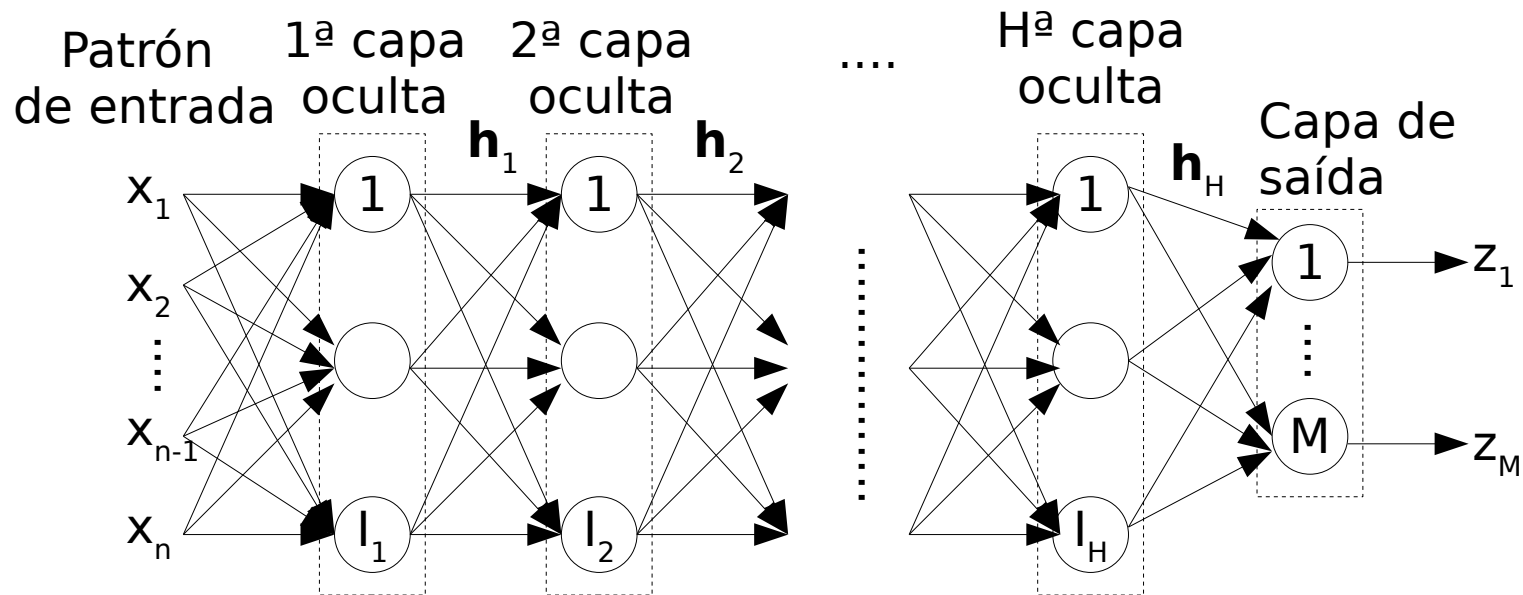


Tema 5. Redes profundas

- Rede neuronal cun número elevado de capas ocultas, Deep Learning (DL)
- Orientado especialmente á análise automática de imaxes
- Non usa retro-propagación como na rede MLP: capas especializadas en detección de características sobre imaxes (p.ex., capas convolucionais)
- Inicialización non aleatoria como MLP, senón usando aprendizaxe non supervisado para facilitar o entrenamento posterior por retropropagación
- Para evitar entrenamentos lentos e caídas en mínimos locais, usa función de activación linear rectificada (ReLU)
- Intervalo con derivada non nula máis grande: mellores propiedades de derivabilidade, facilita o entrenamento, reduce a probabilidade de caída en mínimos locais

Rede neuronal profunda (I)



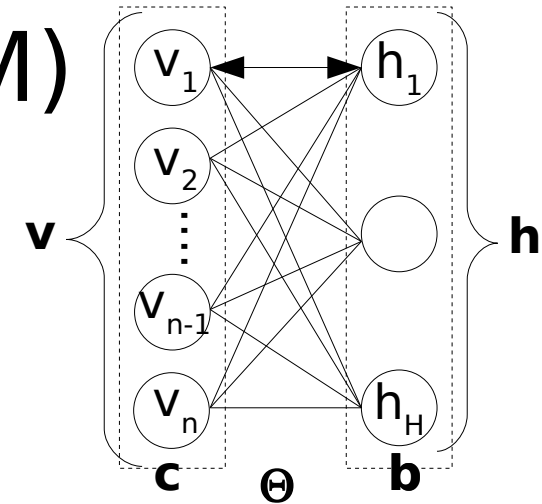
- 1) Pre-entrenamento non supervisado** de cada capa por separado, secuencialmente: máquina de Boltzman restrinxida (RBM). Non se usan as saídas desexadas
- 2) Entrenamento supervisado** dos pesos de saída
- 3) Sintonización precisa** dos pesos intermedios e de saída mediante retropropagación

Deep learning (II)

