

Sistemas Inteligentes para Gestión en la Empresa

Máster en Ingeniería Informática

04. Modelos avanzados – *Deep Learning*



UNIVERSIDAD
DE GRANADA



Deep Learning

Bibliografía

F. Chollet, J. Allaire (2018) Deep Learning with R. Manning.

F. Berzal (2018) Redes Neuronales & Deep Learning. <https://sites.google.com/view/redes-neuronales/>

I. Goodfellow, Y. Bengio, A. Courville (2016) *Deep Learning*. MIT Press.
<http://www.deeplearningbook.org>

A. Trask (2018) *Grokking Deep Learning*. Manning.

M. Nielsen (2017) *Neural Networks & Deep Learning*. <http://neuralnetworksanddeeplearning.com>

DeepLearningAI: <https://www.deeplearning.ai>

FastAI: <https://course.fast.ai>

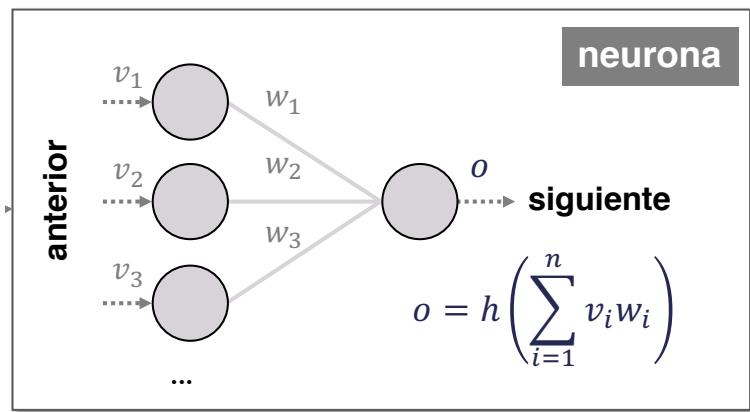
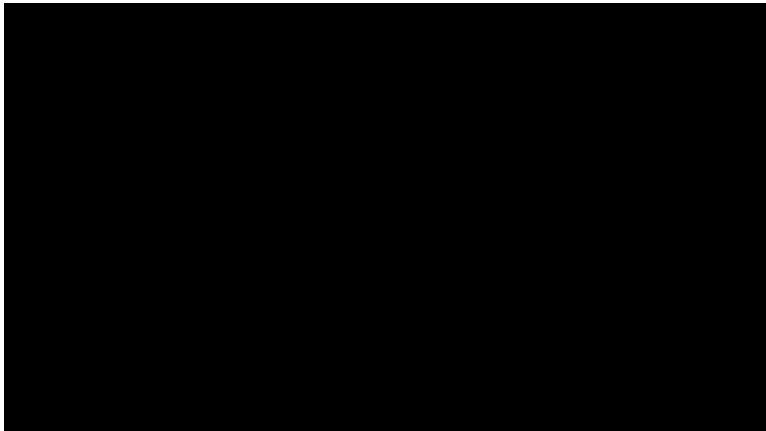
F. Chollet (2017) Deep Learning with Python. Manning.

Índice

- ▶ 1. Fundamentos
- 2. Redes convolutivas
- 3. Mejora de aprendizaje
- 4. Gestión del proceso de aprendizaje
- 5. Transferencia de aprendizaje
- 6. Modelos avanzados

Deep Learning

Fundamentos



Carlos Santana Vega (DotCSV)

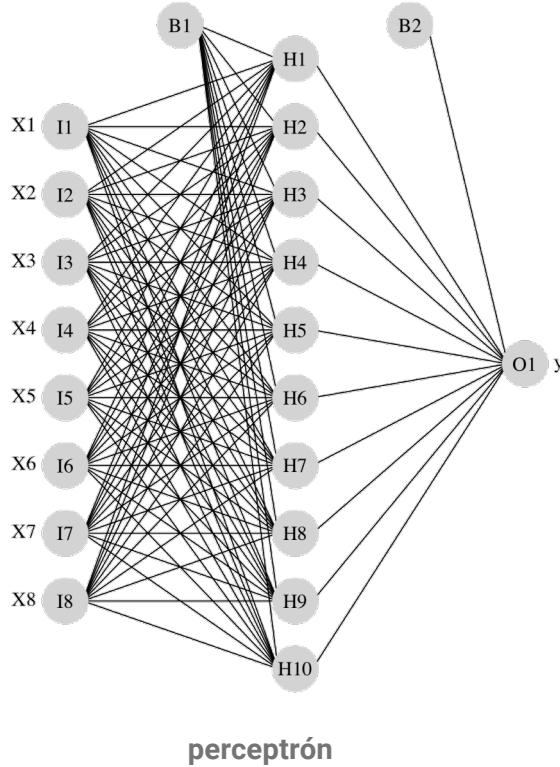


<https://youtu.be/MRIv2IwFTPq>

Partes 1, 2

Deep Learning

Fundamentos ► Elementos



Entrada (n)

$$x = (x_1, \dots, x_n)$$

Salidas capa oculta (m)

$$H_j = h\left(\sum_{i=1}^n x_i w_{ij} + B_1\right)$$

dot product
producto escalar

$$x \cdot w = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} [w_1 \quad \dots \quad w_n]$$

Salidas finales (k)

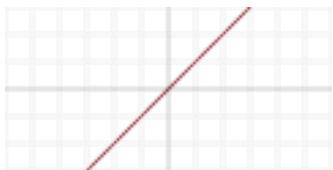
$$O_k = h'\left(\sum_{j=1}^m H_j w_{jk} + B_2\right)$$

Deep Learning

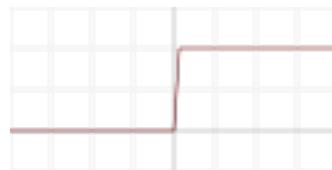
Fundamentos ► Elementos

Función de activación h

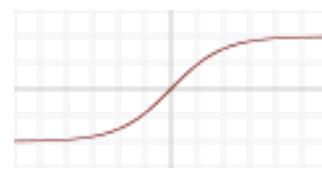
Y. Rebouças (2020) A comprehensive view on activation functions.
<https://towardsdatascience.com/a-comprehensive-guide-on-activation-functions-b45ed37a4fa5>



lineal



salto



sinusoidal
/ sigmoide



rectificador lineal (ReLU)

Funciones de salida h'

