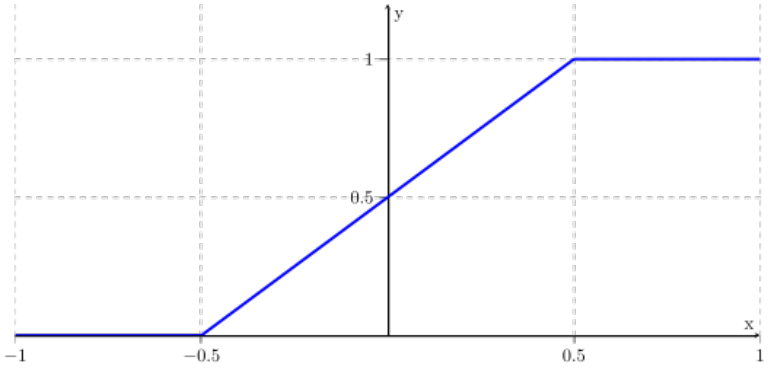


Figura 2.5: Funzione lineare

Purtroppo anche questa funzione presenta dei difetti, questi emergono soprattutto quando si ha a che fare con problemi molto complessi dove è necessario che la rete neurale sia composta da più livelli nascosti. Si assuma come scenario una rete neurale dove tutti i livelli sono configurati per utilizzare funzioni di attivazione lineari. Di livello in livello l'attivazione viene ricalcolata e passata al livello successivo come input, che verrà a sua volta ricalcolata mediante la stessa funzione nel livello successivo. Non importa quanti strati si definiscano, se tutti sono di natura lineare, la funzione di attivazione finale dell'ultimo livello non è altro che una semplice funzione lineare dell'input del primo livello. Ciò significa che questi N livelli possono essere sostituiti da un singolo livello. La flessibilità offerta dall'utilizzare più strati di neuroni viene annullata, indipendentemente da come questi vengano configurati. Una combinazione di funzioni lineari è a sua volta una funzione lineare.

Funzione Sigmoid

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

Uno dei vantaggi di questa funzione è la sua natura non lineare, di conseguenza le combinazioni di questa funzione sono anch'esse non lineari rendendo possibile utilizzare più livelli nascosti.

Si noti come tra i valori X da -2 a 2, i valori Y corrispondenti sono molto ripidi, il che significa che qualsiasi piccola variazione nei valori di X in quella regione comporterà un cambiamento significativo nei valori di Y; la funzione ha la tendenza a portare i valori Y ad entrambe le estremità della curva, rendendola ottima per i problemi di classificazione.

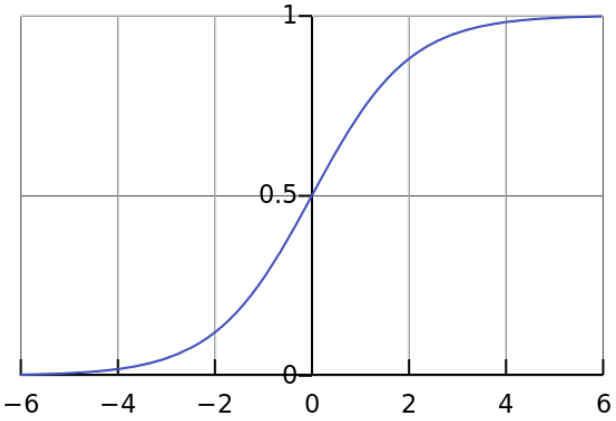


Figura 2.6: Funzione Sigmoid

Le funzioni sigmoidali sono le funzioni di attivazione più utilizzate ad oggi, tuttavia non sono esenti da problemi. Alle estremità la funzione tende ad essere molto meno reattiva a fronte di modifiche in X, questo comporta che il gradiente in quella regione sarà molto basso dando origine al *vanishing gradient problem*: la rete neurale rifiuta di apprendere ulteriormente o è drasticamente lenta.

Funzione Rectifier Linear Unit (ReLU)

$$A(x) = max(0, x)$$

La funzione ReLU restituisce il valore passato in ingresso se positivo, altrimenti restituisce 0.

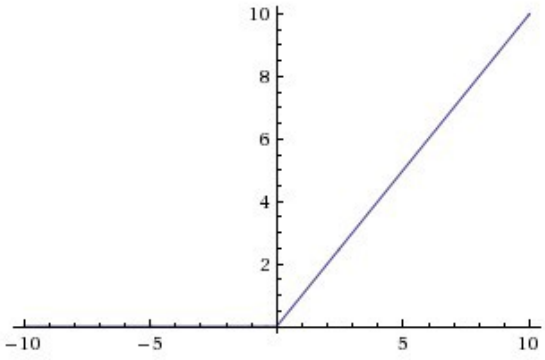


Figura 2.7: Funzione con ReLU

A prima vista questa funzione sembrerebbe avere gli stessi problemi della lineare ma sorprendentemente ReLU è di natura non lineare e le sue combinazioni sono anch'esse non lineari; questo comporta la possibilità di definire più livelli. Una caratteristica tipica di ReLU è quella di limitare l'attivazione nel numero maggiore possibile di neuroni. In una rete neurale di grandi dimensioni con molti dati, usare Sigmoid farà sì che quasi tutti i neuroni si attivino e l'output della rete dipenda da gran parte di essi. Uno scenario del genere viene descritto come una rete con attivazione densa e di conseguenza onerosa; ReLU opera in modo tale che pochi neuroni nella rete si attivino, rendendo così le attivazioni sparse ed efficienti e la rete stessa più leggera.

ReLU è computazionalmente più efficiente rispetto a sigmoid non solo per il modo in cui opera ma anche perché si avvale di operatori matematici più semplici da elaborare; in un contesto di reti neurali a più livelli la differenza in termini di tempo è considerevole.

ReLU è perfetto? Per valori negativi di X il corrispondente valore Y viene convertito a 0, questo comporta che il gradiente diventi 0 anch'esso. Per le attivazioni in quella regione, i pesi non verranno aggiornati e i neuroni che entrano in questo stato smetteranno di rispondere alle variazioni di input; tale problema è chiamato *dying ReLU*. Vi sono varianti che arginano il problema semplicemente lasciando che il gradiente sia diverso da zero e di recuperare durante iterazioni successive [28].

2.2.4 Fasi di apprendimento e suddivisione dei dati

Nell'ambito delle reti neurali si possono individuare tre fasi operative, ognuna con scopi ben precisi. La prima fase è la fase di *training*, ovvero la fase in cui si forniscono i dati di input e i dati di output attesi e la rete ne osserva le relazioni, aggiornando i pesi dei neuroni. Nella seconda fase - *evaluation* - si valutano le performance ottenute fornendo alla rete solamente i dati in input, chiedendole di fornire i risultati; Tali risultati vengono confrontati coi dati di output già in possesso per confrontarne le performace. La terza fase di *prediction* è quella più interessante in quanto si opera su dati nuovi e si richiede alla rete di effettuare previsioni.

Ad ogni fase vengono forniti i dati corrispondenti, il dataset è suddiviso in due blocchi principali detti *training set* e *test set*. Il primo viene utilizzato per allenare la rete neurale, imparare dai dati le loro relazioni e valutarne la prestazioni dell'allenamento, mentre il secondo blocco viene sfruttato per predire dei risultati reali.

Il *training set* viene a sua volta suddiviso in due insiemi, il primo per l'allenamento vero e proprio mentre il secondo, chiamato *validation set* è utilizzato

per verificare che l'allenamento non presenti problemi di overfitting o underfitting (vedi 2.8). Tipicamente viene effettuata una suddivisione in 80% per il training e 20% per la validazione.

2.2.5 Overfitting e Underfitting

La sfida principale nell'ambito del machine learning è garantire il funzionamento ottimale del modello utilizzato su dati nuovi ovvero mai visti da esso durante la fase di allenamento. Questo processo è chiamato generalizzazione.

Un buon modello di machine learning si pone come obiettivo la minimizzazione dell'errore sui dati di allenamento, tale errore viene chiamato *training error*, ma al contempo anche l'errore di generalizzazione o *test error*, che equivale all'errore previsto su dati di input nuovi [4].

Come anticipato, una buona quantità di dati è un presupposto principale per ottenere buoni risultati, tuttavia, a seconda di come questi vengono suddivisi e forniti alla rete neurale possono far sorgere due problemi noti come *Overfitting* e *Underfitting*.

Overfitting

L'Overfitting occorre quando un modello impara troppo dai dati forniti durante l'allenamento risultando in due conseguenze negative. Per prima cosa un modello complesso richiederà un tempo sempre maggiore per essere eseguito. In secondo luogo, un modello complesso può ottenere ottimi risultati sui dati di training, e risultati inferiori su quelli di test, perché esso non sarà in grado di generalizzare, ma avrà imparato tutte le relazioni tra i dati di training. In figura 2.8 abbiamo un esempio di overfitting: il grafico della funzione di loss decresce sia sul set di test che su quello di training, però oltre un certo punto (la soglia della capacità ottima), l'errore di generalizzazione inizia a crescere a causa dell'overfitting.

Per risolvere il problema dell'overfitting è necessario un modo per esprimere la complessità di un modello. Considerato che un modello è semplicemente un vettore di pesi, si può esprimere la sua complessità indicando il numero di pesi diversi da zero, cosicché avendo 2 modelli *M1* e *M2* con le stesse performance a livello di loss, è opportuno scegliere il modello che ha il numero minore di pesi diversi da zero [1].

Underfitting

L'Underfitting si ha quando il modello non riceve abbastanza dati in input e non riesce a minimizzare sufficientemente l'errore di allenamento e a generalizzare dati nuovi. In generale un modello che soffre di underfitting è un modello inadatto.

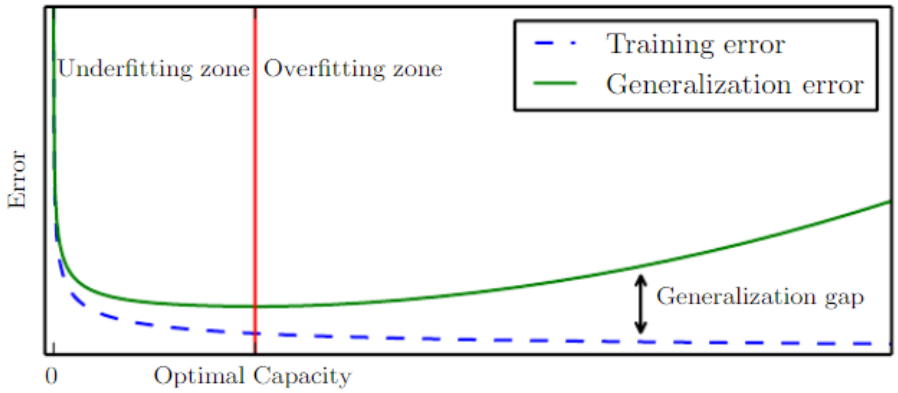


Figura 2.8: Relazione tra capacità ed errore

2.3 Configurazione della rete neurale

La rete neurale possiede svariate impostazioni che possono influenzare in maniera considerevole le sue performance, si possono suddividere in due macro categorie: parametri e iperparametri.

2.3.1 Parametri

Un parametro di un modello è una variabile di configurazione interna alla rete neurale, come ad esempio un peso interno ad un neurone; il suo valore può essere stimato in base ai dati. I parametri sono necessari per consentire al modello di effettuare predizioni e generalmente non sono settati mai manualmente, bensì tramite un algoritmo di ottimizzazione che li determina dinamicamente durante le fasi di allenamento della rete neurale. Questo algoritmo si basa sull'ottimizzazione del gradiente.

2.3.2 Ottimizzazione del gradiente

Ottimizzare consiste nel minimizzare o massimizzare una funzione $f(x)$ alterando i valori di x. Solitamente tutti i problemi di ottimizzazione sono posti come minimizzazione di $f(x)$ e la massimizzazione è ottenuta minimizzando $-f(x)$. La funzione da minimizzare o massimizzare viene chiamata funzione obiettivo e quando si tratta di minimizzare è anche definita come *funzione di loss* o *funzione di errore*.

Supponiamo di avere una funzione $y = f(x)$ con x e y valori reali. La derivata di questa funzione si esprime con $f'(x)$ o $\frac{dx}{dy}$ e rappresenta il coefficiente angolare o la pendenza di $f(x)$ nel punto x. Può essere usata per specificare come ridimensionare

un piccolo cambiamento nell'input per ottenere un cambiamento corrispondente nell'output:

$$f(x + \epsilon) \approx f'(x) + \epsilon \cdot f(x)$$

Risulta comodo utilizzare la derivata per minimizzare una funzione perché ci spiega come cambiare x per ottenere un piccolo miglioramento su y. Per esempio, dato che $f(x - \epsilon \cdot segno(f'(x))$ è minore di $f(x)$ per ϵ abbastanza piccoli, possiamo minimizzare $f(x)$ spostando x in piccoli passi del segno opposto della derivata. Questa tecnica è chiamata discesa del gradiente, mostrata in figura 2.9.