- A capa oculta i crea un vector de características $\mathbf{h}_i$: representación distribuida dispersa do patrón no i -ésimo nivel de características
- Extraen características automáticamente, capturan regularidades nos datos, en cada capa máis abstractas
- Evita a extracción manual de características, que require coñecemento do problema (p.ex. en imaxes)
- A rede DL extrae as características axeitadas en problemas complexos nos que é difícil extraer boas características
- O pre-entrenamento non supervisado descubre regularidades implícitas nos datos e sitúa os pesos en zonas do espazo con boas solucións
- Theodoridis: Machine learning: a Bayesian and optimization perspective, Academic Press, Cap. 18.8

Pre-entrenamento: máquina restrinxida de Boltzman (RBM)

- Estructura da rede (n entradas, H saídas): conexións bilaterais
- Paráms: $\Theta = \{\theta_{ij}\}_{ij=1}^{nH}$, $\mathbf{b} = \{b_i\}_{i=1}^H$, $\mathbf{c} = \{c_i\}_{i=1}^n$
- Enerxía da rede:



$$E(\mathbf{v}, \mathbf{h}) = \sum_{i=1}^n v_i \sum_{j=1}^H \theta_{ij} h_j + \sum_{j=1}^H b_j h_j + \sum_{i=1}^n c_i v_i = \mathbf{v}^T \Theta \mathbf{h} + \mathbf{b}^T \mathbf{h} + \mathbf{c}^T \mathbf{v}$$

$v_i, h_j \in \{0, 1\}$
 $i = 1, \dots, n$
 $j = 1, \dots, H$

- Maximiza logaritmo da probabilidade (log-likelihood) L:

$$L = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \log P(\mathbf{v}_n, \mathbf{h}) \quad P(\mathbf{v}_n, \mathbf{h}) = \frac{e^{-E(\mathbf{v}_n, \mathbf{h})}}{Z} \quad Z = \sum_{\mathbf{v}} \sum_{\mathbf{h}} e^{-E(\mathbf{v}, \mathbf{h})}$$

$$L = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \log \left(\frac{1}{Z} \sum_{\mathbf{h}} e^{-E(\mathbf{v}_n, \mathbf{h})} \right) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \log \left(\sum_{\mathbf{h}} e^{-E(\mathbf{v}_n, \mathbf{h})} \right) - \frac{1}{N} \log \left(\sum_{\mathbf{v}} \sum_{\mathbf{h}} e^{-E(\mathbf{v}, \mathbf{h})} \right)$$

RBM (II)

- Gradiente: $\frac{\partial L}{\partial \theta_{ij}} = A(h_i^1, v_j^1) - B(h_i^2, v_j^2)$
- O superíndice é o tempo: $v_j^1 = v_{nj}$, $\mathbf{v}^1 = \mathbf{v}_n^1 = \mathbf{v}_n$
- $h_i^1 \sim P(h_i=1|\mathbf{v}^1)$: $h_i^1=1$ aleatoriamente com prob. $P(h_i=1|\mathbf{v}^1)$

$$P(h_i=1|\mathbf{v}^1) = 1 - \sigma\left(\sum_{j=1}^H \theta_{ij} v_j^1 + b_i\right) \quad \sigma(x) = \frac{1}{1+e^{-x}} \leftarrow \text{Função sigmoide}$$

- $v_j^2 \sim P(v_j=1|\mathbf{h}^1)$: $v_j^2=1$ con probabilidade $P(v_j=1|\mathbf{h}^1)$

$$P(v_j=1|\mathbf{h}^1) = 1 - \sigma\left(\sum_{i=1}^n \theta_{ij} h_i^1 + c_j\right)$$

$$\bar{v}_j^1 = \frac{1}{Q} \sum_{n=1}^Q v_{nj}$$

- $h_i^2 \sim P(h_i=1|\mathbf{v}^2)$: $h_i^2=1$ con probabilidade $P(h_i=1|\mathbf{v}^2)$

$$A(h_i^1, v_j^1) = \frac{h_i^1}{N} \sum_{n=1}^N v_{nj} \sum_{\mathbf{h}} P(\mathbf{h}^1 | \mathbf{v}_n) = \frac{h_i^1}{N} \sum_{n=1}^N v_{nj} = h_i^1 \bar{v}_j^1$$

$$\sum_{\mathbf{h}} P(\mathbf{h}^1 | \mathbf{v}_n) = 1$$

$$B(h_i^2, v_j^2) = \sum_{\mathbf{v}} \sum_{\mathbf{h}} P(\mathbf{v}, \mathbf{h}) h_i^2 v_j^2 = h_i^2 v_j^2$$

$$P(\mathbf{h} | \mathbf{v}_n) = \frac{P(\mathbf{v}_n, \mathbf{h})}{\sum_{\mathbf{h}'} P(\mathbf{v}_n, \mathbf{h}')} \quad 5$$

RBM (III)

- Actualización de pesos:

$$\Delta \theta_{ij} = \theta_{ij}(t+1) - \theta_{ij}(t) = \mu \frac{\partial L}{\partial \theta_{ij}} = \mu (h_i^1 \bar{v}_j^1 - h_i^2 v_j^2)$$

$$\bar{\mathbf{v}}^1 = \frac{1}{Q} \sum_{n=1}^Q \mathbf{v}_n$$

- Promedio sobre un bloque de Q patrones:

$$\Delta \theta_{ij} = \frac{\mu}{Q} \sum_{n=1}^Q (h_i^1 v_{jn}^1 - h_i^2 v_j^2)$$