$$f_i(\vec{o}) = \frac{e^{o_i}}{\sum_{j=1}^{|o|} e^{o_j}}$$

softmax

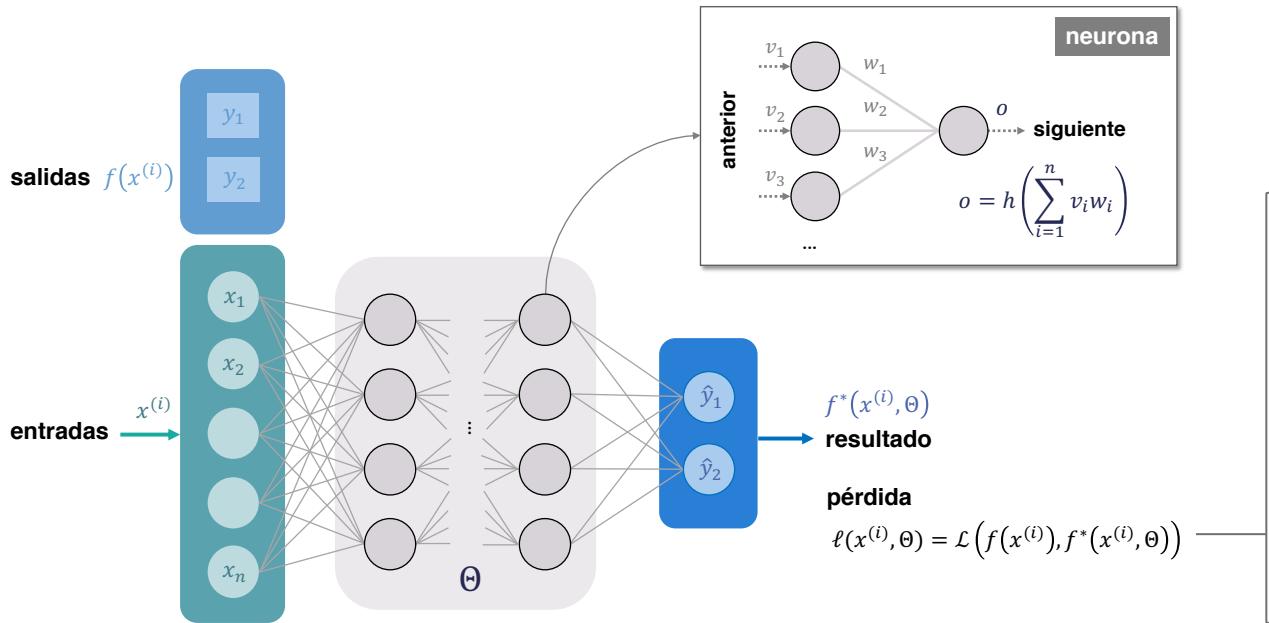
$$f(\vec{o}) = \max_i o_i$$

máximo

Deep Learning

Fundamentos ► Elementos

Error de salida – Función de pérdida



$$MSE = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m (y_j - \hat{y}_j)^2$$

error cuadrático medio

$$H = - \sum_{j=1}^m y_j * \log(\hat{y}_j)$$

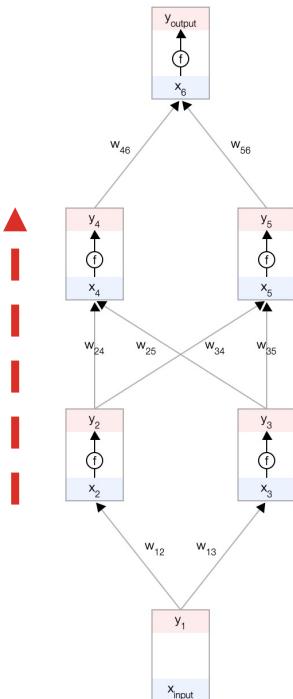
entropía cruzada

Deep Learning

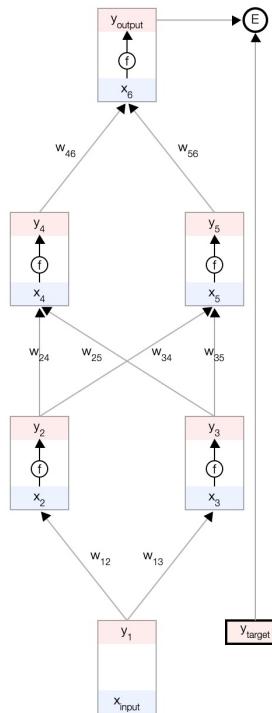
Fundamentos ► Entrenamiento



Introducción al aprendizaje automático
http://sl.ugr.es/0atf_v2



cálculo de la salida (*forward pass*)



cálculo del error

ajustar Θ para minimizar E



Deep Learning

Fundamentos ► Entrenamiento

datos históricos

	x_1	\dots	x_n	y_1	\dots	y_m
$x^{(1)}$						
$x^{(2)}$						
\dots						
$x^{(K)}$						

random

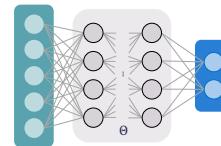
datos entrenamiento [80%]

	x_1	\dots	x_n	y_1	\dots	y_m
$x^{(i)}$						
\dots						
$x^{(K')}$						



$$\Theta = \arg \min_{\Theta} \frac{1}{K'} \sum_{i=1}^{K'} \ell(x^{(i)}, \Theta)$$

optimización



datos validación [20%]

	x_1	\dots	x_n	y_1	\dots	y_m
$x^{(i)}$						
\dots						
$x^{(K'')}$						

evaluación



accuracy
sensitivity – specificity
...

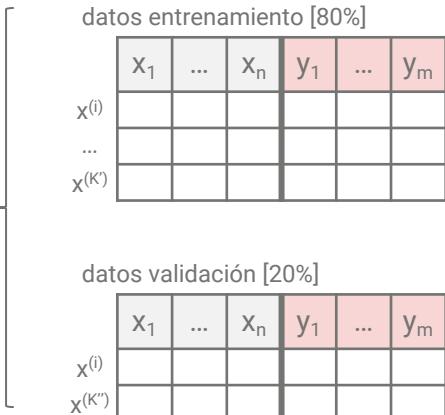
Deep Learning

Fundamentos ► Entrenamiento

datos históricos

	x_1	\dots	x_n	y_1	\dots	y_m
$x^{(1)}$						
$x^{(2)}$						
\dots						
$x^{(K)}$						

random



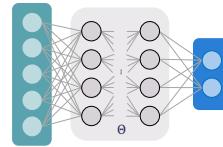
datos novedosos

x

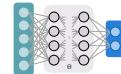
	x_1	\dots	x_n

$$\Theta = \arg \min_{\Theta} \frac{1}{K'} \sum_{i=1}^{K'} \ell(x^{(i)}, \Theta)$$

optimización



evaluación



accuracy
sensitivity – specificity
...

test

The diagram shows a vector of predicted labels $\hat{y}_1, \dots, \hat{y}_m$.

\hat{y}_1	\dots	\hat{y}_m

Deep Learning

Fundamentos ► Entrenamiento

optimización

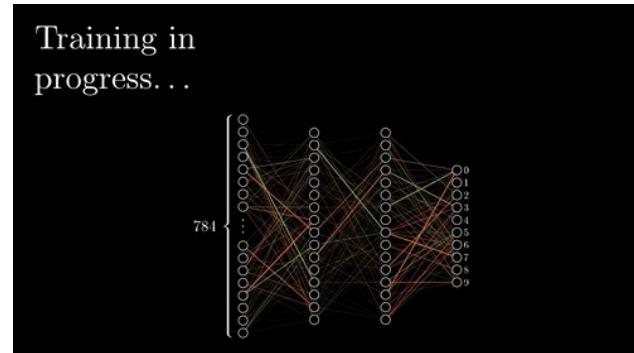
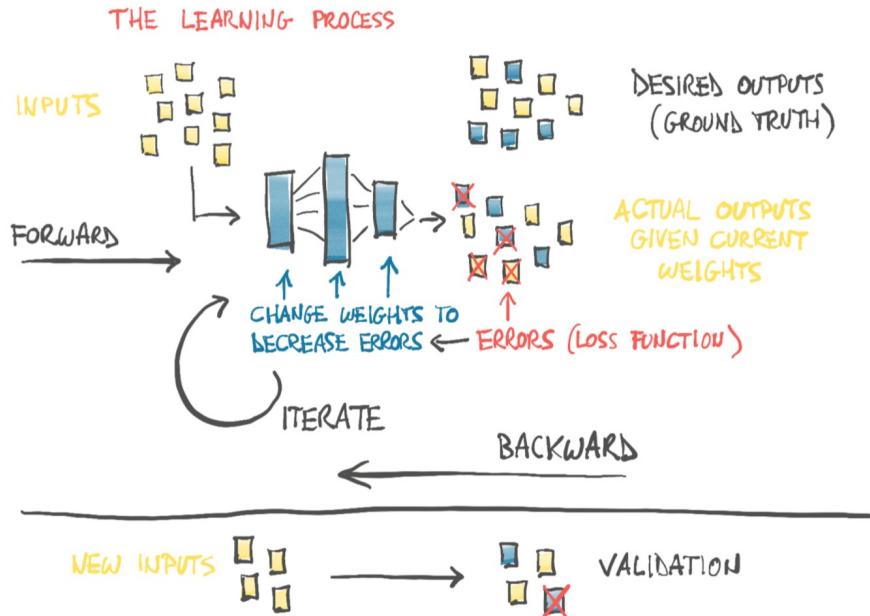