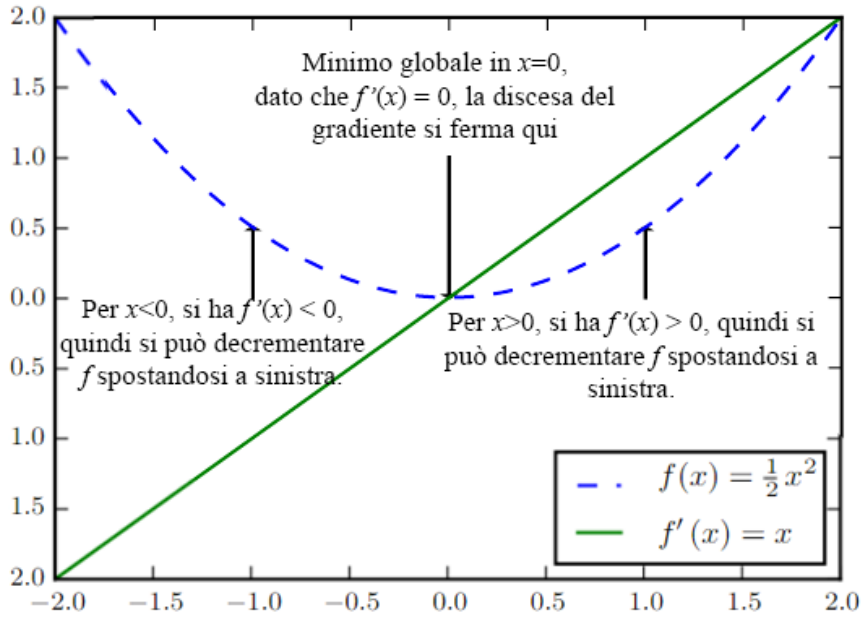


Figura 2.9: Funzionamento dell'algoritmo di discesa del gradiente

Quando $f'(x) = 0$ la pendenza è 0 e quindi la derivata non fornisce informazioni sulla direzione in cui muoversi. I punti in cui ciò succede sono detti punti critici, mostrati in figura 2.10, e possono essere di minimo locale, dove la funzione non può più decrescere per passi infinitesimali, di massimo locale, quando non può più crescere con passi infinitesimali oppure possono essere punti di sella, che non sono nè massimi nè minimi.

Il punto che ottiene il valore in assoluto più basso della funzione $f(x)$ è detto minimo globale. Può esserci un solo minimo globale o più di uno se equivalenti, mentre può esserci un minimo locale non ottimo globalmente. Nell'ambito del deep learning la sfida è ottimizzare una funzione con molti minimi locali non ottimale, punti di sella circondati da zone piatte e con input multidimensionali.

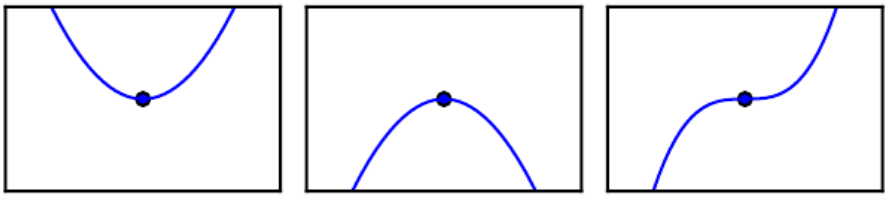


Figura 2.10: Minimo locale, massimo locale e punto di sella

Occorre quindi accontentarsi di trovare un valore di f basso, ma certamente non il minimo. Come già detto, spesso è necessario minimizzare funzioni con più input: $f : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$ e perché il concetto di minimizzazione abbia senso deve esserci un solo output.

Per le funzioni con input multipli si utilizza il concetto di derivata parziale. La derivata parziale $\frac{\partial}{\partial x_i} f(x)$ misura il cambiamento di f quando solo la variabile x_i incrementa nel punto x. Il gradiente è definito come il vettore che ha come componenti le derivate parziali di una funzione, $\nabla_x f(x)$. L'elemento i del gradiente è la derivata parziale di f rispetto ad x_i. In più dimensioni, i punti critici corrispondono ai punti in cui ogni elemento del gradiente vale 0. Sapendo che il gradiente negativo punta verso il basso, possiamo decrementare f muovendoci in direzione di esso.

Questo procedimento è detto metodo di discesa più ripida, o di discesa del gradiente. Esso propone un nuovo punto

$$x' = x - \epsilon \cdot \nabla_x f(x), \tag{2.1}$$

dove ϵ è il tasso di apprendimento, uno scalare positivo che determina la grandezza dello step.

L'algoritmo converge quando ogni elemento è 0 o prossimo ad esso ed in alcuni casi è possibile saltare direttamente al punto critico risolvendo l'equazione $\nabla_x f(x) = 0$ per x. Anche se la discesa del gradiente è limitata a spazi continui, il concetto di piccoli spostamenti ripetuti per ottenere un miglioramento può essere generalizzato su spazi discreti [4].

2.3.3 Varianti di Gradient descent

Esistono tre varianti principali dell'algoritmo di discesa del gradiente, che differiscono per la quantità di dati utilizzati per calcolare il gradiente della funzione obiettivo. In base alla quantità di dati cambia anche il tempo necessario per aggiornare i parametri e l'accuratezza di questo aggiornamento.

Batch gradient descent

È la tecnica di base, descritta in precedenza, che calcola il gradiente su tutto il dataset per effettuare un solo aggiornamento. Posti $J(\theta)$ la funzione obiettivo e θ i parametri del modello, la funzione 2.1 si può riscrivere come:

$$\theta = \theta - \epsilon \cdot \nabla_\theta J(\theta).$$

Questo approccio non permette di effettuare l'aggiornamento dei parametri del modello in tempo reale e può essere sconveniente per dataset troppo grandi che non possono risiede integralmente in memoria.

Stochastic gradient descent

L'algoritmo di discesa stocastica del gradiente (SGD) effettua un aggiornamento dei parametri per ogni variabile di input $x^{(i)}$ e variabile di output $y^{(i)}$:

$$\theta = \theta - \epsilon \cdot \nabla_\theta J(\theta; x^{(i)}; y^{(i)}).$$

Rispetto alla versione batch, che effettua calcoli ridondanti su tutto il dataset prima di ogni aggiornamento, SGD aggiorna i parametri ad ogni iterazione di allenamento.

Questo causa una fluttuazione della funzione obiettivo (mostrato in figura 2.11, che da un lato può portare ad un salto verso minimi locali migliori, dall'altro complica la convergenza verso il minimo globale, in quanto l'algoritmo tende ad oltrepassarlo.

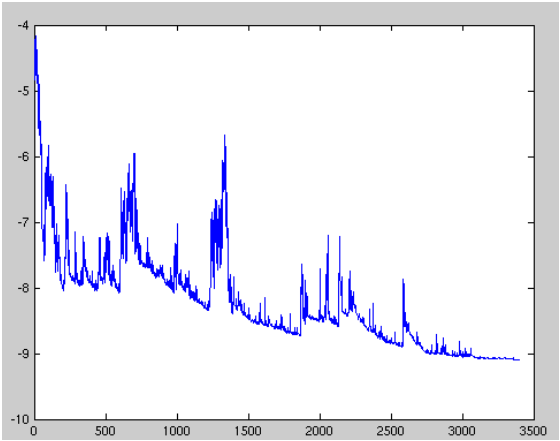


Figura 2.11: Fluttuamento della funzione obiettivo in SGD[31]

Il problema può essere evitato diminuendo gradualmente il tasso di apprendimento portando SGD alle stesse performance di convergenza della versione batch.

Mini-batch gradient descent

La versione mini-batch di gradient descent è una combinazione dei due algoritmi precedenti, viene eseguito un aggiornamento per ogni mini-batch di n elementi:

$$\theta = \theta - \epsilon \cdot \nabla_\theta J(\theta; x^{(i:i+n)}; y^{(i:i+n)}).$$

In primo luogo vengono ridotte le fluttuazioni della funzione obiettivo, portando ad una convergenza più regolare e utilizzate operazioni di calcolo più efficienti che evitano di tenere tutto il dataset in memoria [7].

2.3.4 Iperparametri

A differenza dei parametri, un iperparametro è una variabile esterna al modello, il cui valore non viene determinato in base ai dati forniti in input durante il training. Vanno specificati prima di iniziare l'apprendimento e, dato che non sono riassumibili da una funzione, vengono spesso impostati manualmente dall'utilizzatore in modo sperimentale e iterativo. Fortunatamente esistono tecniche di ottimizzazione automatica, trattate nel capitolo 6.

La comprensione dei vari iperparametri e delle conseguenze che porta una loro modifica sono fondamentali per configurare all'ottimo il modello della propria rete neurale [15].

Number of epochs

Il numero di epoche è uno dei parametri più importanti, esso definisce il numero di volte in cui deve essere fornito alla rete neurale l'intero training set. A prima vista potrebbe non avere senso passare più e più volte gli stessi dati alla rete neurale, tuttavia è doveroso ricordare che si sta utilizzando una parte del data set completo e per ottimizzare l'apprendimento si sta utilizzando l'algoritmo *Gradient Descent* il cui processo è iterativo. Pensare di riuscire ad aggiornare correttamente i pesi di tutti i neuroni in una sola iterazione non è realizzabile. Mano a mano che le epoche passano i pesi vengono aggiornati, aggiustando la curva che approssima il problema da una condizione di underfitting ad una ottimale (evitando di arrivare all'overfitting). Volendo generalizzare, più i dati sono complessi e diversi tra loro, maggiore dovranno essere le epoche.

Batch Size

Quando il dataset è di dimensioni notevoli, anche con elaboratori molto performanti non è possibile all'interno di un epoca osservare tutti i dati direttamente. E' possibile suddividere i dati di training in sottoinsiemi, chiamati *batch* anche

parzialmente sovrapposti di una dimensione prefissata. Questo diminuisce notevolmente l'utilizzo della memoria centrale ma peggiora le performance, in termini di tempo, nella fase di apprendimento.

Step per epoch

Nel caso in cui si sia suddiviso il set in batch è importante che venga impostato anche il numero di passi per epoca. Considerato che tutti i dati devono essere visionati almeno una volta è necessario che questo parametrio sia calcolato correttamente. Si assuma di avere 20000 immagini e impostato la batch size a 100, gli step per epoca devono necessariamente essere $20000/100 = 200$. Sorge spontanea una domanda: se può essere calcolato così facilmente, perchè non viene ricavato dalla rete in autonomia? Nonostante la letteratura suggerisca di seguire questa formula, viene mantenuta aperta la possibilità di numerosi esperimenti; uno di questi consiste nel mescolare casualmente l'ordine dei batch e prendere in considerazione qualche esempio in meno o passando più volte sullo stesso, variando leggermente questo parametro.

Learning rate (LR)

Il tasso di apprendimento è uno dei parametri più delicati da trattare in quanto una piccola variazione può danneggiare in modo significativo il processo di training. Il LR definisce quanto velocemente una rete debba abbandonare le conescenze acquisite nel passato e sostituirle alle nuove.

Se ad un bambino vengono mostrati 10 gatti e tutti possiedono il pelo arancione penserà che i gatti abbiano tutti il pelo di quel colore e si aspetterà questa caratteristica anche quando cercherà di identificare un gatto mai visto in precedenza. Nel momento in cui vedrà un gatto nero e i suoi genitori gli diranno che è anch'esso un gatto (apprendimento supervisionato), con un tasso di apprendimento alto si renderà conto subito che il pelo arancione non è la caratteristica più importante dei gatti, altrimenti, con un tasso di apprendimento molto basso, penserà che quel gatto nero è anomalo (outlier) e che i gatti sono ancora tutti arancioni.

Più è alto il tasso di apprendimento più la rete cambia idea rapidamente. Questo può essere positivo nel caso del bambino, ma può anche avere risvolti negativi. Se il tasso di apprendimento è troppo alto, il bambino potrebbe iniziare a pensare che tutti i gatti siano neri anche se ha visto più gatti arancioni che neri.