- En forma matricial: $\Delta \Theta = \frac{\mu}{Q} \sum_{n=1}^Q (\mathbf{h}^1 \mathbf{v}_n^{1T} - \mathbf{h}^2 \mathbf{v}^{2T}) = \mu (\mathbf{h}^1 \bar{\mathbf{v}}^{1T} - \mathbf{h}^2 \mathbf{v}^{2T})$

- Usando valores medios de $\mathbf{h}$:

$$\Delta \Theta = \frac{\mu}{Q} (\bar{\mathbf{h}}^1 \bar{\mathbf{v}}^{1T} - \bar{\mathbf{h}}^2 \mathbf{v}^{2T}) \quad \Delta \mathbf{b} = \frac{\mu}{Q} (\bar{\mathbf{h}}^1 - \bar{\mathbf{h}}^2) \quad \Delta \mathbf{c} = \frac{\mu}{Q} (\bar{\mathbf{v}}^1 - \bar{\mathbf{v}}^2)$$

- Θ , $\mathbf{b}$ e $\mathbf{c}$ inicialízanse aleatoriamente
- Remata ao cumprirse certo criterio de converxencia

Algoritmo de entrenamiento da RBM

entrada: $\{\mathbf{v}_n\}_{n=1}^N$, patrones de entrada, sin salida desactivada

inicialización: Θ , $\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$ aleatorios

for $t=1:T$ # t, T =época actual, nº de épocas

for $l=1..B$ # B =nº de bloques de tamaño Q

$\mathbf{G}=\mathbf{0}, \mathbf{g}_b=\mathbf{0}, \mathbf{g}_c=\mathbf{0}$ # gradientes

for $\mathbf{v}_n$ in B_l # B_l =bloque l -ésimo

$\mathbf{v}^1=\mathbf{v}_n$; $\mathbf{h}^1 \sim P(\mathbf{h}=\mathbf{1}|\mathbf{v}^1)$; $\mathbf{v}^2 \sim P(\mathbf{v}=\mathbf{1}|\mathbf{h}^1)$; $\mathbf{h}^2 \sim P(\mathbf{h}=\mathbf{1}|\mathbf{v}^2)$

$\mathbf{G}=\mathbf{G}+(\bar{\mathbf{h}}^1 \mathbf{v}_n^{1T} - \bar{\mathbf{h}}^2 \mathbf{v}_n^{2T})$; $\mathbf{g}_b=\mathbf{g}_b+(\bar{\mathbf{h}}^1 - \bar{\mathbf{h}}^2)$; $\mathbf{g}_c=\mathbf{g}_c+(\mathbf{v}_n^1 - \mathbf{v}_n^2)$

endfor

$\Theta=\Theta+\mu \mathbf{G}/Q$; $\mathbf{b}=\mathbf{b}+\mu \mathbf{g}_b/Q$; $\mathbf{c}=\mathbf{c}+\mu \mathbf{g}_c/Q$

endfor

if criterio convergencia **break**

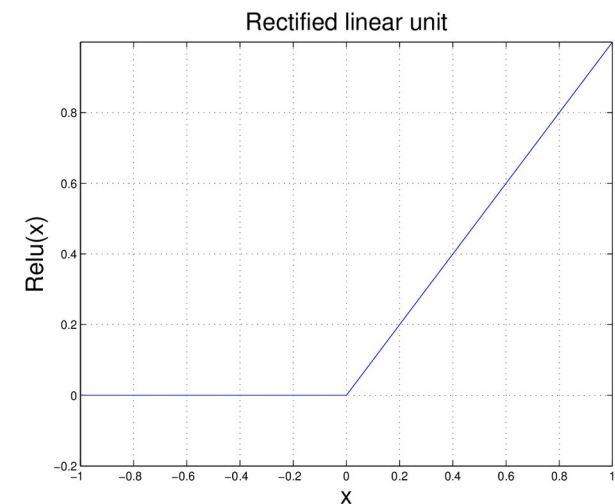
endfor

De RBM a DL

- Para saídas reais, RBM usa neurónas de saída gaussianas, con enerxía $E(\mathbf{v}, \mathbf{h})$ definida como:

$$E(\mathbf{v}, \mathbf{h}) = \sum_{i=1}^n \frac{(v_i - c_i)^2}{2\sigma_i^2} + \sum_{j=1}^H b_j h_j - \sum_{i=1}^n \frac{v_i}{\sigma_i} \sum_{j=1}^H \theta_{ij} h_j = \frac{|\Sigma(\mathbf{v} - \mathbf{c})^T|^2}{2} + \mathbf{b}^T \mathbf{h} - \mathbf{v}^T \Sigma^T \Theta \mathbf{b}$$