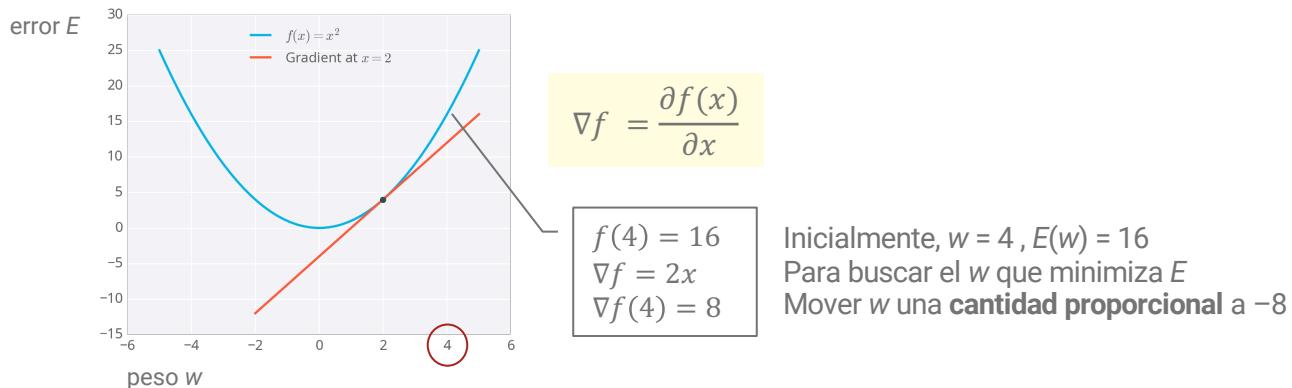
Imagen: [3Blue1Brown](#)

Deep Learning

Fundamentos ► Entrenamiento

Gradiente descendente

La actualización depende del gradiente de la función de error



B. Rohrer (2020) How optimization works. https://brohrer.github.io/how_optimization_works_1.html

Deep Learning

Fundamentos ► Entrenamiento

Backpropagation

Actualiza los pesos de la red propagando los errores desde la capa de salida hasta la capa inicial

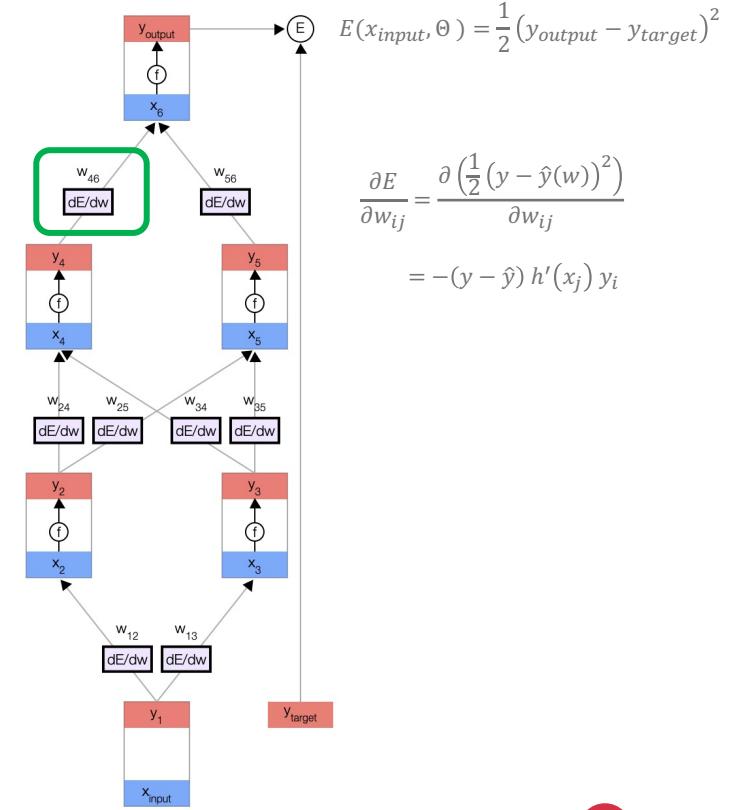
$$\nabla E = \frac{\partial f(w)}{\partial w}$$

$$\Delta w_{ij} \propto -\frac{\partial E}{\partial w_{ij}}$$

$$\boxed{\Delta w_{ij} = -\eta \frac{\partial E}{\partial w_{ij}}}$$

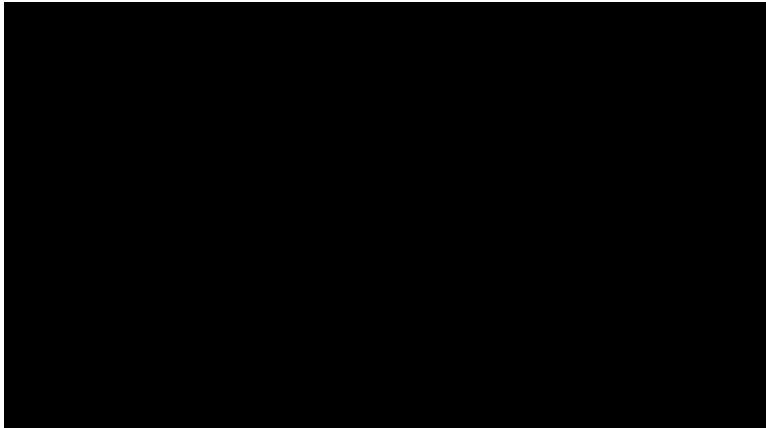


Introducción al aprendizaje automático
http://sl.ugr.es/0atf_v2



Deep Learning

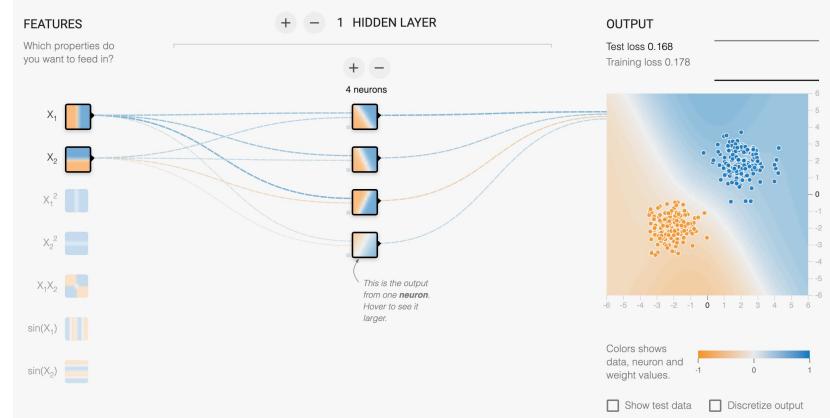
Fundamentos ► Entrenamiento



Carlos Santana Vega (DotCSV)