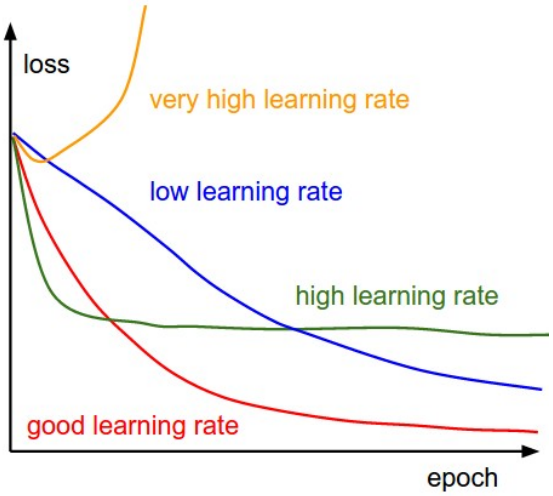


Figura 2.12: Possibili andamenti a seconda del LR

In generale, si desidera trovare un tasso di apprendimento sufficientemente basso da consentire alla rete di convergere in qualcosa di utile, ma abbastanza alto da non dover impiegare giorni per addestrarla [33].

Number of Hidden Layers

Questo parametro definisce il numero di livelli nascosti, ovvero quanti livelli includere tra lo strato di input e di output. Per la maggior parte dei problemi un solo livello nascosto è più che sufficiente, per problemi più complessi come quello che si sta trattando uno solo non basta per generalizzare con risultati soddisfacenti. E' doveroso specificare come la complessità computazionale è linearmente dipendente con il numero dei livelli nascosti; a fronte di una rete con due livelli nascosti è naturale aspettarsi che il tempo necessario per il training sia circa il doppio di quello richiesto per una rete con un solo livello nascosto. Questo è da considerarsi vero solamente nel caso in cui i due livelli siano identici nella configurazione, tuttavia è usuale dimezzare di livello in livello il numero di unità neurali.

Number of Hidden Unit

Il numero di unità nascoste definisce quanti neuroni debbano essere presenti in uno specifico livello. Come anticipato è bene assicurarsi che i livelli nascosti abbiano un numero di neuroni via via inferiore per ogni livello, in direzione del livello di output.

Non esiste un modo specifico per trovare il valore ottimale di questo parametro in ogni strato, nonostante ciò la letteratura moderna consiglia di utilizzare numeri compresi tra la dimensione dell'input e quella dell'output.

Prendendo in esame il problema dell'inquinamento, a fronte delle 42 stazioni di misurazione, ognuna con la rilevazione di 6 tipi di misurazione, si ottiene un input con una dimensione di $(42x6, T) = (252, T)$ dove T è il numero totale di rilevazioni orarie. L'output sarà il valore di NO_2 delle 42 stazioni. Di conseguenza, il numero di neuroni dovranno essere rispettivamente di 242 per il primo livello e di 42 per l'ultimo e per tutti i livelli nascoti un numero compreso in quell'intervallo. Solitamente si dimezza il valore per ogni livello attraversato.

Dropout

Il Dropout consiste nell'ignorare durante la fase di addestramento, alcune unità di un certo insieme di neuroni che viene scelto casualmente. Con ignorare si intende come queste unità non siano più considerate durante un particolare passaggio in avanti o indietro dei valori che si scambiano i neuroni. Nello specifico, ad ogni iterazione di addestramento i singoli neuroni vengono o abbandonati dalla rete con probabilità $1 - p$ o mantenuti con probabilità p, in modo tale da mantenere attiva una rete ridotta; Naturalmente anche i collegamenti in entrata e in uscita verso un nodo abbandonato vengono rimossi per notificare il suo stato.

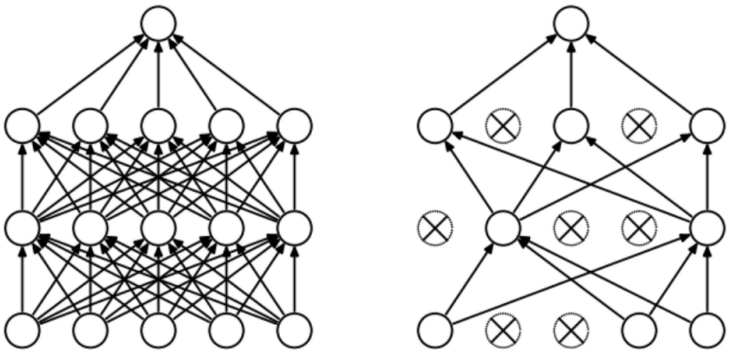


Figura 2.13: Confronto di una rete neurale prima e dopo l'applicazione del dropout

Lo scopo per il quale è stato definito il meccanismo alla base del dropout è quello di prevenire l'overfitting; uno strato completamente connesso contiene la maggior parte dei parametri e i neuroni al suo interno sviluppano delle co-dipendenza tra loro durante l'allenamento, frenando la potenza individuale di ogni singolo neurone e portando ad un eccessivo adattamento dei dati di allenamento [17].

2.4 Funzioni di errore

La funzione di loss o funzione di errore esprime l'errore di generalizzazione che la rete commette sulle predizioni. Come descritto in precedenza lo scopo dei vari algoritmi di ottimizzazione del gradiente è minimizzare questa funzione, per migliorare le performance del modello. Ne esistono varie tipologie, più o meno adatte in base al tipo di problema, di seguito verranno trattate quelle relative ai problemi di regressione.

2.4.1 Mean square error

La funzione Mean square error (MSE), detta anche L2 loss è la media quadratica dell'errore su tutto il dataset. Ponendo $h_\theta(x_i)$ il valore predetto e y_i il valore reale, si esprime come:

$$J = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - h_\theta(x_i))^2.$$

Per la sua natura quadratica l'errore L2 suscettibile a valori anomali e causerà un adattamento del modello a questi valori. È però più semplice da calcolare rispetto alla L1 loss, trattata di seguito.

2.4.2 Mean absolute error

Il Mean absolute erroe (MAE), o L1 loss, minimizza le differenze assolute tra i valori stimati e quelli reali.

$$J = \sum_{i=0}^{n} \mid y_i - h(x_i) \mid$$

È generalmente meno influenzata dai valori anomali rispetto a MSE, ma ha il problema di avere un gradiente costante, che potrà essere grande anche per valori piccoli di errore. Per risolvere questo è necessario usare un tasso di apprendimento dinamico [29].

2.4.3 Huber loss

La funzione di loss di Huber unisce la funzione MAE e MSE in base al valore dell'errore. Si comporta in maniera è quadratica per piccoli valori di errore e lineare per valori più grandi. Il valore dell'errore per renderla quadratica è regolato dall'iperparametro δ:

$$L_\delta(y, f(x)) = \begin{cases} \frac{1}{2}(y - f(x))^2 & \text{per } \mid y - f(x) \mid \leq \delta \\ \delta \mid y - f(x) \mid -\frac{1}{2}\delta^2 & \text{altrimenti.} \end{cases}$$

La scelta di δ determina cosa considerare come valore anomalo, in modo che i valori più grandi siano minimizzati con L1 e quelli più piccoli con L2, che è più sensibile. Usando la Huber loss si risolvono i problemi più rilevanti con le 2 funzioni precedenti, al costo però di dover configurare un altro iperparametro, δ [22].

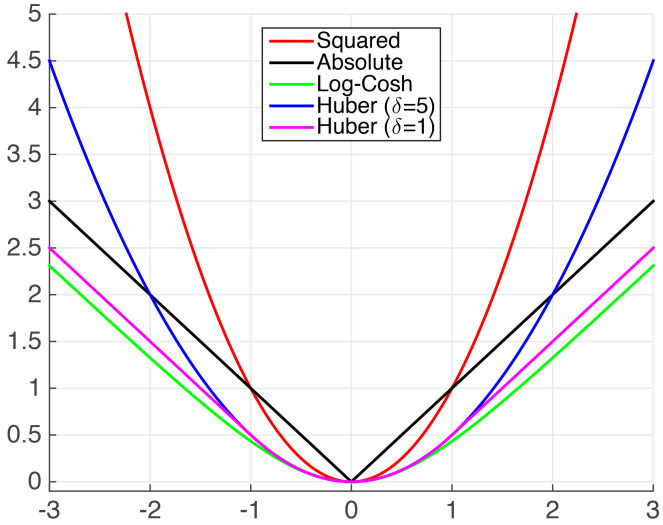


Figura 2.14: Confronto tra le varie funzioni di errore [27]

Capitolo 3

Progettazione e Sviluppo

Dopo aver ampiamente trattato in termini teorici l'intelligenza artificiale nel capitolo precedente, in questo capitolo verranno descritti gli strumenti utilizzati e i modelli configurati per la definizione di una rete neurale in grado di predire i valori dell'inquinamento di NO_2 in città.

3.1 Tecnologie disponibili

All'interno di questa sezione sono raccolti gli strumenti individuati per la realizzazione di questo progetto. Nonostante tali strumenti siano disponibili per vari linguaggi di programmazione, è stato scelto il Python in quanto linguaggio nativo di alcune librerie e per la presenza di moduli già pronti per l'import dei dati realizzati da ex colleghi.

3.1.1 Tensorflow

Tensorflow è una libreria software open source per il calcolo numerico avvalendosi di grafi come architettura per il flusso di dati. I nodi del grafo eseguono operazioni matematiche, mentre gli archi trasportano le matrici di dati multidimensionali (tensori). Avvalendosi di un'architettura molto flessibile, Tensorflow consente di distribuire il calcolo su una o più CPU o GPU in un desktop, server o dispositivo mobile senza dover modificare il codice, aumentandone la scalabilità. TensorFlow include anche TensorBoard, un kit di strumenti per la visualizzazione dei dati.

TensorFlow è stato originariamente sviluppato da ricercatori e ingegneri del team Google Brain per il progetto Google's Machine Intelligence Research allo scopo di condurre la ricerca sull'apprendimento automatico e sulle deep neural net. Il sistema è sufficientemente generale da poter essere applicabile anche in una

vasta gamma di altri domini [8]. Nonostante la flessibilità offerta da Tensorflow il suo utilizzo può risultare assai complesso e le sue API poco intuitive.

3.1.2 Keras

Keras è una libreria per la sviluppo rapido di reti neurali di alto livello, scritta in Python e che basa il suo funzionameno sul backend di TensorFlow. È stato sviluppato con l'idea di consentire una rapida sperimentazione, ovvero consentire di passare dall'idea al risultato nel minor tempo possibile. Keras consente una prototipazione veloce grazie alla facilità d'uso, alla modularità ed estensibilità che garantisce. Supporta reti convoluzionali, ricorrenti e combinazioni di entrambe, oltre a poter essere eseguita sia su CPU che GPU [20].

3.1.3 Numpy e Pandas

Numpy è uno dei package fondamentali per il calcolo scientifico in Python ed è essenziale per utilizzare Keras. Esso fornisce un array multi-dimensionale e svariate funzioni per manipolare i dati e gli array stessi [6].

Pandas è una libreria di alto livello per interagire con dati relazionali o etichettati. Fornisce due strutture dati di base: serie (una dimensione) e dataframe (due o più dimensioni) insieme alle funzioni ottimizzate per manipolarle. È stata sfruttata principalmente per la fase di importazione e riorganizzazione dei dati, oltre che per l'imputazione dei valori mancanti [5].

3.2 Ricerca della funzione di interpolazione ottimale

Nel capitolo 1 è stato accennato come per il riempimento dei dati mancanti sia stato utilizzata l'interpolazione lineare; Keras include svariate funzioni di interpolazione che vanno confrontate utilizzando i dati a propria disposizione per verificare quale sia quella ottimale. Nella pratica le funzioni sono state confrontate per ogni stazione ma per semplicità di trattazione in figura 3.1 viene mostrato il risultato di una sola stazione in quanto, fortunatamente, tutte le altre si sono comportate in modo analogo. Nel caso contrario sarebbe stato necessario effettuare una scelta tra quelle migliori.