- Onde Σ é a matriz diagonal con $1/\sigma_1, \dots, 1/\sigma_n$ na diagonal
- DL usa activación **relu** (rectified linear unit):
 $f(t) = R(t) = \max(0, t)$
- Reduce os problemas da sigmoide e tanh por derivada nula
- Aproximación derivábel de relu:
softplus: $f(t) = \ln(1 + e^x)$



Algoritmo Deep Learning completo

Inicialización: $\{\Theta_k, \mathbf{b}_k, \mathbf{c}_k\}_{k=1}^H, \mathbf{w}_j^H$ aleatorios, $\mathbf{h}_n^1 = \mathbf{x}_n, n=1..N$

Fase 1: pre-entrenamiento non supervisado (inicialización de pesos) de capas ocultas (RBM)

for $k=1..H$ # $H=n^\circ$ de capas ocultas (redes RBM)

$\mathbf{h}^{k-1}$ =actividade da neurona de saída, $\mathbf{h}^k$ =actividade da neurona oculta da RBM k

Entrena a RBM k -ésima calculando $\Theta_k, \mathbf{b}_k, \mathbf{c}_k$ usando o algoritmo de páx. 7

Usa $\Theta_k, \mathbf{b}_k, \mathbf{c}_k$ para calcular $\{\mathbf{h}_n^k\}_{n=1}^N$ como $\mathbf{h}_n^k \sim P(\mathbf{h}|\mathbf{h}^{k-1}_n), n=1..N$

endfor

Fase 2: pre-entrenamiento supervisado (inicialización de pesos) da capa de saída

Entrena os pesos $\mathbf{w}_j^H$ da capa de saída $(\mathbf{h}^H, \mathbf{y})$ usando $\{\mathbf{h}_n^H, \mathbf{y}_n\}_{n=1}^N$ para o entrenamiento

Fase 3: sintonización fina de tódalas neuronas mediante aprendizaxe supervisada

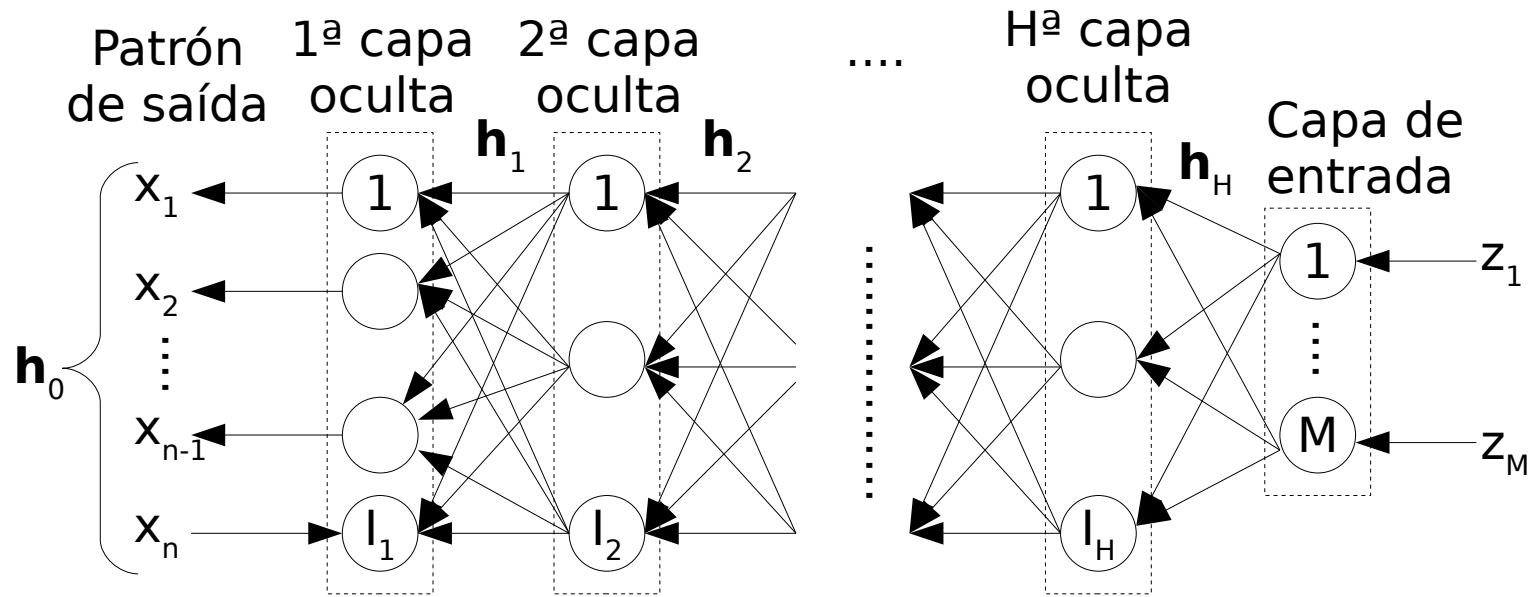
Usa os pesos $\{\Theta_k, \mathbf{b}_k, \mathbf{c}_k\}_{k=1}^H, \mathbf{w}_j^H$ como valores iniciais e entrena a rede completa mediante retropropagación usando $\{\mathbf{x}_n, \mathbf{y}_n\}_{n=1}^N$ como datos de entrenamiento