<https://youtu.be/MRlV2lwFTPg>
Partes 3, 3.5



Tensorflow Playground



<http://sl.ugr.es/tfplayground>

Deep Learning

Fundamentos ► Entrenamiento

Algoritmos de optimización

En cada iteración...

$$\Delta w_{ij} = -\eta \frac{\partial E}{\partial w_{ij}}$$

Gradiente descendente por lotes

calcula gradientes para todo el conjunto de entrenamiento

Gradiente descendente estocástico

calcula gradientes para una sola instancia del conjunto de entrenamiento

Gradiente descendente (estocástico) con mini-lotes

calcula gradientes para un subconjunto de instancias del conjunto de entrenamiento

... y actualiza pesos

Tasas de aprendizaje adaptativas:

Adagrad, Adadelta, RMSProp, Adam, Nadam

S. Ruder (2016) An overview of gradient descent optimization algorithms. <https://arxiv.org/abs/1609.04747>

Deep Learning

Fundamentos ► Desarrollo

Herramientas

Tensorflow [Google]

<https://www.tensorflow.org>

PyTorch [Facebook]

<https://pytorch.org>

CNTK [Microsoft]

<https://www.microsoft.com/en-us/cognitive-toolkit>

MXNET [Apache]

<https://mxnet.incubator.apache.org>

Theano [MILA]

<http://deeplearning.net/software/theano/>

Keras

<https://keras.io>



Deep Learning

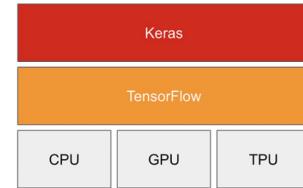
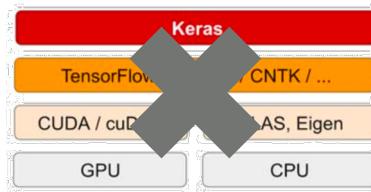
Fundamentos ► Desarrollo

Local

https://tensorflow.rstudio.com/reference/keras/install_keras/

- 1) CUDA (si GPU)
- 2) TensorFlow (+ Keras)

```
library(keras)
install_keras(
  method = "conda",
  tensorflow = "default",
  envname = "r-tensorflow"
)
```



Deep learning development:
layers, models, optimizers, losses,
metrics...

Tensor manipulation infrastructure:
tensors, variables, automatic
differentiation, distribution...

Hardware: execution

Amazon EC2

https://tensorflow.rstudio.com/tools/cloud_server_gpu.html

- 1) Cuenta en AWS
- 2) Usar AMI [RStudio Server with Tensorflow-GPU for AWS](#), p2.xlarge instance (~ \$0.90/hour)
- 3) Acceder a RStudio Server en el puerto :8787 (rstudio-user / <AWS Instance ID>)

```
library(keras)
```

Google Cloud

Seminario 3 | [https://tensorflow.rstu...](https://tensorflow.rstudio.com/installation/gpu/cloud_server_gpu/)

Docker

[https://github.com/rock...](https://github.com/rocker-org/ml/)

Deep Learning

Fundamentos ► Desarrollo



titanic-dl.Rmd

Creacion de la red

```
model <- keras_model_sequential()
model <- model %>%
layer_dense(units = 32, activation = "relu", input_shape = c(ncol(data) - 1)) %>%
layer_dense(units = 16, activation = "relu") %>%
layer_dense(units = 1, activation = "sigmoid")
```

Compilar modelo

```
model %>% compile(
  loss = 'binary_crossentropy',
  metrics = c('accuracy'),
  optimizer = optimizer_adam()
)
```

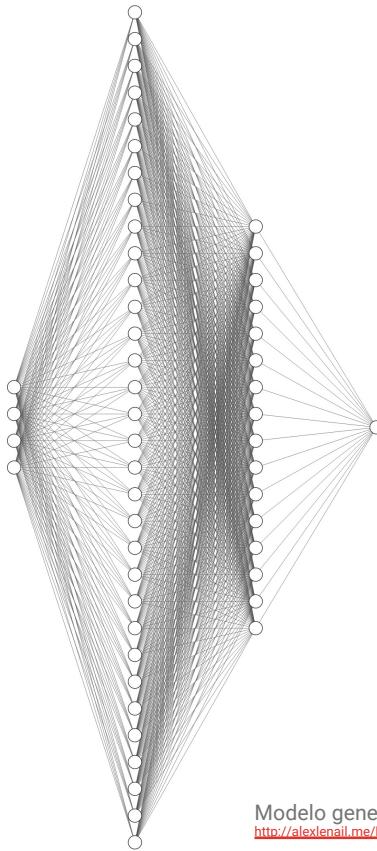
Preparar entrenamiento y validación

Entrenar modelo

```
history <- model %>%
  fit(
  x_train, y_train,
  epochs = 20,
  batch_size = 100,
  validation_split = 0.2
)
```

Deep Learning

Fundamentos ► Desarrollo



Modelo generado con:
<http://alexlenail.me/NN-SVG/>

Deep Learning

Fundamentos ► Desarrollo

Evaluar modelo con conjunto de datos adicional

```
model %>% evaluate(x_val, y_val)
```



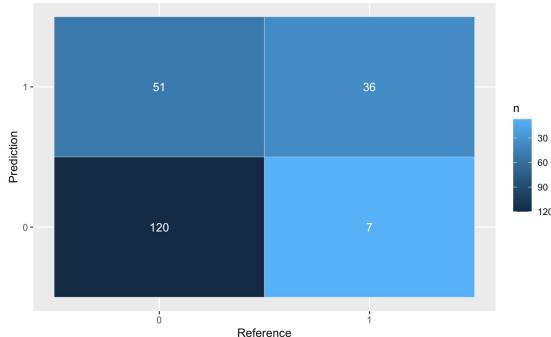
titanic-dl.Rmd

Predecir con modelo

```
predictions <- model %>% predict_classes(x_val)
```

Validar con conjunto de datos adicional

```
cm <- confusionMatrix(as.factor(y_val), as.factor(predictions))
cm_prop <- prop.table(cm$table)
```



Índice

1. Fundamentos
- ▶ 2. Redes convolutivas
3. Mejora de aprendizaje
4. Gestión del proceso de aprendizaje
5. Transferencia de aprendizaje
6. Modelos avanzados