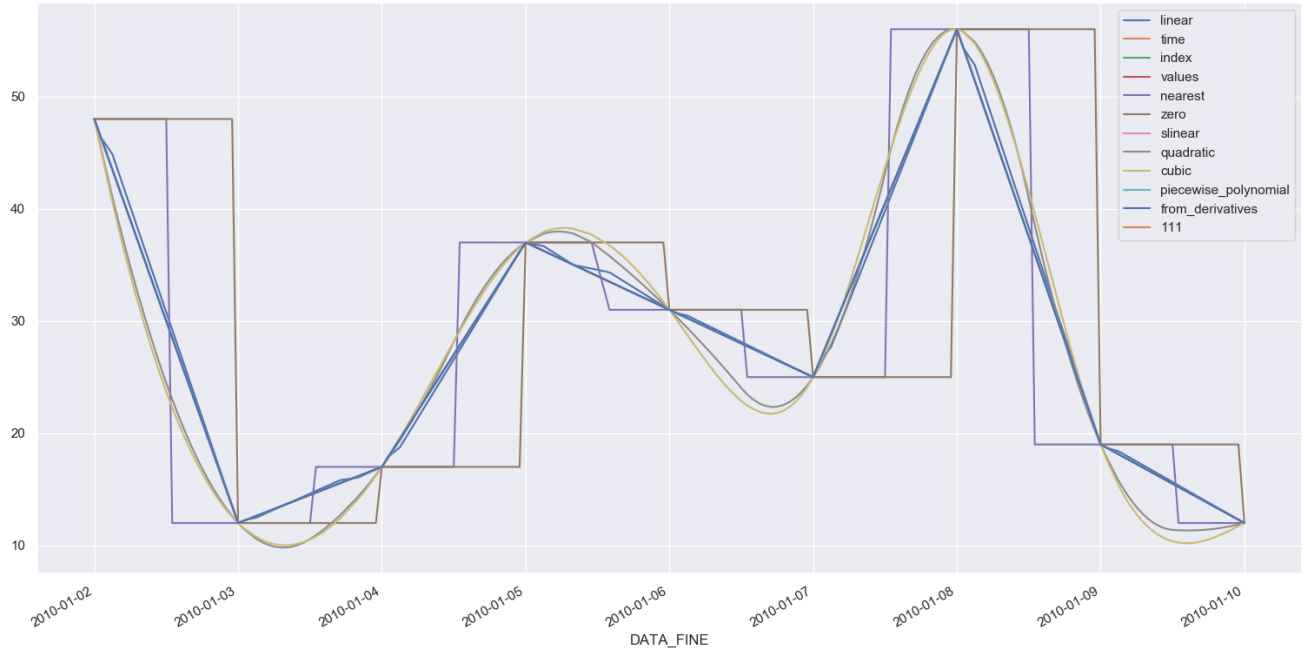


Figura 3.1: Confronto funzioni di interpolazione per la stazione 200003 sui valori di NO_2

Dal grafico è possibile notare in modo evidente come la funzione *cubica* e *quadratica* abbiano un comportamento a 'scalino' con un'approssimazione grossolana e inadatta al contesto. Le funzioni *polinomiale a tratti* e *derivata* effettuano un ottimo lavoro di approssimazione smorzando gli errori e le imperfezioni, tuttavia le due curve risultano molto distanti dai valori iniziali e per paura che questo potesse influenzare i risultati sono state scartate. Tutte le altre funzioni si comportano in modo pressocchè equivalente e la scelta naturale è stata utilizzare quella più efficiente: *l'interpolazione lineare*. E' necessario specificare come la funzione *time* sia una funzione identica a quella *lineare* se non per il fatto che viene tenuto in considerazione anche l'asse orizzontale del tempo; considerando che il tempo è nel problema delle previsioni un elemento chiave, a livello implementativo è stata utilizzata tale funzione, da considerarsi identica a quella lineare.

3.3 Funzioni per la valutazione e il confronto dei modelli

3.3.1 Funzione di errore

Le principali funzioni a disposizione per la valutazione dei modelli sono quelle elencate nel paragrafo 2.4. Dato che la scelta della funzione di errore deve essere presa tenendo in considerazione dei dati a disposizione, si è scelto di utilizzare la *mae* perché essa è quella consigliata in letteratura per grandi dataset che presentano molto rumore.

3.3.2 Ottimizzatore

Come ottimizzatore è stato scelto Adam, un'alternativa al classico SGD (vedi paragrafo 2.3.3) che mantiene un learning rate differente per ogni singolo parametro, combinando i vantaggi di due algoritmi di ottimizzazione (RMSProp e AdaGrad) ed operando in maniera computazionalmente efficiente [14].

3.4 Struttura dei dati

In seguito alle trasformazioni effettuate nel capitolo 1 e grazie alla libreria di pandas è possibile rappresentare i dati i modo strutturato attraverso i *DataFrame*. I *DataFrame* sono degli array multidimensionali che offrono attraverso interfacce semplificate l'accesso ai dati in modo agevole. In figura 3.2 vengono rappresentati i dati così come sono stati utilizzati per singola stazione.

Station	7000014							...					Time		
Parameter	2	1000	1001	1003	1004	100500	100501	...	100505	100506	100507	100508	Month	DayOfWeek	Hour
DateTime								...							
2012-12-31 23:00:00	46.0	276.55	0.0	77.0	3.5	0	0	...	1	0	0	0	12	0	23
2013-01-01 00:00:00	43.0	276.45	0.0	77.0	4.1	0	0	...	1	0	0	0	1	1	0
2013-01-01 01:00:00	50.0	276.15	0.0	78.0	4.0	0	0	...	1	0	0	0	1	1	1
2013-01-01 02:00:00	32.0	276.45	0.0	78.0	3.4	0	0	...	1	0	0	0	1	1	2
2013-01-01 03:00:00	35.0	275.95	0.0	76.0	1.1	0	0	...	1	0	0	0	1	1	3

Figura 3.2: Struttura dei dati (singola stazione) con *ohe* sulla direzione del vento

Tabella 3.1: Legenda dei parametri

id	*parametro*
2	biossido d'azoto
1000	temperatura
1001	precipitazioni
1003	umidità
1004	velocità del vento
1005	direzione del vento

3.5 Definizione dei modelli

In questa sezione verranno elencati i modelli utilizzati per la sperimentazione, descrivendo per ognuno l'architettura e mostrandone l'implementazione.

3.5.1 Modelli lineari

I modelli lineari sono i più semplici e definiscono una rete neurale densamente connessa. Il primo livello deve essere necessariamente *Flattern* che appiattisce l'input; questo perchè i livelli lineari richiedono che l'input sia unidimensionale. Il livello lineare *Dense* opera nel modo tradizionale dei neuroni seguendo la formula $output = attivazione(punto(input, kernel) + bias)$ già vista in precedenza.

Semplice

```
model = Sequential()
model.add(layers.Flatten(input_shape=(sequence_length, x_data.shape[1])))
model.add(layers.Dense(num_y_signals, activation='linear'))
```

Figura 3.3: Implementazione modello lineare semplice

Il modello lineare semplice non presenta alcun livello nascosto, pertanto il layer di input è direttamente connesso a quello di output. La funzione di attivazione utilizzata è quella lineare che rende densamente connessa la rete realizzata, adattando la dimensione dell'input alla dimensione dell'output. E' sicuramente un modello che richiede poco tempo per l'addestramento.

Hidden layer singolo

```
model = Sequential()
model.add(layers.Flatten(input_shape=(sequence_length, x_data.shape[1])))
model.add(layers.Dense(hidden_layer_size, activation='relu'))
model.add(layers.Dense(num_y_signals, activation='sigmoid'))
```

Figura 3.4: Implementazione modello lineare con singolo hidden layer

Al modello precedente viene aggiunto un layer intermedio con funzione di attivazione *ReLU* e modificata la funzione di attivazione di output da *lineare* a *sigmoid*. Nonostante le funzioni di attivazione non siano lineari il modello rimane densamente connesso in quanto vengono utilizzati layer *Dense*.

Hidden layer doppio

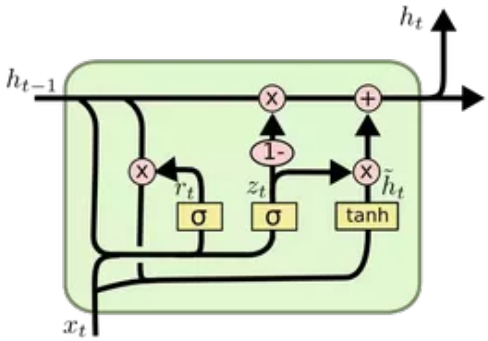
```
model = Sequential()
model.add(layers.Flatten(input_shape=(sequence_length, x_data.shape[1])))
model.add(layers.Dense(hidden_layer_size, activation='relu'))
model.add(layers.Dense(hidden_layer_size, activation='relu'))
model.add(layers.Dense(num_y_signals, activation='sigmoid'))
```

Figura 3.5: Implementazione modello lineare con duplice hidden layer

In questo modello il layer nascosto viene duplicato. E' da considerarsi un modello *dummy* in quanto, come accennato nel capitolo 2, due layer configurati in modo identico, ed in particolare con lo stesso numero di unità neurali e stessa funzione di attivazione, operano come se fossero un layer unico producendone gli stessi risultati ma in modo meno efficiente.

3.5.2 Modelli Gated Recurrent Unit (GRU)

I modelli basati su celle GRU derivano dai modelli LSTM e si differenziano principalmente perchè sono più semplici e performanti. Nelle celle GRU viene introdotto un gate di aggiornamento (concettualmente simile ad un interruttore) che decide se far passare o meno le informazioni alla cella successiva. Aggiungere dei gate ad un neurone equivale a sfruttare ulteriori operazioni matematiche con un ulteriori set di pesi.



$$z_t = \sigma\left(W_z \cdot [h_{t-1}, x_t]\right)$$
$$r_t = \sigma\left(W_r \cdot [h_{t-1}, x_t]\right)$$
$$\tilde{h}_t = \tanh\left(W \cdot [r_t * h_{t-1}, x_t]\right)$$
$$h_t = (1 - z_t) * h_{t-1} + z_t * \tilde{h}_t$$

Figura 3.6: Architettura neurone GRU

Si è scelto di provare ad usare queste celle in quanto i relativi modelli sono più semplici da utilizzare e si allenano più velocemente rispetto ad LSTM.

Layer ricorrente con GRU

```
model = Sequential()
model.add(layers.GRU(hidden_layer_size, activation='relu', input_shape=(sequence_length, x_data.shape[1])))
model.add(layers.Dense(num_y_signals, activation='sigmoid'))
```

Figura 3.7: Implementazione modello ricorrente GRU semplice

Questo modello non possiede layer nascosti ed è la configurazione base per utilizzare le Gated Recurrent Unit. Il livello di output deve essere *Dense* in quanto alcuni neuroni di GRU, per il modo in cui opera, potrebbero essere 'disattivati' ed in output per motivi di libreria questo non è consentito.

Layer ricorrente con GRU e Dropout

```
model = Sequential()
model.add(layers.GRU(hidden_layer_size, activation='relu', input_shape=(sequence_length, x_data.shape[1])))
model.add(Dropout(0.2))
model.add(layers.Dense(num_y_signals, activation='sigmoid'))
```

Figura 3.8: Implementazione modello ricorrente GRU con dropout

Al modello precedente viene attivato il dropout con 20% di scarto; a livello implementativo opera come un hidden layer nonostante a livello logico sia solamente una funzione che opera sugli archi in uscita dai neuroni del primo livello verso quelli del livello di output.

Layer ricorrente con GRU e singolo hidden layer

```
model = Sequential()
model.add(layers.GRU(64, activation='relu', return_sequences=True, input_shape=(sequence_length, x_data.shape[1])))
model.add(layers.GRU(32, activation='relu'))
model.add(layers.Dense(num_y_signals, activation='sigmoid'))
```

Figura 3.9: Implementazione modello ricorrente GRU con singolo hidden layer

Al modello base di GRU viene aggiunto un livello nascosto della stessa tipologia. Al contrario del modello di prova definito nel macro-gruppo dei lineari, qui il numero di unità neurali viene dimezzato nel livello nascosto consentendo quindi una progressiva semplificazione dei dati.

Layer ricorrente con GRU e doppio hidden layer

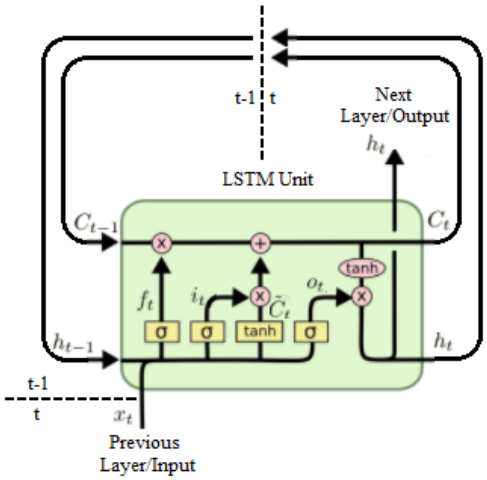
```
model.add(layers.GRU(64, activation='relu', return_sequences=True, input_shape=(sequence_length, x_data.shape[1])))
model.add(layers.GRU(32, activation='relu', return_sequences=True))
model.add(layers.GRU(16, activation='relu'))
model.add(layers.Dense(num_y_signals, activation='sigmoid'))
```

Figura 3.10: Implementazione modello ricorrente GRU con duplice hidden layer

Al fine di verificare se l'aumento di hidden layer potesse portare a benifici è stato definito questo modello con un ulteriore livello nascosto con un numero di unità neurali dimezzato ulteriormente (16).