Algoritmo de entrenamiento ADAM

- Adaptive moment estimation
- Diseñado para Deep Learning. Combina RMSprop e descenso de gradiente con momento
- Alternativo a RBM

```
Vw=0;Sw=0;Vb=0;Sb=0 #V=momento,S=varianza
for k=1:K #k=época,K=nº épocas
    calcula Δw,Δb usando retropropagación
    Vw=β1Vw+(1-β1)Δw; Vb=β1Vb+(1-β1)Δb; # Momento
    Sw=β2Sw+(1-β2)|Δw|2; Sb=β2Sb+(1-β2)Δb2; # RMSprop
    Vw=Vw/(1-β1); Sw=Sw/(1-β2); Vb=Vb/(1-β1); Sb=Sb/(1-β2)
    w(t+1)=w(t)- $\frac{\mu V_w}{\epsilon + \sqrt{S_w}}$ ; b(t+1)=b(t)- $\frac{\mu V_b}{\epsilon + \sqrt{S_b}}$ 
endfor
```

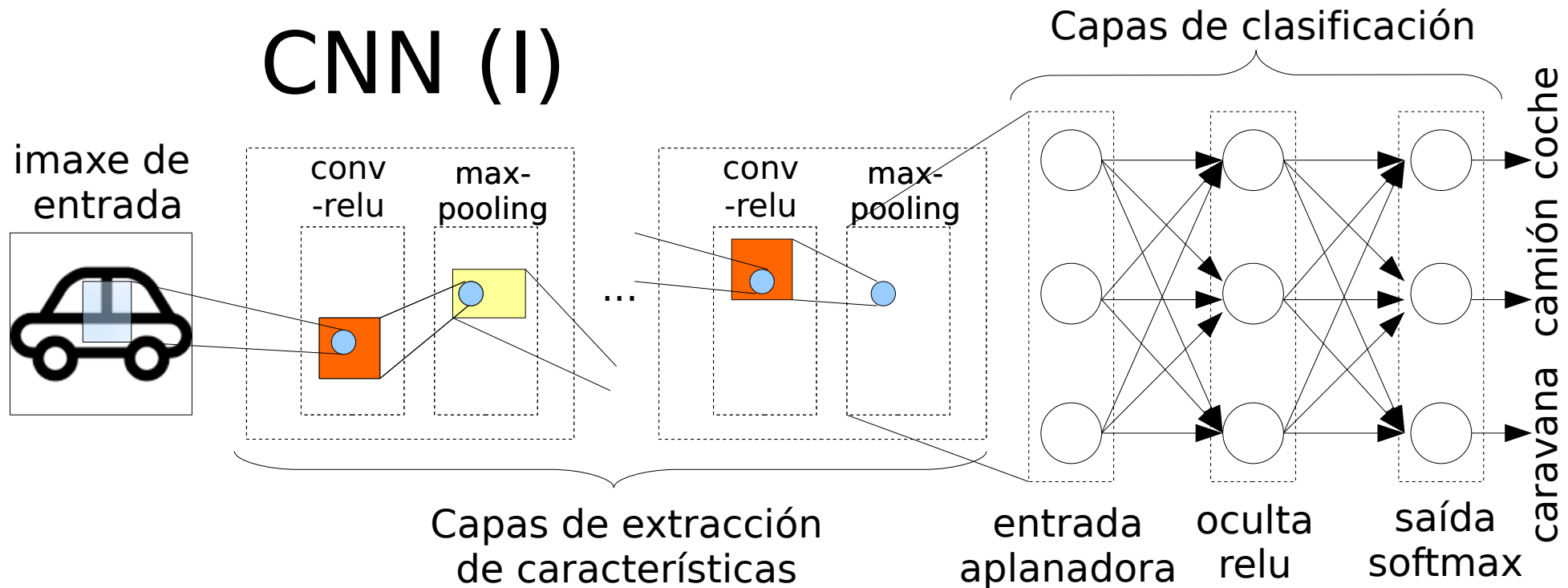
Rede de crenzas profunda (deep belief network, DBN)



- Modelo xerativo: non aprende a distribución dos datos: xera datos dacordo coa súa distribución: fluxo dereita→esquerda
- Calcula $\mathbf{h}_{H-1} \sim P(\mathbf{h} | \mathbf{h}_H)$, usando $\mathbf{h}_H = \mathbf{z}_i$ (un patrón de saída)
- Para $k=H-1, \dots, 1$, calcula $h_i^{k-1} \sim P(h_i | \mathbf{h}_k)$ para $i=1, \dots, I_k$
- O patrón de saída xerado é $\mathbf{x} = \mathbf{h}_0$

Rede convolucional

CNN (I)