Deep Learning

Redes convolutivas

Aproximaciones a la clasificación de imágenes

Codificación directa



28

MNIST

28

Y. Lan, L. Lean (2001) Handwritten digit recognition using perceptron neural networks [[link](#)]

0	0	0	0	0
---	---	---	---	---

...	0	0	0	0	0
-----	---	---	---	---	---

784

Multi clasificador



mnist.R

```
$loss  
[1] 0.1518216
```

```
$acc  
[1] 0.9803
```

Deep Learning

Redes convolutivas

Aproximaciones a la clasificación de imágenes

Pre-procesamiento y cálculo de características

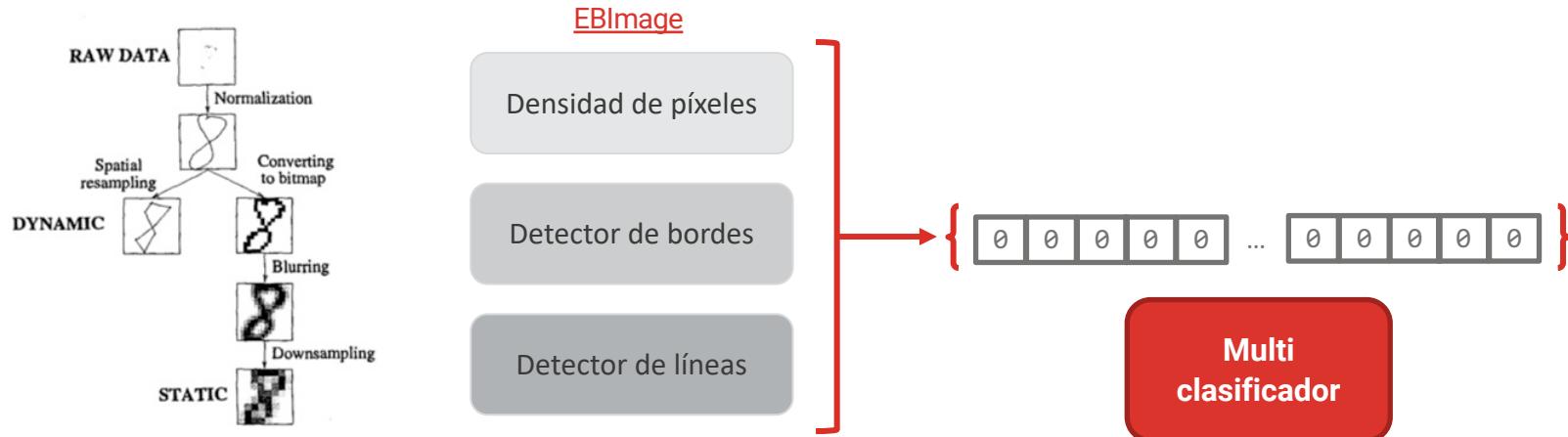


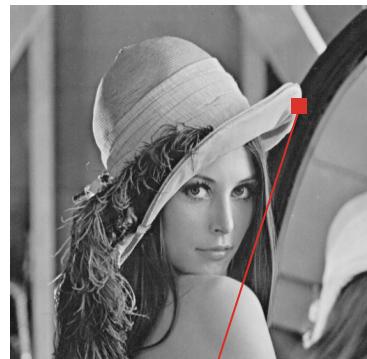
Figure 1: The stages of preprocessing.

F. Alimoglu, E. Alpaydin (1997) Combining multiple representations and classifiers for pen-based handwritten digit recognition. Proceedings of the 4th International Conference on Document Analysis and Recognition.

Deep Learning

Redes convolutivas

Pre-procesamiento y extracción de características



filtro kernel

$$\begin{bmatrix} -1 & -1 & -1 \\ -1 & 8 & -1 \\ -1 & -1 & -1 \end{bmatrix}$$



$$\begin{array}{cccc} 221^{-1} & 217^{-1} & 218^{-1} \\ 213^{-1} & \textbf{203}^{+8} & 182^{-1} \\ 140^{-1} & 105^{-1} & 66^{-1} \end{array}$$

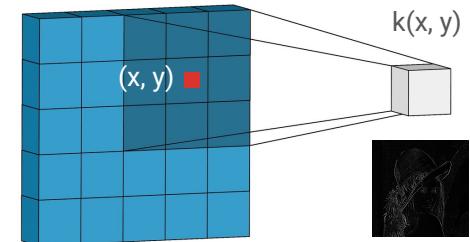


$$\begin{array}{ccccc} 30 & 44 & 132 \\ 207 & \textbf{255}^0 & 232 \\ 79 & 0 & 0 \end{array}$$

$$k(414, 149) = 8 \times 203 - 221 - 217 - 218 - 213 - 182 - 140 - 105 - 66$$

$$\begin{bmatrix} -1 & -1 & -1 \\ -1 & 8 & -1 \\ -1 & -1 & -1 \end{bmatrix}$$

•



$k(x, y)$

Deep Learning

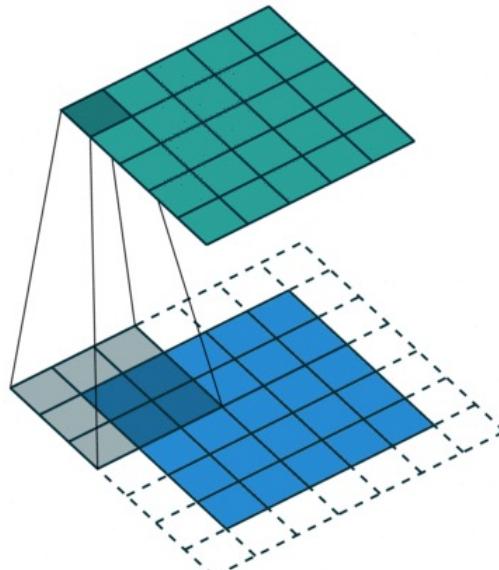
Redes convolutivas

Pre-procesamiento y extracción de características

3 ₀	3 ₁	2 ₂	1	0
0 ₂	0 ₂	1 ₀	3	1
3 ₀	1 ₁	2 ₂	2	3
2	0	0	2	2
2	0	0	0	1

0	1	2
2	2	0
0	1	2

12.0	12.0	17.0
10.0	17.0	19.0
9.0	6.0	14.0



I. Shafkat (2018) Intuitively Understanding Convolutions for Deep Learning [[link](#)]

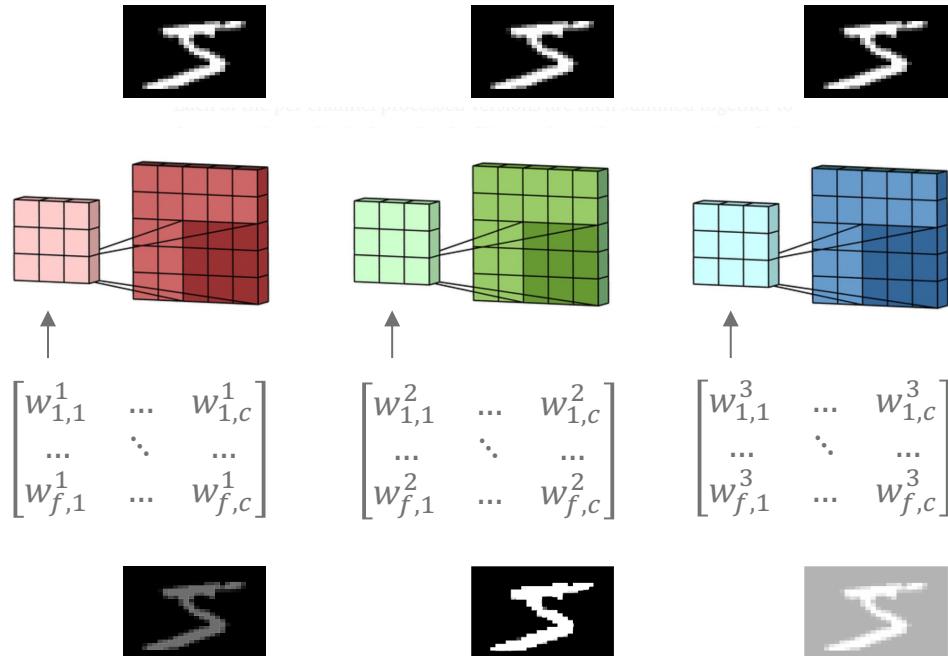
V. Dumoulin, F. Visin (2018) A guide to convolution arithmetic for deep learning [[link](#)]