3.5.3 Modelli Long Short-Term Memory (LSTM)

LSTM è il padre di tutte le architetture ricorrenti ed è anche per questo che è il meno performante. Nelle celle LSTM sono presenti ben due porte in più rispetto a GRU (Forget e Output) che rallentano il processo di apprendimento.



$$f_t = \sigma\left(W_f \cdot [h_{t-1}, x_t] \; + \; b_f\right)$$
$$i_t = \sigma\left(W_i \cdot [h_{t-1}, x_t] \; + \; b_i\right)$$
$$\tilde{C}_t = \tanh(W_C \cdot [h_{t-1}, x_t] \; + \; b_C)$$
$$C_t = f_t * C_{t-1} + i_t * \tilde{C}_t$$
$$o_t = \sigma\left(W_o \; [h_{t-1}, x_t] \; + \; b_o\right)$$
$$h_t = o_t * \tanh\left(C_t\right)$$

Figura 3.11: Architettura neurone LSTM

Sorge naturale chiedersi: perchè prenderlo in considerazione? LSTM avendo più gate dovrebbe riuscire a ricordare sequenze più lunghe delle celle GRU e superarle in compiti che richiedono la modellazione delle relazioni che si evidenziano nel lungo periodo, questo verrà verificato nelle successive sperimentazioni.

Layer ricorrente con LSTM

```
model.add(layers.LSTM(hidden_layer_size, activation='relu', input_shape=(sequence_length, x_data.shape[1])))
model.add(layers.Dense(num_y_signals, activation='sigmoid'))
```

Figura 3.12: Implementazione modello ricorrente LSTM semplice

In figura 3.12 è possibile osservare la configurazione base per l'utilizzo delle reti con unità LSTM. Similarmente a GRU è necessario il livello *Dense* perchè a causa dei *forget gate* non tutti gli archi in uscita dal primo livello potrebbero essere attivi e per vincoli di libreria questo non è consentito.

Layer ricorrente con LSTM e Dropout

```
model.add(layers.LSTM(hidden_layer_size, activation='relu', input_shape=(sequence_length, x_data.shape[1])))
model.add(Dropout(0.2))
model.add(layers.Dense(num_y_signals, activation='sigmoid'))
```

Figura 3.13: Implementazione modello ricorrente LSTM semplice con dropout

Al modello precedente viene attivato il dropout con scarto del 20%; si preme ricordare che il dropout non è un livello ma una funzione operante sugli archi in uscita dal livello da cui è preceduta.

Layer ricorrente con LSTM e singolo hidden layer

```
model.add(layers.LSTM(64, activation='relu', return_sequences=True, input_shape=(sequence_length, x_data.shape[1])))
model.add(layers.LSTM(32, activation='relu'))
model.add(layers.Dense(num_y_signals, activation='sigmoid'))
```

Figura 3.14: Implementazione modello ricorrente LSTM con singolo hidden layer

Un modello LSTM base a cui viene aggiunto un layer ricorrente nascosto della stessa tipologia con unità neurali dimezzate rispetto a quelle del livello di input, rispettivamente 32 e 64.

Layer ricorrente con LSTM e doppio hidden layer

```
model.add(layers.LSTM(64, activation='relu', return_sequences=True, input_shape=(sequence_length, x_data.shape[1])))
model.add(layers.LSTM(32, activation='relu', return_sequences=True))
model.add(layers.LSTM(16, activation='relu'))
model.add(layers.Dense(num_y_signals, activation='sigmoid'))
```

Figura 3.15: Implementazione modello ricorrente LSTM con duplice hidden layer

Analogamente al caso GRU, si è provato ad aggiungere un ulteriore layer nascosto LSTM con unità neurali dimezzate (16) per verificare l'eventuale presenza di benefici. Tra quelli proposti in questo capitolo è il modello più complesso e computazionalmente più oneroso.

Capitolo 4

Sperimentazione e Analisi dei risultati

In questo capitolo sono mostrati i risultati raggiunti con i modelli definiti nel capitolo precedente e messi a confronto attraverso la funzione di valutazione *mae* scelta in precedenza.

4.1 Valutazione dei modelli

In questa sezione sono elencati per i vari modelli utilizzati, la differenza di loss in fase di training e validazione ed il risultato della predizione.

Di seguito è indicata la configurazione di default utilizzata per tutti i modelli, ricavata sperimentalmente in modo trial and error senza avvalersi di ottimizzatori di iperparametri.

- batch size: 128
- epoche: 100
- train-test split: 90%−10%
- train-validation split: 90%−10%
- hidden layer: 32 unità di default (ove non specificato)

Nonostante siano state impostate 100 epoche in tutti i test queste non sono mai state sfruttate per intero, grazie alle callback disponibili in Keras. Le più rilevanti sono *EarlyStopping*, che interrompe il training se per 5 volte consecutive la loss non viene ulteriormente minimizzata e la callback *ReduceLRonPlateau*, che interviene in maniera meno drastica della precedente, riducendo il tasso di apprendimento dopo

3 epoche in cui la loss non diminuisce. A seguito delle callback appena definite si rende necessaria anche la definizione del *Model Checkpoint* che si occupa di salvare al termine di ogni epoca i pesi ottimali ed evita che si utilizzino quelli di un epoca che ha causato lo stop preventivo del training.

```
callback_early_stopping = EarlyStopping(monitor='val_loss',
                                        patience=4, verbose=1)

callback_reduce_lr = ReduceLROnPlateau(monitor='val_loss',
                                       factor=0.1,
                                       min_lr=1e-5,
                                       patience=3,
                                       verbose=1)

callback_checkpoint = ModelCheckpoint(filepath=path_checkpoint,
                                      monitor='val_loss',
                                      verbose=1,
                                      save_weights_only=True,
                                      save_best_only=True)
```

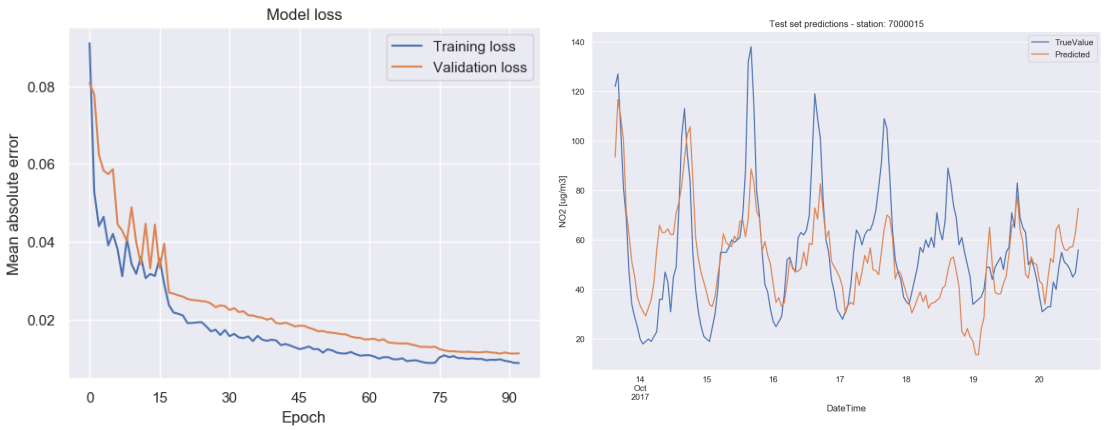
Figura 4.1: Configurazione delle callback

Si consideri inoltre che sono stati utilizzati come input per ogni previsione, al fine di estrapolare i valori di inquinamento del giorno successivo, i tre giorni passati, ed iterando il processo è stato possibile raggiungere una previsione di 7 giorni.

Le simulazioni sono state eseguite su un pc dotato di CPU i7-3930K (6 core) e 16GB di memoria RAM.

4.1.1 Modelli lineari

Semplice

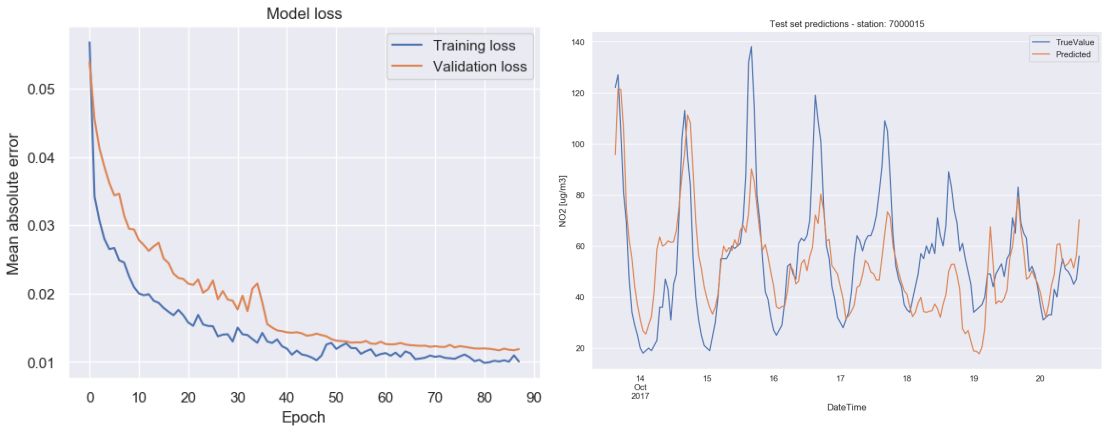


Il modello, dopo un training di 93 epoche, raggiunge un errore di 0.010 592 sul set di test.

Hidden layer singolo

Il modello, dopo un training di 56 epoche, raggiunge un errore di 0.014 372 sul set di test.

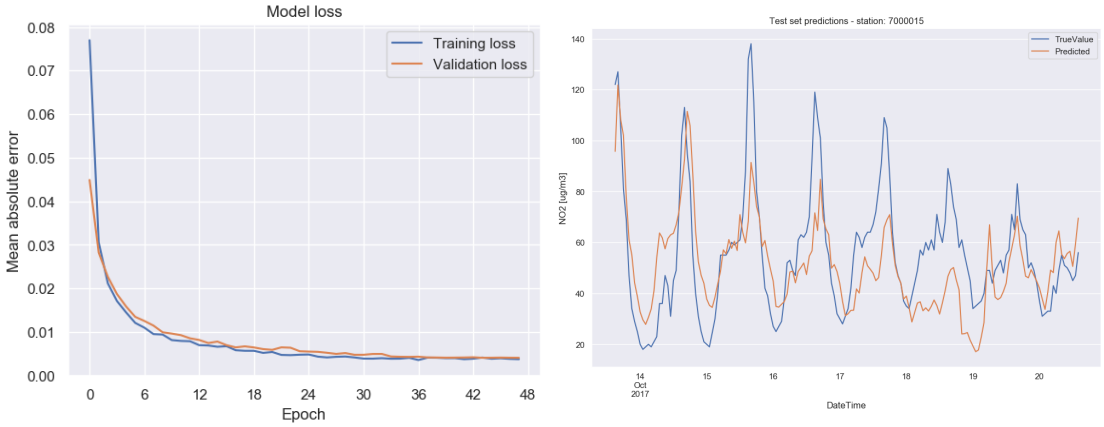
Hidden layer doppio



Il modello, dopo un training di 88 epoche, raggiunge un errore di 0.010 766 sul set di test.