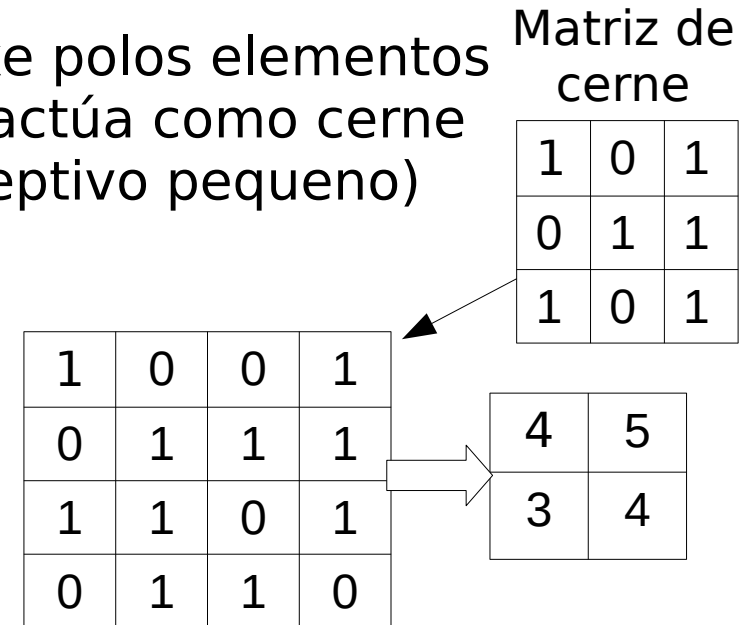
- Extracción de características da imaxe usando filtros. Cada filtro contén 2 capas (mapas): convolución-relu (entrada) e max-pooling (saída)
- Capas de clasificación: capas de aplanado, oculta e softmax
- Previas ao Deep Learning, baseadas na corteza visual do cerebro e na rede neuronal Neocognitron (anos 80)
- Recoñecemento de formas 2D (imaxe en escala de grises) ou 3D (imaxe en cor) con capas de neuronas 2D-3D: mapas de características

Rede convolucional (II)

- Invarianza a traslaci3ns, rotaci3ns, escalado e distorsi3ns
- Conectividade local entre neuronas e transformaci3ns da imaxe organizadas xer3rquicamente
- Cada neurona dun mapa recibe entradas so dende unha 3rea espec3fica do mapa anterior (campo receptivo) porque so ten pesos dende as neuronas dese campo
- Aprende a extraer automaticamente caracter3sticas locais da imaxe e conserva as s3as posici3ns relativas
- Os campos receptivos poden superpoñerse parcialmente, dando sa3das correlacionadas espacialmente
- Os nodos do mesmo mapa que reciben entradas dende os mesmos campos receptivos comparten pesos (menos par3metros libres, rede dispersa, invarianza a traslaci3ns)
- Moitas capas ocultas evitando problemas de entrenamiento

Capa conv-relu (I)

- Extrae características de alto nivel (p.ex. bordes, esquinas, extremos) da imaxe
- Convolución: multiplica os valores da imaxe polos elementos (0,1) da matriz de pesos da neurona, que actúa como cerne da convolución, de orde baixa (campo receptivo pequeno)
- Tamano da matriz de cerne: k
- Esta matriz percorre a imaxe (Esquerda→Dereita e Arriba→Abaixo)
- Logo, función de activación relu que propaga as características relevantes
- **Profundidade** (depth, d): nº de neuronas na capa max-pooling conectándose á mesma rexión da capa conv-relu
- **Paso** (stride, s): paso usado polo produto convolucional en dimensións X e Y da imaxe (e Z, se estamos en 3D); $s > 1$ reduce o mapa



Capa conv-relu (II)

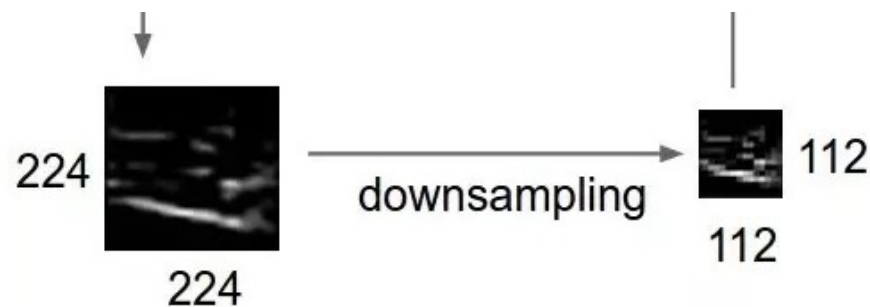
- **Recheo** (padding, p): nº de neuronas con valor 0 nas beiras da imaxe (opcional)

Evita a perda de información que se produce porque os píxeles das beiras se usan menos

- As neuronas da mesma zona (de tamaño $d \times d$) comparten pesos
- Cando existe na imaxe algunha estrutura cunha posición específica (p.ex. ollos), as neuronas non comparten pesos
- Na capa conv-relu, a saída dunha neurona é a función relu aplicada sobre a convolución (produto) entre o patrón 2D de entrada e o cerne (matriz cos pesos das neuronas)
- O tamaño do campo receptivo é un hiperparámetro sintonizábel da CNN
- A activación relu anula as convolucións negativas

Capa max-pooling (I)

- Divide a imaxe en rectángulos (usualmente 2x2) non superpostos
- Selecciona o máximo de cada rectángulo
- A saída é unha versión reducida (de menor resolución) da imaxe: subsampling, usualmente con paso $s=2$ (reduce á metade)