Deep Learning

Redes convolutivas

Red convolutiva

Capas de convolución



Deep Learning

Redes convolutivas

Red convolutiva

Pooling

max-pooling 2x2, stride = 2

1	1	2	4
5	6	7	8
3	2	1	0
1	2	3	4

max pool with 2x2 filters
and stride 2

6	8
3	4

max-pooling 3x3, stride = 1

3	3	2	1	0
0	0	1	3	1
3	1	2	2	3
2	0	0	2	2
2	0	0	0	1

3.0	3.0	3.0
3.0	3.0	3.0
3.0	2.0	3.0

3	3	2	1	0
0	0	1	3	1
3	1	2	2	3
2	0	0	2	2
2	0	0	0	1

3.0	3.0	3.0
3.0	3.0	3.0
3.0	2.0	3.0

3	3	2	1	0
0	0	1	3	1
3	1	2	2	3
2	0	0	2	2
2	0	0	0	1

3.0	3.0	3.0
3.0	3.0	3.0
3.0	2.0	3.0

3	3	2	1	0
0	0	1	3	1
3	1	2	2	3
2	0	0	2	2
2	0	0	0	1

3	3	2	1	0
0	0	1	3	1
3	1	2	2	3
2	0	0	2	2
2	0	0	0	1

3.0	3.0	3.0
3.0	3.0	3.0
3.0	2.0	3.0

3	3	2	1	0
0	0	1	3	1
3	1	2	2	3
2	0	0	2	2
2	0	0	0	1

3	3	2	1	0
0	0	1	3	1
3	1	2	2	3
2	0	0	2	2
2	0	0	0	1

3	3	2	1	0
0	0	1	3	1
3	1	2	2	3
2	0	0	2	2
2	0	0	0	1

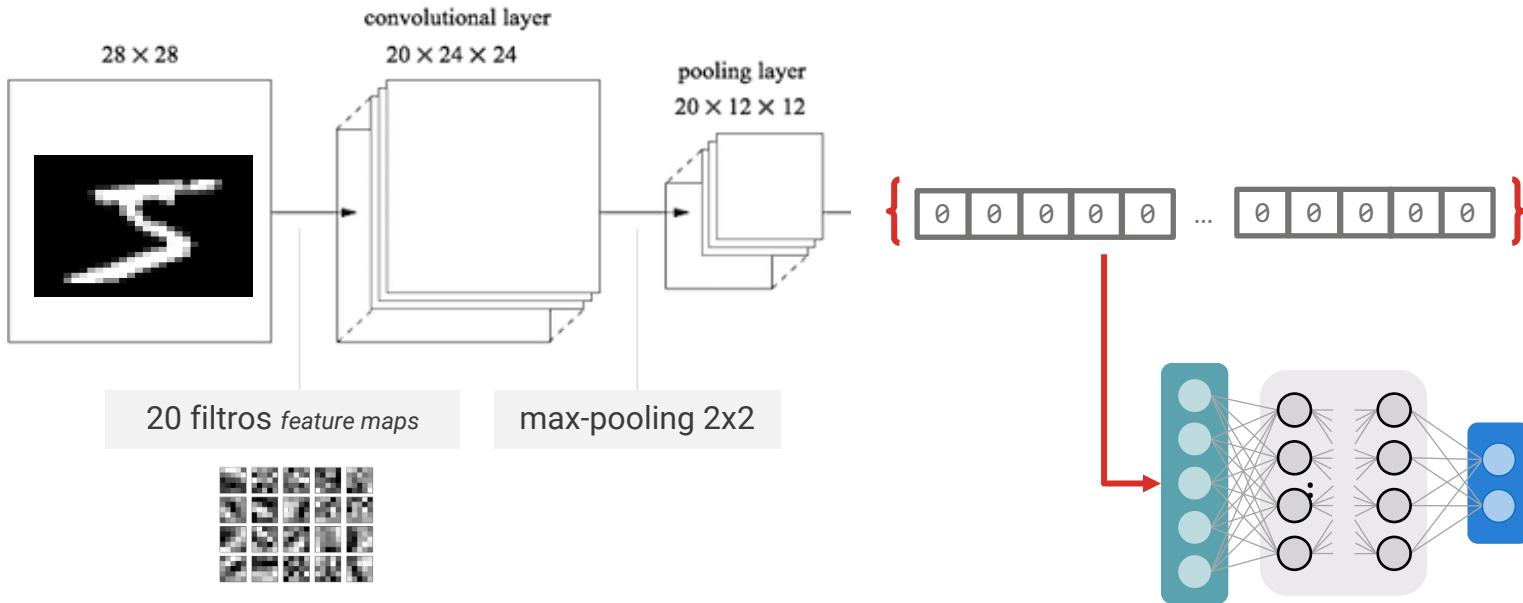
3.0	3.0	3.0
3.0	3.0	3.0
3.0	2.0	3.0

Deep Learning

Redes convolutivas

Red convolutiva

Fully-connected (densa)

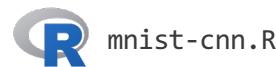
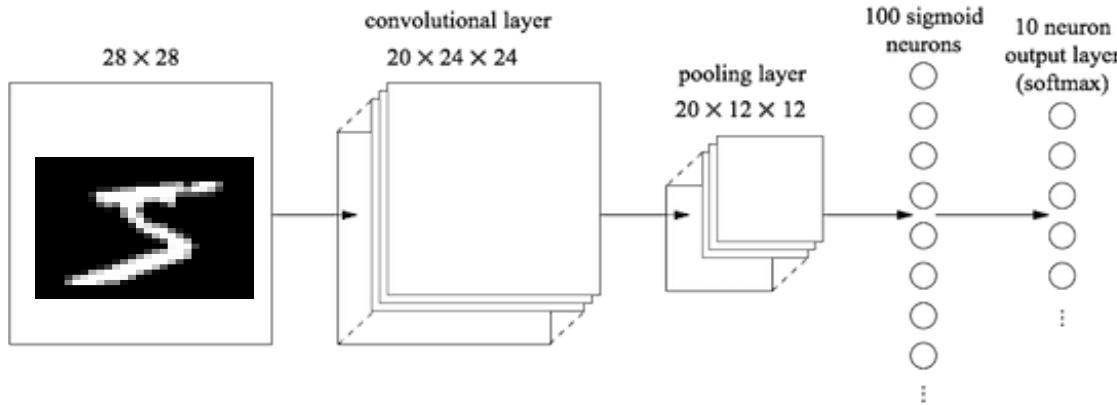


Deep Learning

Redes convolutivas

Red convolutiva

Fully-connected



```
model <- keras_model_sequential()
model %>%
  layer_conv_2d(filters = 20, kernel_size = c(5, 5), activation = "relu", input_shape = c(28, 28, 1)) %>%
  layer_max_pooling_2d(pool_size = c(2, 2)) %>%
  layer_flatten() %>%
  layer_dense(units = 100, activation = "sigmoid") %>%
  layer_dense(units = 10, activation = "softmax")
```

```
$loss
[1] 0.04407667

$acc
[1] 0.9854
```