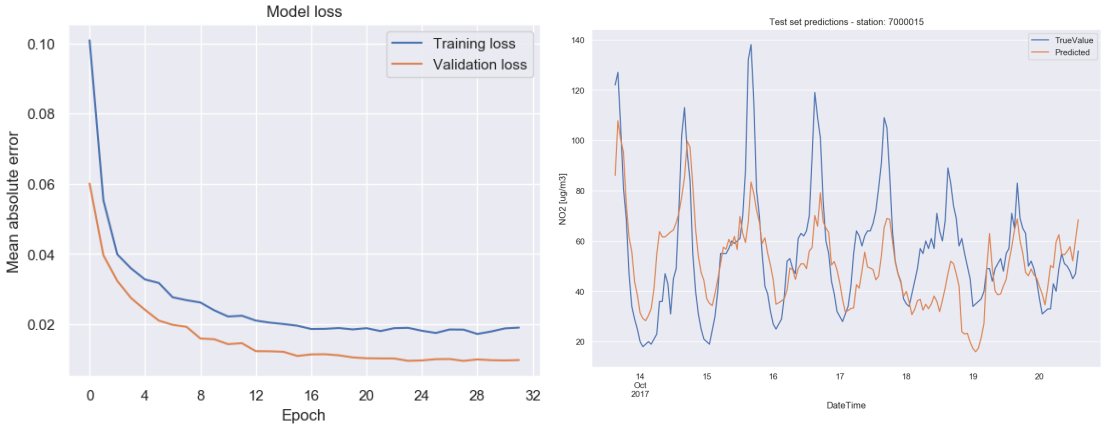
4.1.2 Modelli Gated Recurrent Unit (GRU)

Layer ricorrente con GRU



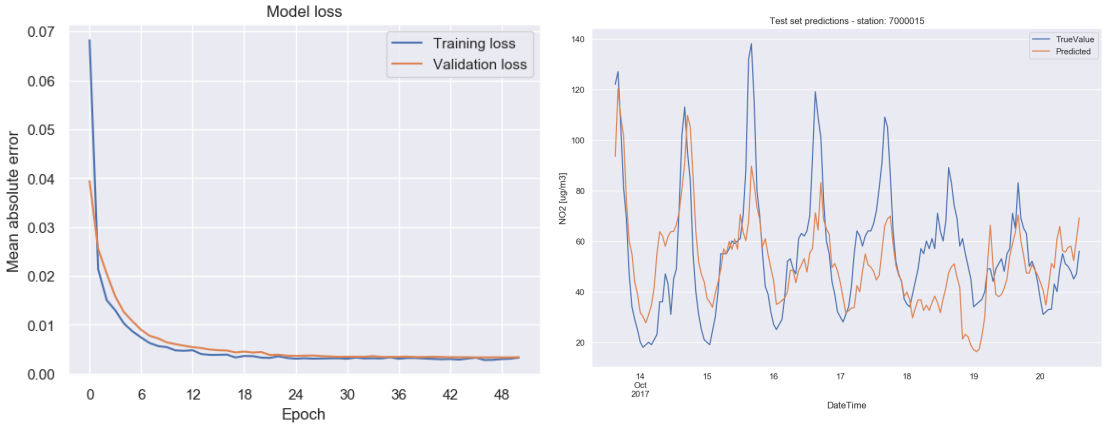
Il modello, dopo un training di 48 epoche, raggiunge un valore di errore sul set di test di 0.004 364. Rispetto ai modelli lineari si adatta meglio ai dati, riducendo la differenza tra errore di training e di validation.

Layer ricorrente con GRU e Dropout



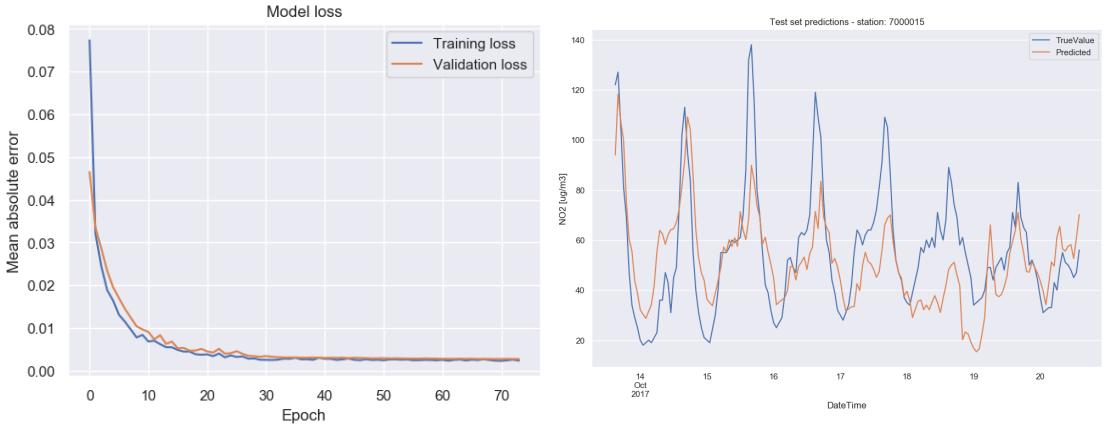
Il modello, dopo un training di 32 epoche, raggiunge un errore di 0.007 271. In figura si evidenzia come l'errore di validazione sia inferiore a quello di training, questo è dovuto al fatto che la funzione di dropout è attiva solo durante la fase di training [19].

Layer ricorrente con GRU e singolo hidden layer



Il modello, dopo un training di 51 epoche, raggiunge un valore di loss di 0.003 611.

Layer ricorrente con GRU e doppio hidden layer



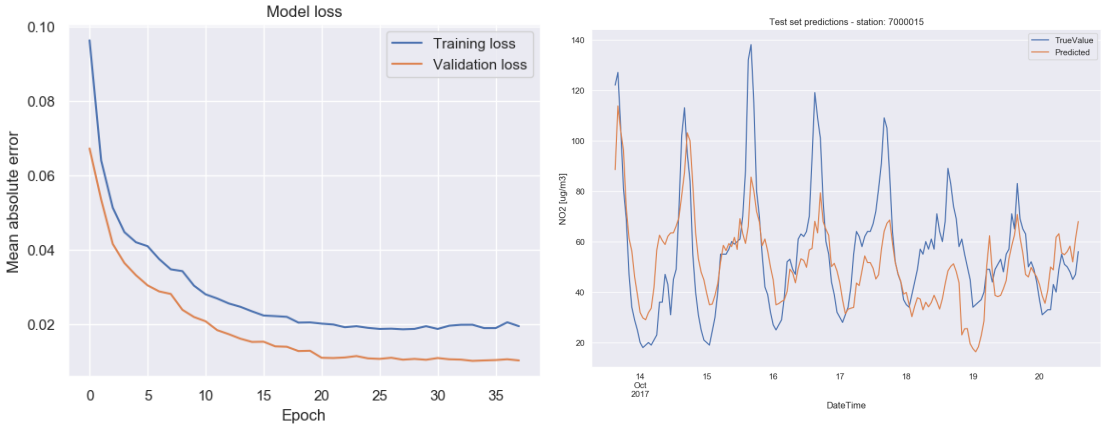
Il modello, dopo un training di 74 epoche, ottiene un valore di errore di 0.002 881.

4.1.3 Modelli Long Short-Term Memory (LSTM)

Layer ricorrente con LSTM

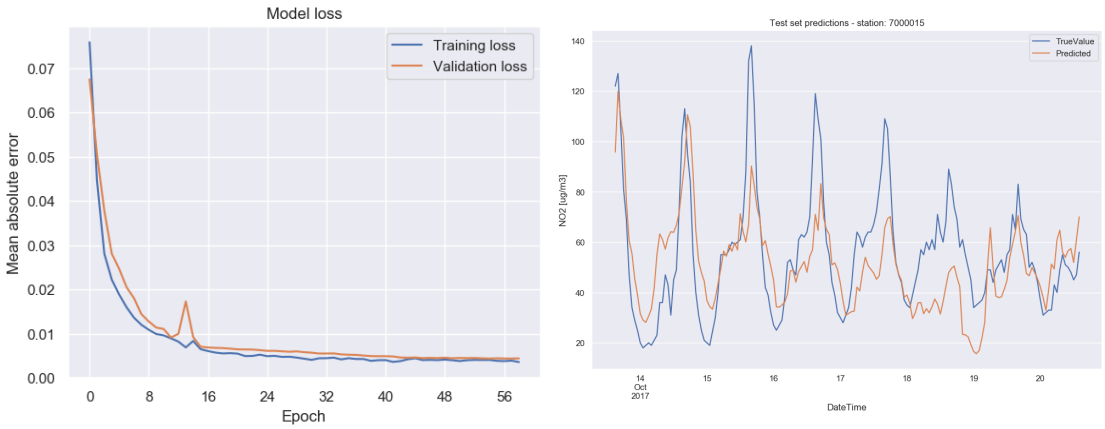
Dopo 46 epoche, il modello LSTM più semplice riduce il valore di loss a 0.005 768.

Layer ricorrente con LSTM e Dropout



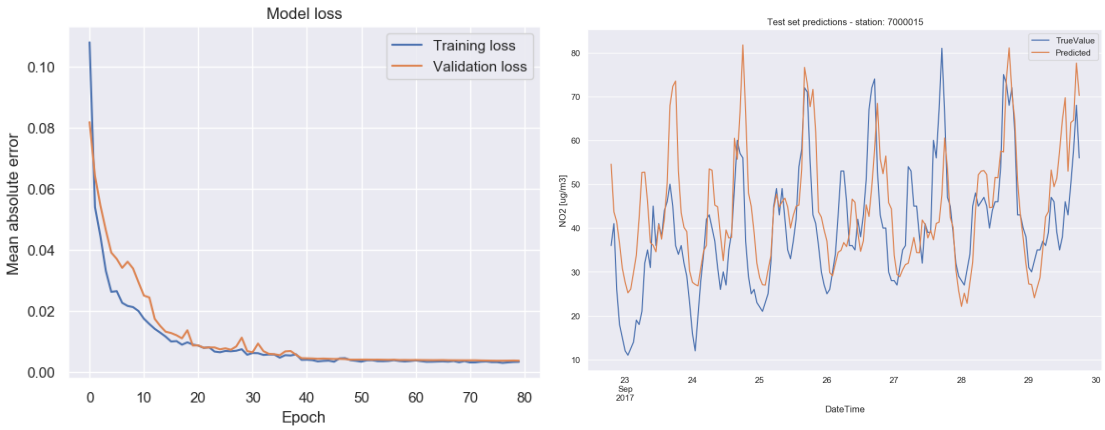
Il modello LSTM con layer di dropout ottiene un valore di loss di 0.007 498 dopo 38 epoche. Come nel caso del GRU, l'errore di validazione è inferiore a quello di training.

Layer ricorrente con LSTM e singolo hidden layer



Il modello con hidden layer dopo 65 epoche ha raggiunto un errore di 0.003 451.

Layer ricorrente con LSTM e doppio hidden layer



Dopo 79 epoche il modello con 2 hidden layer ha ottenuto un errore di 0.005 314.

Analisi dei risultati

Tabella 4.1: Riepilogo dei risultati

Modello	*Loss*
Lineare semplice	0.010 592
Lineare singolo hidden layer	0.014 372
Lineare doppio hidden layer	0.010 766
GRU semplice	0.004 364
GRU con dropout	0.007 271
GRU con singolo hidden layer	0.003 611
GRU con doppio hidden layer	0.002 881
LSTM semplice	0.005 768
LSTM con dropout	0.007 498
LSTM con hidden layer	0.003 451
LSTM con doppio hidden layer	0.005 314

Dalla tabella 4.1 è possibile osservare come i modelli lineari siano quelli con i risultati peggiori. Interessante risulta la loss del modello lineare con doppio hidden layer, che nonostante la teoria indichi come a fronte di due livelli configurati allo stesso modo il beneficio sia nullo, la pratica insegna che i benefici, seppur marginali siano presenti. Nei modelli lineari inoltre l'aggiunta dei livelli nascosti è risultata ininfluente o addirittura peggiorativa.

Analizzando i risultati dei modelli ricorrenti è evidente come il dropout abbia in entrambi i casi peggiorato la situazione, questo è dovuto al fattore casuale introdotto dall'attivazione di questa funzione, ciò sta a significare che ripetendo i test più volte la situazione potrebbe tranquillamente invertirsi senza apparenti spiegazioni. Nonostante gli ottimi risultati raggiunti da entrambe le tipologie ricorrenti (si è raggiunto un errore millesimale) è bene evidenziare come il modello migliore in assoluto sia il GRU con duplice hidden layer, dimostrando come la semplicità dei neuroni GRU sia efficace.

Per concludere, la capacità dei neuroni LSTM di estrapolare dipendenze a lungo termine è stata, seppur marginalmente, superata dalla semplicità di GRU, contrariamente alle aspettative.

Capitolo 5

Meccanismi avanzati di apprendimento

In questo capitolo sono descritte due modalità operative che alterano il processo di apprendimento dei neuroni ed illustrati i relativi risultati.

5.1 Meccansimo di attenzione

Le reti neurali che implementano il meccanismo di attenzione sono una estensione molto recente delle reti ricorrenti. Esse introducono per l'appunto il concetto di attenzione, come descritto dalla psicologia cognitiva, che consiste nel concentrare il proprio focus su una parte discreta dell'informazione, ignorando il resto dell'informazione percepibile [30].