12	4	5	13	⇒		
7	32	1	25		32	25
42	21	22	90		51	90
51	18	61	30			

- Reduce a dimensionalidade do mapa, o consumo de memoria, o custe computacional e os problemas de sobreaprendizaxe porque quedan menos parámetros libres

Capa max-pooling (II)

- Extrae características dominantes invariantes a traslacións e suprime ruído
- A sucesión de filtros reduce progresivamente o tamaño da imaxe
- O número m de neuronas dunha capa max-pooling é:

$$m = \left\lfloor 1 + \frac{w - k + 2p}{s} \right\rfloor$$

w =nº neuronas da capa conv-relu; k =tamaño do kernel;
 p =recheo; s =paso. O valor m debe ser enteiro

- A posición absoluta dunha característica é menos importante que a súa posición relativa ás outras características

Expresións conv-relu e max-pooling

- Capa conv-relu r-ésima: entrada $\mathbf{A}^r$ de orde 3D de tamaño (n_x^r, n_y^r, n_c^r) , onde $n_c^r = n^0$ canles de cor
- Cerne $\mathbf{K}^r = \{K_{ijk}^r\}$ (pesos das neuronas) de tamaño (f_r, f_r, n_c^r)
- Convolución de $\mathbf{A}^r$ e $\mathbf{K}^r$:
$$C_{xy}^r(A^r, K^r) = \sum_{i=1}^{n_x} \sum_{j=1}^{n_y} \sum_{k=1}^{n_c} K_{ijk}^r A_{x+i-1, y+j-1, k}^r$$
- Tamaño de C_{xy}^r : $(n_x + 2p - f, n_y + 2p - f)$ se $s=0$ (p =recheo, s =paso)

$$\left(\left\lfloor \frac{n_x + 2p - f}{2} + 1 \right\rfloor, \left\lfloor \frac{n_y + 2p - f}{2} + 1 \right\rfloor \right) \text{ se } s > 0$$

$R(t) = \max(0, t)$


- Saída da capa conv-relu: $a_{xyz}^r = R(C_{xy}^r)$. Pesos entrenábeis: $\{K_{ijk}^r\}$
- Capa max-pool: saída a_{xyz}^r de tamaño f_p^r : $a_{xyz}^r = \max \{a_{x+i-1, y+j-1, z}^{r-1}\}_{ij=1}^{f_p^r}$
- Esta última capa non ten pesos entrenábeis

Expresións das capas de clasificación

- Capas completamente interconectadas
- Entrada: **aplanado**: transforma imaxe **A** en vector **z**:

$$\mathbf{z} = \text{flat}(\mathbf{A}), \mathbf{A} = \{a_{xyz}\}, x = 1..n_x, y = 1..n_y, z = 1..n_c$$

- Oculta: activación **relu**: saída u_i da neurona $i=1..n$:

$$u_i = R\left(\sum_{j=1}^n w_{ij} a_j + b_i\right) \quad R(t) = \max(0, t)$$

- Saída y_i , $i=1..C$ para clasificación con C clases: función de activación **softmax** $S(\mathbf{u})$

$$y_i = S_i(\mathbf{u}) = \frac{e^{u_i}}{\sum_{j=1}^n e^{u_j}}, i = 1..C$$

Rede convolucional (III)

- Regularización por **abandono** (dropout): en cada etapa do entrenamento, suprímense neuronas (e as súas conexións)

Supresión aleatoria con probabilidade $1-p$ ($p=0.5$ en capas ocultas, p moi baixo en capas de entrada)

Entrénase a rede reducida para acelerar o entrenamento

No teste, reincorpóranse as neuronas suprimidas cos seus pesos orixinais, e pondérase por p a saída de cada nodo

- Hiperparámetros da CNN:
 - 1) Nº de filtros: maior cantos máis datos dispoñíbeis
 - 2) Forma do filtro: depende do tipo de imaxes e dos obxectos a detectar, existen moitas formas
 - 3) Forma do max-pooling: usualmente 2×2 , con imaxes grandes 4×4 . Meirande pooling reduce moito o tamaño e pérdese información

Bases de datos de imaxes

- MNIST handwritten datasets: 60,000 train, 10,000 test
- Google house numbers from street view: 600,000 imaxes de números
- CIFAR-10: 60,000 imaxes cor 32x32 de 10 clases
- ImageNet: > 150 GB
- Tiny Images: 80 millóns de imaxes
- Flickr dataset: 100 millóns de imaxes
- Competición ILSVRC: ImageNet large scale visual recognition challenge
- Redes CNN pre-entrenadas: LeNet, AlexNet, VGGNet, GoogLeNet, ResNet, ZFNet