Deep Learning

Redes convolutivas

Arquitectura

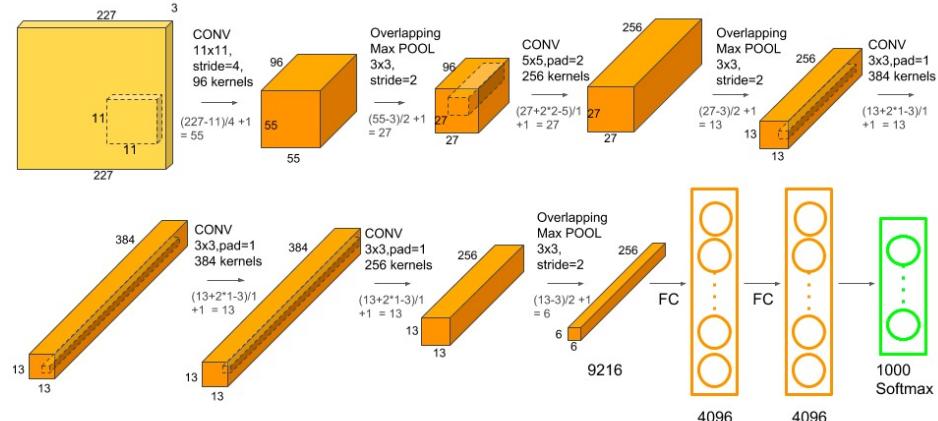
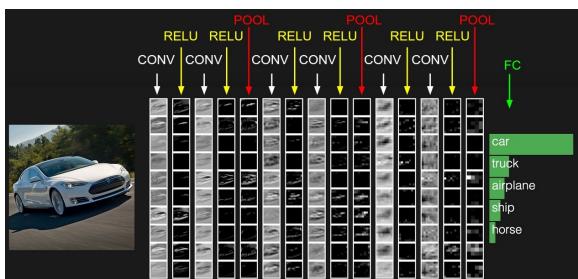
INPUT (entrada)

CONV (convolución)

RELU (activación)

POOL (reducción de dimensionalidad)

FC (totalmente conectada)



AlexNet (2012)

15.3% error en ImageNet
(siguiente: 26.2%)

<https://www.learnopencv.com/understanding-alexnet/>

Índice

1. Fundamentos
2. Redes convolutivas
- ▶ 3. Mejora de aprendizaje
4. Gestión del proceso de aprendizaje
5. Transferencia de aprendizaje
6. Modelos avanzados

Deep Learning

Mejora del aprendizaje

Nota sobre reproducibilidad de resultados en R Keras

El proceso de entrenamiento de una red neuronal en Keras comprende varios pasos que introducen aleatoriedad en el proceso y dificultan la reproducibilidad de los resultados

- Inicialización aleatoria de los pesos de la red
- Uso de gradiente descendente estocástico con mini-lotes
- Otros métodos con aleatoriedad (por ejemplo, *dropout*)
- Ejecución paralela en GPU
- etc.

Es posible conseguir resultados más reproducibles fijando algunas de las semillas aleatorias que utiliza Keras con el *backend* de Tensorflow [use session with seed](#)

Esta función **desactiva el uso de GPU**

Los ejemplos que se muestran en el resto del tema **NO** aseguran reproducibilidad. Por lo tanto, en ocasiones puedes obtener salidas diferentes con el mismo fichero

En una experimentación exhaustiva, se proporcionarían valores medios de las métricas obtenidos con múltiples repeticiones

Deep Learning

Mejora del aprendizaje

Perros y gatos

Carga de datos

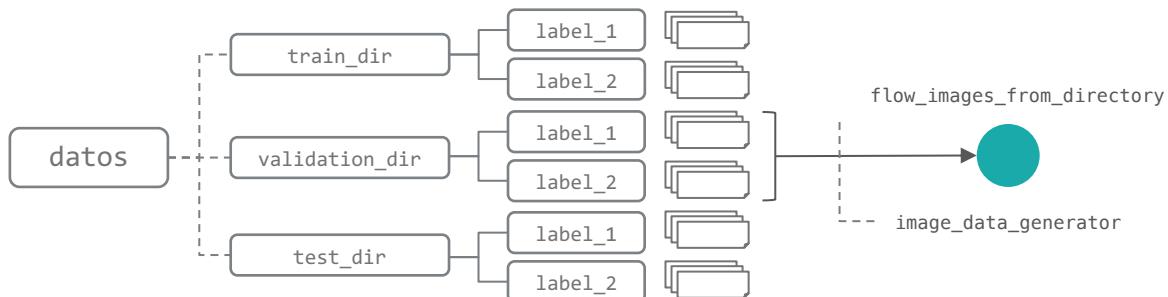
R dogsVScats.R

```
# https://tensorflow.rstudio.com/keras/reference/image_data_generator.html
train_datagen      <- image_data_generator(rescale = 1/255)
validation_datagen <- image_data_generator(rescale = 1/255)
test_datagen       <- image_data_generator(rescale = 1/255)

# https://tensorflow.rstudio.com/keras/reference/flow_images_from_directory.html
train_data <- flow_images_from_directory(
  directory = train_dir,
  generator = train_datagen,
  target_size = c(150, 150),    # (w, h) --> (150, 150)
  batch_size = 20,             # grupos de 20 imágenes
  class_mode = "binary"        # etiquetas binarias
)
```



IMAGENET



Deep Learning

Mejora del aprendizaje

Perros y gatos

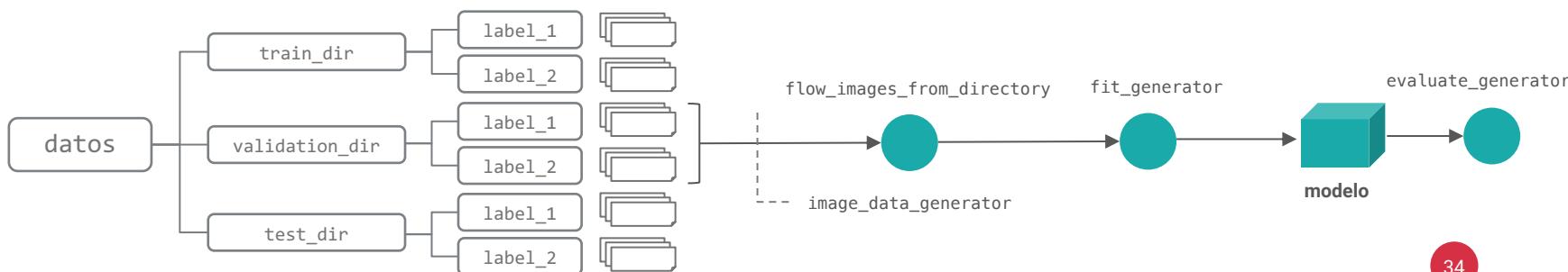
Entrenamiento, validación y test



dogsVScats.R

```
# https://tensorflow.rstudio.com/keras/reference/fit_generator.html
history <- model %>%
  fit_generator(
    train_data,
    steps_per_epoch = 100,
    epochs = 30,
    validation_data = validation_data,
    validation_steps = 50
  )

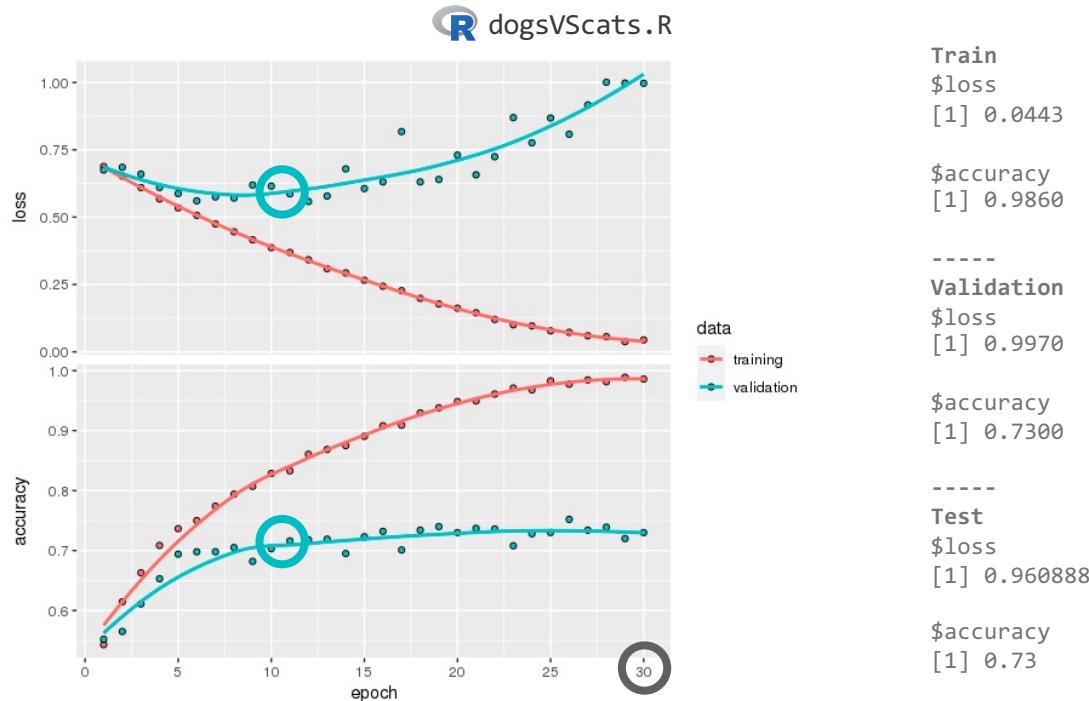
# https://tensorflow.rstudio.com/keras/reference/evaluate_generator.html
model %>% evaluate_generator(test_data, steps = 50)
```