Questo è utile nell'ambito del machine learning per consentire alla rete di concentrarsi su un subset dell'informazione che viene fornita in input, in particolare nel caso dell'analisi di serie temporali dovrebbe consentire di capire meglio la periodicità dei dati. Per permettere alla rete di imparare come direzionare il suo focus verso determinati sottoinsiemi dell'input, vengono considerati tutti contemporaneamente, solo in maniera più o meno intensa. Per selezionare su quali degli $y_1, ..., y_n$ sottoinsiemi in cui viene suddiviso l'input concentrarsi, la rete possiede un contesto c. Questo contesto descrive i dati di interesse, e tra di esso e i dati viene effettuata una operazione, il cui risultato è passato a una funzione softmax[1], producendo il vettore z che associa a ogni y_i un punteggio, che esplicita quanto il sottoinsieme di dati fa matching con il contesto [12].

La struttura base di un modulo attention è riassunta dalla figura 5.1.

[1]La funzione softmax riduce gli input a valori tra 0 e 1, dividendoli in modo che la somma degli output sia 1 [32]

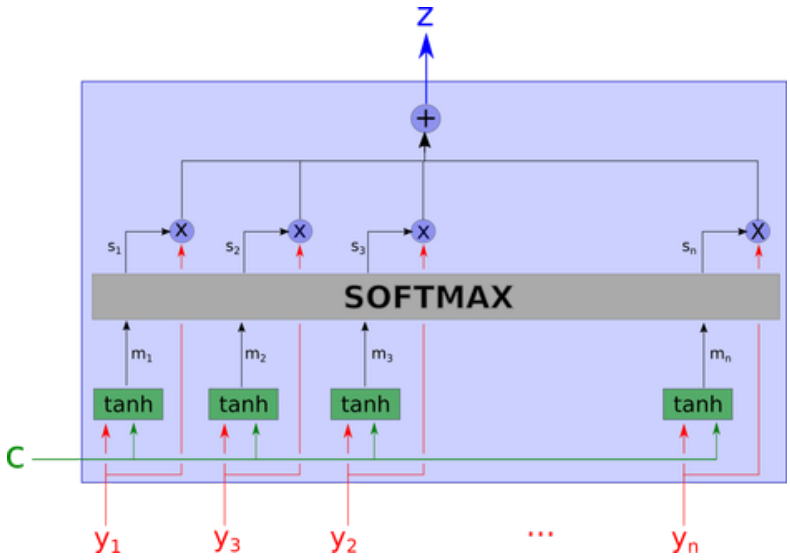


Figura 5.1: Rete con attention

5.1.1 Definizione dei modelli

Il meccanismo di attenzione è abbastanza recente come concezione, ma sta prendendo piede molto in fretta [21] non è ancora supportato nativamente da Keras, quindi è stata utilizzata l'implementazione fornita da [11].

Dopo aver importato la suddetta libreria, è possibile aggiungere il meccanismo di attention inserendo uno dei due layer forniti di seguito a un layer ricorrente, come per esempio in figura 5.2.

```
model = Sequential()
model.add(layers.LSTM(72, return_sequences=True, input_shape=(sequence_length, x_data.shape[1])))
model.add(Attention())
model.add(layers.Dense(num_y_signals, activation='sigmoid'))
```

Figura 5.2: Definizione di una rete con attention

5.1.2 Analisi dei risultati

La libreria mette a disposizione 2 implementazioni, con vettore di contesto semplificato o meno. Tramite prove sperimentali sulle varie configurazioni possibili si è deciso di utilizzare due reti ricorrenti diverse: una rete GRU e una rete LSTM per il confronto, rispettivamente con contesto semplificato e non.

Come mostrato dalla figura 5.3 e riassunto in tabella 5.1 la rete GRU con attention semplificata non offre miglioramenti rispetto alle rete GRU analizzata nel capitolo 4, anzi i risultati peggiorano considerevolmente, di un ordine di grandezza.

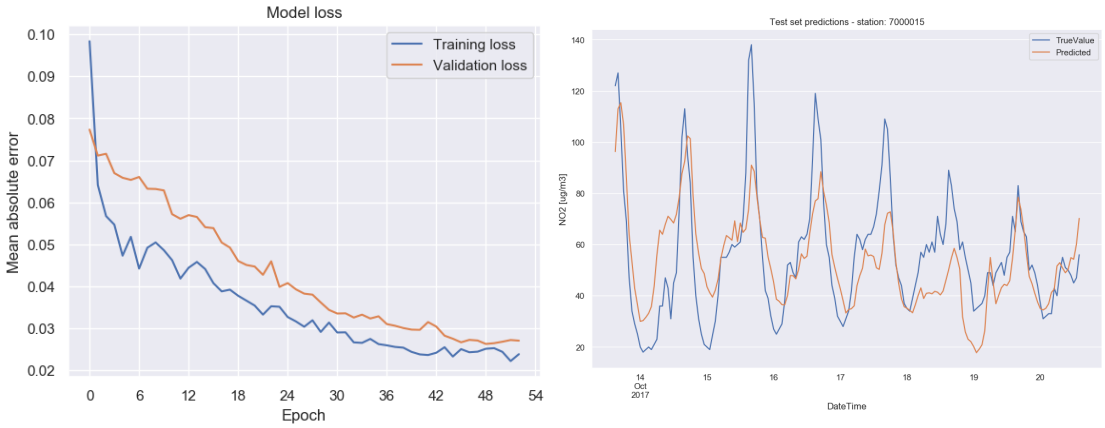


Figura 5.3: Loss e predizione relative al modello GRU con attention semplificata

Per quanto riguarda la rete LSTM con vettore di contesto avanzato, confrontando i risultati descritti in figura 5.4 si può notare un miglioramento rispetto alla rete standard, come mostrato nella tabella 5.1. Facendo un confronto con le altre reti analizzate risulta che questo non sia un effettivo miglioramento, ma non si discosta troppo da essere considerato un risultato negativo.

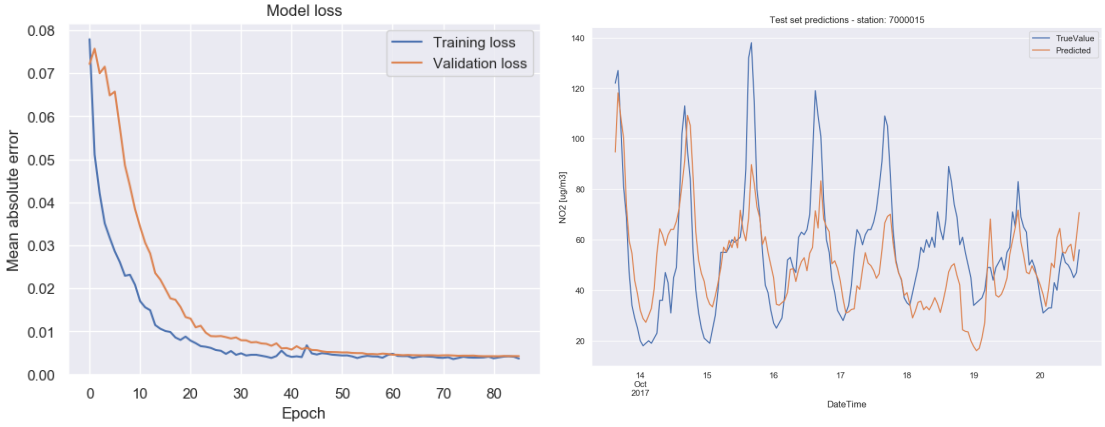


Figura 5.4: Loss e predizione relative al modello LSTM con attention con contesto

Tabella 5.1: Riepilogo dei risultati

Modello	*Loss*
GRU semplice	0.004 364
GRU con attention semplificata	0.022 125
LSTM semplice	0.005 768
LSTM con attention	0.004 564

In conclusione, le reti con il meccanismo di attenzione possono introdurre miglioramenti rispetto alle reti ricorrenti tradizionali, forse però non abbastanza significativi da giustificare la complessità computazionale aggiuntiva di dover calcolare il vettore di contesto.

5.2 Accenno alla modalità Stateful

La modalità stateful è un'opzione di Keras, attivabile nel caso in cui l'input venga fornito in batch alla rete, che permette il mantenimento dello stato dei neuroni alla fine di ogni batch. Di default i modelli di Keras sono configurati in modalità *stateless* e quindi viene effettuato il reset dei pesi dei vari neuroni che compongono la rete al termine di ogni batch di input.

Attivando questo flag la gestione del reset degli stati interni dei neuroni viene lasciata all'utente. È inoltre essenziale che i dati non vengano mescolati durante l'addestramento, dato che all'elemento i di un batch verrà associato il peso dell'elemento i del batch precedente e mescolando i dati si perderebbero informazioni di periodicità spesso presenti nelle serie temporali.

Modello utilizzato e risultati

Il comportamenteo della rete con modalità stateful attiva è stato valutato su una rete GRU con singolo hidden layer, aggiungendo una callback che reimpostasse gli stati della rete alla fine di ogni epoca.

Dopo 49 epoche di training il modello in esame ha raggiunto un valore di loss sul set di test di 0.002 047, come mostrato in figura 5.5.

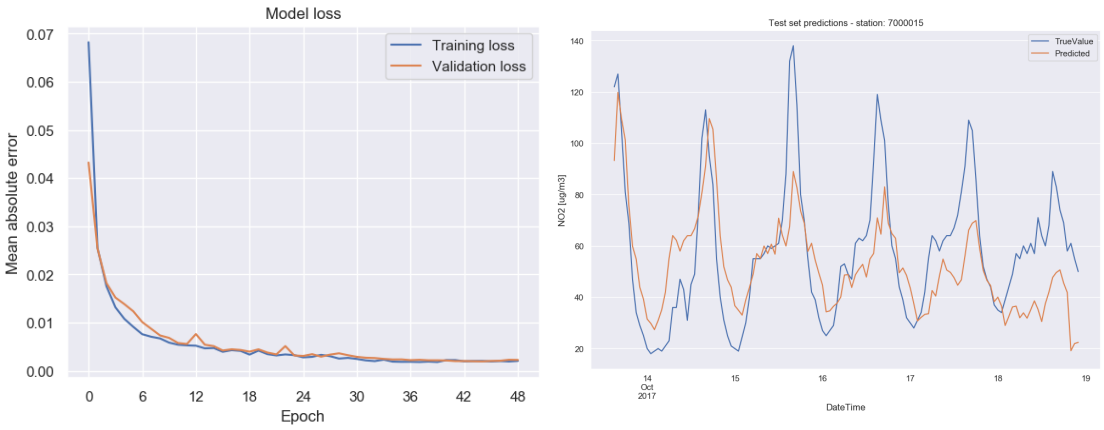


Figura 5.5: Loss e predizione relative al modello GRU con singolo hidden layer con stateful

Confrontando i risultati ottenuti con il modello in modalità stateful con lo stesso modello stateless (in tabella 5.2) si nota un lieve miglioramento dell'errore, ad indicare la comprensione da parte della rete della periodicità.

Tabella 5.2: Confronto stateless/stateful

Modello	*Loss*
Stateless GRU con singolo hidden layer	0.0036111195258139319
Stateful GRU con singolo hidden layer	0.002046805199687228

Capitolo 6

Ottimizzazione degli iperparametri tramite random search

Come detto nel paragrafo2.3.4, scegliere gli iperparametri per un modello è un'operazione molto delicata, che di solito viene eseguita manualmente in maniera iterativa dall'operatore. È essenziale scegliere la configurazione, dato che essi controllano il comportamento dell'algoritmo di allenamento, e possono avere effetti significativi sulle performance del modello.

6.1 Approcci

Generalmente l'operazione di ricerca manuale degli iperparametri ottimali è un'operazione lenta e non potrebbe non sempre portare alle scelte migliori. Inoltre si basa molto sull'esperienza in materia del programmatore. Esistono approcci automatici per ricercare gli iperparametri, alcuni dei quali sono descritti di seguito.

6.1.1 Grid search

Grid search è l'algoritmo più semplice applicabile a questo genere di problema, e consiste nel definire un set di valori dei parametri ed allenare il modello su tutte le possibili combinazioni, scegliendo quella che porta a risultati migliori, definendo essenzialmente una "griglia" in cui cercare, da qui il nome. Risulta conveniente utilizzarlo solo quando il modello può essere allenato in tempi brevi, questo non è però il caso per le reti neurali trattate. Per esempio se volessimo ottimizzare 8 iperparametri, ciascuno con 4 valori possibili, dovremmo effettuare 65536 (4^8) valutazioni. Assumendo un tempo di training di 10 minuti per set di iperparametri, impiegheremmo 455 giorni, più di un anno. Esistono tecniche di downsampling per

ridurre i valori della griglia da considerare, ma in generali per modelli complessi sono superiori altri approcci.