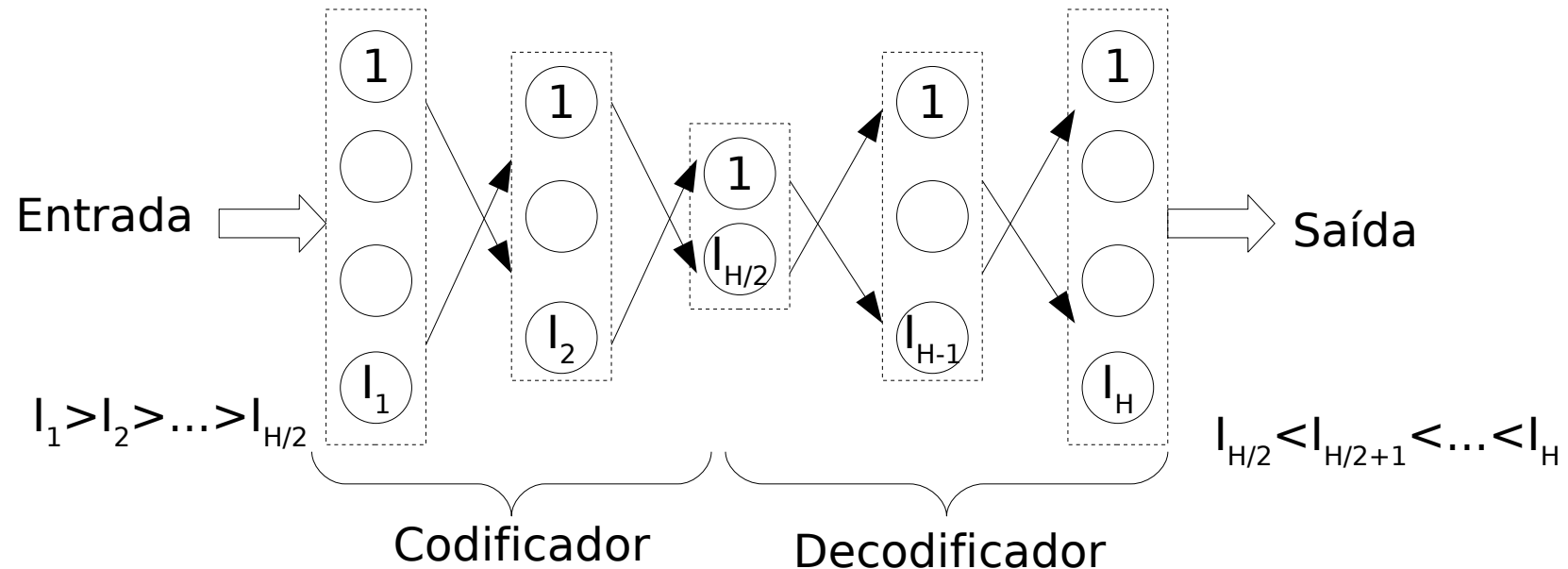
Rede **Alexnet** (ILSVRC-2012): imaxe 224x224x3 (RGB)

- Filtro 1: conv-relu, 96 mapas de características de tamaño 11x11 con paso 4, reduce a imaxe a 55x55x96; max-pooling con filtro 3x3 e paso 2, reduce a 27x27x96
- Filtro 2: conv-relu, 256 mapas 5x5 paso 1; max-pooling 3x3 paso 2; reduce a 13x13x256
- Filtro 4: conv-relu 3x3, 384 mapas, paso 1
- Filtro 4: conv-relu 3x3, 384 mapas, paso 1
- Filtro 5: conv-relu 3x3, 256 mapas, paso 1; max-pooling 3x3 paso 2, 256 mapas
- Capa 6: full-connected aplanadora con 9216 neuronas
- Capas 7-8: full-connected, 4096 neuronas, activación relu
- Capa 9: full-connected, activación softmax, 1000 neuronas

Características de Alexnet

	Tipo	Mapas	Tamano	Cerne	Paso	Activación
Filtro	Imaxe	1	227x227x3			
1	conv-relu	96	55x55x96	11x11	4	relu
	max-pooling	96	27x27x96	3x3	2	relu
2	conv-relu	256	13x13x256	5x5	1	relu
	max-pooling	256	13x13x256	3x3	2	relu
3	conv-relu	384	13x13x384	3x3	1	relu
4	conv-relu	384	13x13x384	3x3	1	relu
5	conv-relu	256	13x13x256	3x3	1	relu
	max-pooling	256	6x6x256	3x3	2	relu
6	full-connected		9216			relu
7	full-connected		4096			relu
8	full-connected		4096			relu
9	full-connected		1000			softmax

Rede autocodificadora profunda (deep autoencoder)



- Úsase para reducir a dimensionalidade dos datos
- Codificador: primeira metade da rede, reduce o tamaño dos datos
- Decodificador: segunda metade da rede, aumenta o tamaño dos datos
- Capa central: datos con dimensionalidade reducida

Autocodificadores (II)

- Rede neuronal profunda con H capas, I_k decrecente para $k=1\dots H/2$ e I_k crecente para $k=H/2+1\dots H$
- Capas con funcións de activación binaria agás a $K/2$ e a H , que usan activación linear
- Entréñanse con $\{\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_n\}_{n=1}^N$: aprende a reconstruir os datos na capa de saída
- A capa intermedia $k=K/2$ (linear) é unha representación dos datos cunha dimensionalidade reducida
- O decodificador pode empregarse para xerar datos novos, actuando como modelo xerativo dos datos
- Entrenamento por retropropagación, con función de activación sigmoide ou relu