6.1.2 Random search

L'approccio utilizzato per random search è simile a quello utilizzato da grid search, con la differenza che lo spazio di ricerca non viene esplorato per intero ma ne viene esplorato un subset scelto in maniera casuale.

Come dimostrato in [2], solo una parte degli iperparametri è veramente importante per ciascun dataset differente, ma quelli veramente importanti, e quindi su cui concentrare il focus della ricerca, differiscono in base al dataset. Quindi, mentre grid search potrebbe "sprecare tempo" valutando combinazioni dove variano solo iperparamentri poco importanti, mentre random search consente di considerare uno spazio di ricerca effettivamente più ampio, al pari di trial effettuati, come mostrato in figura 6.1.

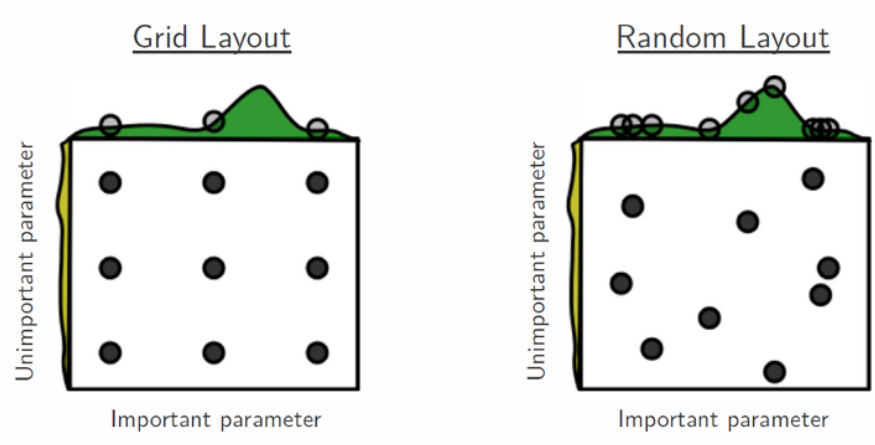


Figura 6.1: Confronto tra random search e grid search

6.2 Hyperas

Hyperas è un wrapper di Hyperopt, una libreria per eseguire ottimizzazioni generiche [3]. Hyperas ne semplifica molto l'utilizzo con Keras, rendendo semplice ottimizzare modelli preesistenti. Il codice viene mantenuto uguale, con l'unico vincolo di avere una funzione *data*() che ritorna tutti i dati necessari al modello, e un funzione *model*() dove viene definito il modello. Nella funzione *model*() verranno definiti tramite una notazione di template i vari possibili valori che possono

assumere gli iperparametri, come mostrato in figura 6.2. In seguito Hyperas effettuerà la ricerca degli iperparametri migliori e restituirà in output la combinazione migliore.

[26]

```
model = get_model(
                    activation={{choice(['relu','elu'])}},
                    dropout={{uniform(0,1)}},
                    last_activation={{choice(['sigmoid','relu'])}},
                    first_neuron = {{choice([16, 32, 64, 128])}},
                    hidden_layers= {{choice([0,1,2])}},
                    num_y_signals=num_y_signals,
                    input_shape=X_train.shape[1:])


model.compile(loss={{choice(['categorical_crossentropy','mae','mean_squared_error'])}},
              optimizer={{choice(['rmsprop', 'adam', 'sgd'])}},
              metrics=['accuracy'])


model.fit_generator(generator=train_generator,
                          steps_per_epoch=int(train_data_size / batch_size),
                          epochs={{choice([25,50,75,100])}} ,
                          validation_data=(X_val, Y_val),
                          shuffle= False)
```

Figura 6.2: Dichiarazione dei possibili iperparametri da valutare tramite template, nella funzione model

Viste le buone performance ottenute in precedenza, si è deciso di utlizzare delle reti neurali basate su layer GRU.

6.3 Analisi dei risultati

Sono state fatte eseguire 20 *trial* ad Hyperas per un tempo totale di computazione di 3-4 ore, che hanno prodotto in output la configurazione mostrata in tabella 6.1. In seguito gli iperparametri ottenuti sono stati usati per configurare la rete neurale, ad eccezione del dropout che si è rivelato controproducente in un primo test, quindi è stato tenuto a 0. La rete neurale risultante da questo ultimo cambiamento ha ottenuto un valore di loss di 0.000 921 dopo 50 epoche. Risultato che, confrontati con quelli ottenuti in precedenza in 6.2 dimostrano l'efficacia dell'ottimizzazione automatica nel trovare un set di iperparametri migliore rispetto a quelli ricavati manualmente in precedenza.

Tabella 6.1: Iperparametri trovati da Hyperas

Modello	*Loss*
activation	elu
dropout	0.296 850
epochs	50
first neuron	64
hidden layers	2
last activation	relu
loss	mae
optimizer	adam

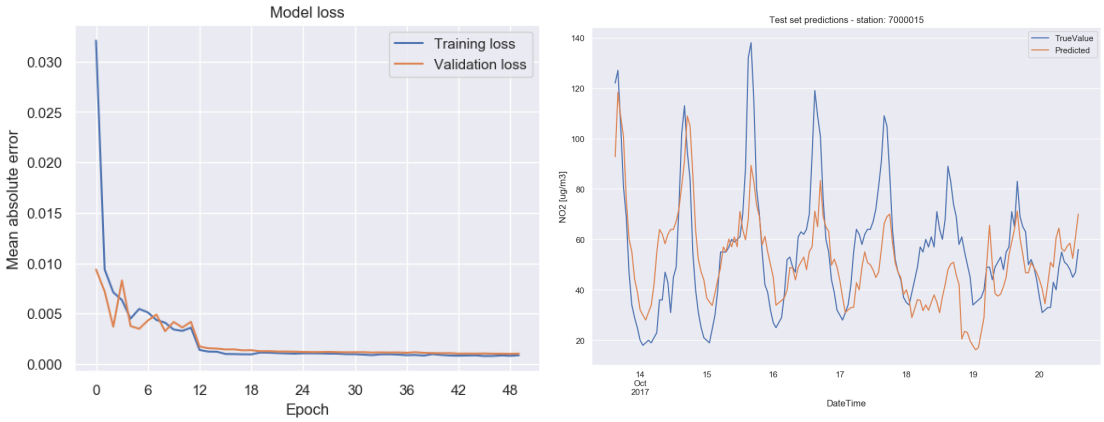


Figura 6.3: Loss e predizione relative al modello GRU configurato con gli iperparametri risultanti da Random search

Tabella 6.2: Riepilogo dei risultati

Modello	*Loss*
GRU con doppio hidden layer	0.002 881
Stateful GRU con singolo hidden layer	0.002 047
LSTM con attention	0.004 564
GRU con iperparametri di Hyperas	0.000 921

Conclusione e sviluppi futuri

Dalle prove effettuate è stato stabilito che il modello che ha dato risultati migliori è il GRU con 2 hidden layer, ottenendo un valore di loss di 0.002 881. Questo modello, assieme al modello LSTM è poi stato ampliato sia con il meccanismo di attenzione ottenendo 0.004 564 (per il modello LSTM) che con la modalità stateful0.002 047. In seguito sul modello migliore ottenuto in precedenza è stato effettuato un processo di ottimizzazione degli iperparametri tramite random search, utilizzando Hyperas, ottenendo una configurazione che inserita nella rete ha ottenuto un valore di loss di 0.000 921.

I dati di posizione sono stati inseriti ma non hanno introdotto cambiamenti nelle performance, essendo invarianti, in futuro si potrebbe provare a generare i suddetti dati di posizione in modo da simulare in maniera sensata lo spostamento dei sensori.

Invece estendendo la finestra di previsione si è avuto un aumento della loss, e per ovviare a questo sarebbe necessario aumentare il numero di dati forniti in inpiut al modello.

Aumentando il numero di dati forniti in input alla rete si è notato un aumento dell'errore, e per ovviare a questo sarebbe necessario aumentare la complessità della rete. Ciò causa un aumento dei tempi di training rendendo necessario un miglioramento dell'hardware utilizzato, possibilmente sfruttando GPU, oppure addirittura valutare l'operazione di Keras su cluster Spark, per cui esistono librerie appositamente ottimizzate.

Bibliografia

[1] Sujit Pal Antonio Gulli. *Deep Learning with Keras*. Packt, 2017.

[2] James Bergstra and Yoshua Bengio. Random search for hyper-parameter optimization. *Journal of Machine Learning Research*, 13, 2012.

[3] James Bergstra, Dan Yamins, and David D. Cox. Hyperopt: A python library for optimizing the hyperparameters of machine learning algorithms.

[4] Ian Goodfellow, Yoshua Bengio, and Aaron Courville. *Deep Learning*. MIT Press, 2016. `http://www.deeplearningbook.org`.

[5] Wes McKinney. Data structures for statistical computing in python. In Stéfan van der Walt and Jarrod Millman, editors, *Proceedings of the 9th Python in Science Conference*, pages 51 – 56, 2010.

[6] Travis E. Oliphant. *Guide to NumPy*. CreateSpace Independent Publishing Platform, USA, 2nd edition, 2015.

[7] S. Ruder. An overview of gradient descent optimization algorithms. *ArXiv e-prints*, September 2016.

Sitografia

[8] Tensorflow: Large-scale machine learning on heterogeneous systems. https://www.tensorflow.org/.

[9] Arpae. Gli agenti inquinanti, origini e problemi alla salute. https://www.arpae.it/dettaglio_generale.asp?id=3883&idlivello=2074.

[10] Arpae. Portale opendata. https://dati.arpae.it/.

[11] Christos Baziotis. Keras utilities. https://github.com/cbaziotis/keras-utilities.

[12] Léonard Blier. Attention mechanism. https://blog.heuritech.com/2016/01/20/attention-mechanism/.

[13] Nicoletta Boldrini. Introduzione all'intelligenza artificiale. https://www.ai4business.it/intelligenza-artificiale/intelligenza-artificiale-cose/.

[14] Jason Brownlee. Gentle introduction to the adam optimization algorithm for deep learning. https://machinelearningmastery.com/adam-optimization-algorithm-for-deep-learning/.

[15] Jason Brownlee. What is the difference between a parameter and a hyperparameter? https://machinelearningmastery.com/difference-between-a-parameter-and-a-hyperparameter/.

[16] Jason Brownlee. Why one-hot encode data in machine learning? https://machinelearningmastery.com/why-one-hot-encode-data-in-machine-learning/.

[17] Amar Budhiraja. Dropout in (deep) machine learning. https://medium.com/@amarbudhiraja/https-medium-com-amarbudhiraja-learning-less-to-learn-better-dropout-in-deep

[18] Chimica-online.it. Grandezze vettoriali.
https://www.chimica-online.it/fisica/grandezze-vettoriali.htm.

[19] François Chollet et al. Keras documentation.
https://keras.io/getting-started/faq/
#why-is-the-training-loss-much-higher-than-the-testing-loss.

[20] François Chollet et al. Keras. https://keras.io, 2015.

[21] Eugenio Culurciello.

[22] Prince Grover. 5 regression loss functions all machine learners should know.
https://heartbeat.fritz.ai/
5-regression-loss-functions-all-machine-learners-should-know-4fb140e9d4b0.

[23] IntelligenzaArtificiale.it. Intelligenza artificiale forte e debole.
http://www.intelligenzaartificiale.it/
intelligenza-artificiale-forte-e-debole/.

[24] Jeremy Jordan. Convolutional neural network.
https://www.jeremyjordan.me/convolutional-neural-networks/.

[25] Biagio Lenzitti. L'interpolazione. https:
//www.arpae.it/dettaglio_generale.asp?id=3883&idlivello=2074.

[26] Max Pumperla.

[27] Siraj Raval. Loss functions explained.
https://github.com/llSourcell/loss_functions_explained.

[28] Avinash Sharma. Understanding activation functions in neural networks.
https://medium.com/the-theory-of-everything/
understanding-activation-functions-in-neural-networks-9491262884e0.

[29] Rishabh Shukla. L1 vs. l2 loss function.
http://rishy.github.io/ml/2015/07/28/l1-vs-l2-loss/.

[30] the free encyclopedia Wikipedia. Attention.
https://en.wikipedia.org/wiki/Attention.

[31] the free encyclopedia Wikipedia. Objective function fluctuation.
https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/f/f3/Stogra.png.

[32] Ji Yang. Relu and softmax activation functions.
https://github.com/Kulbear/deep-learning-nano-foundation/wiki/
ReLU-and-Softmax-Activation-Functions.

[33] Hafidz Zulkifli. Understanding learning rates and how it improves performance in deep learning. https://towardsdatascience.com/understanding-learning-rates-and-how-it-improves-performance-in-deep-learnin