Deep Learning

Mejora del aprendizaje

Perros y gatos



Deep Learning

Mejora del aprendizaje



Sobreaprendizaje (*overfitting*)

Un modelo es capaz de predecir adecuadamente las salidas para los valores de entrenamiento, pero no para los de validación (y, probablemente, tampoco para los de test)

El modelo no tiene capacidad de generalización

Imagina que tenemos un robot al que queremos enseñar a reconocer fotos de gatos. Para ello, le mostramos 100 fotos de gatos y 100 fotos de perros (*entrenamiento*).

Una vez estudiadas las fotos, el robot dice que ya es capaz de identificar gatos. Si le mostramos una foto de las que ya conoce, seguramente la clasificará correctamente. Sin embargo, si queremos saber si el robot es bueno en su trabajo, deberíamos mostrarle otras fotos que no ha visto (*validación / test*).

¡El robot podría haber guardado en su memoria las fotos que le hemos pasado y simplemente limitarse a buscar si tiene memorizada una **IGUAL**!



<https://youtu.be/7-6X3DTt3R8>

DotCSV – Partes 1, 2

Deep Learning

Mejora del aprendizaje ► Aumento de datos

Perros y gatos

Aumento de datos



dogsVScats_augmentation.R

```
# https://tensorflow.rstudio.com/keras/reference/image_data_generator.html
data_augmentation_datagen <- image_data_generator(
  rescale = 1/255,
  rotation_range = 40,
  width_shift_range = 0.2,
  height_shift_range = 0.2,
  shear_range = 0.2,
  zoom_range = 0.2,
  horizontal_flip = TRUE,
  fill_mode = "nearest"
)
# https://tensorflow.rstudio.com/keras/reference/fit_generator.html
history <- model %>%
  fit_generator(
    train_augmented_data,
    steps_per_epoch = 100,
    epochs = 30,
    validation_data = validation_data,
    validation_steps = 50
)
```

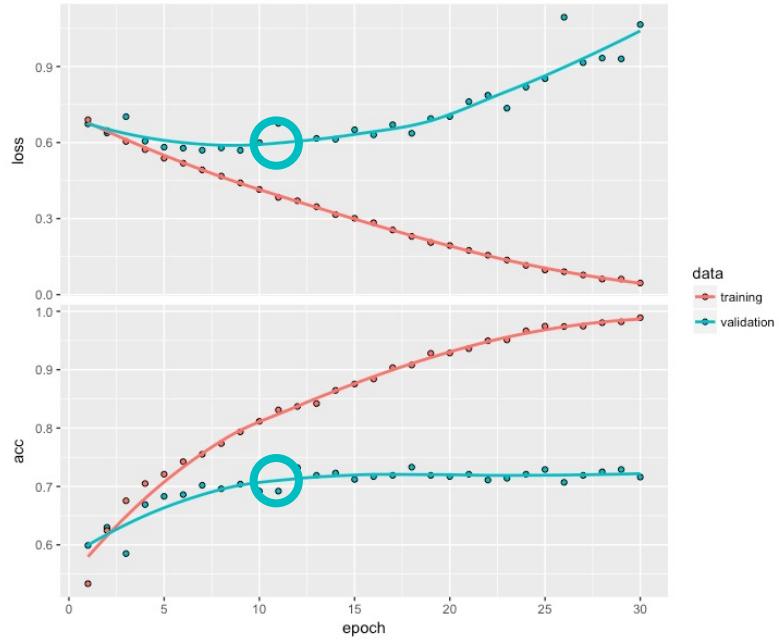


Deep Learning

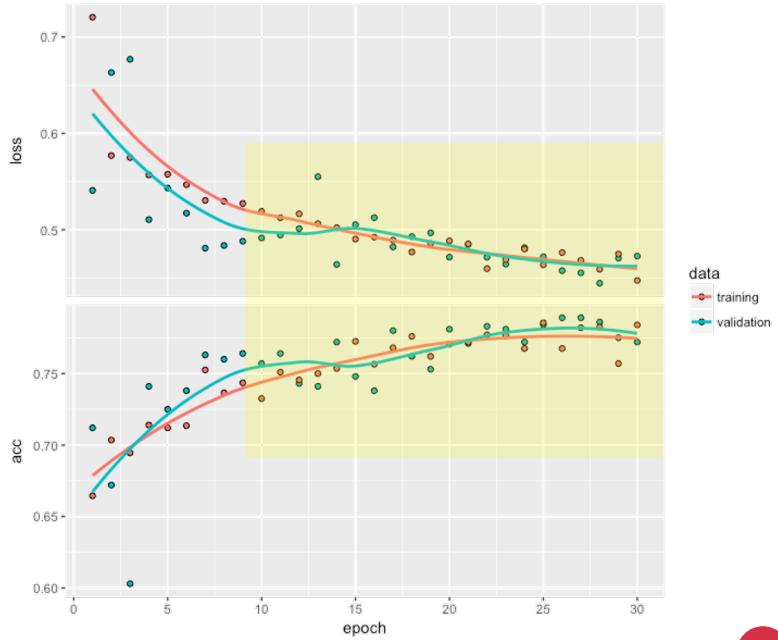
Mejora del aprendizaje ► Aumento de datos

Perros y gatos

R dogsVsCats.R



R dogsVsCats_augmentation.R



Deep Learning

Mejora del aprendizaje

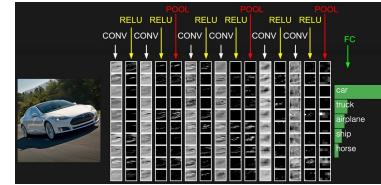
Sobreaprendizaje (*overfitting*)

Selección de datos de entrenamiento y aumento de datos

Incrementar el número de datos disponibles y asegurar que son representativos

Early-stopping

Detener el entrenamiento cuando el error de validación comienza a aumentar



Regularización

Modificar la forma en que se actualizan los pesos de la red durante el entrenamiento para que mantengan valores dentro de un rango

Normalización

Modifican la salida de una neurona para que se mantenga dentro de un rango

Dropout

Poner a 0 pesos de la red para aumentar resistencia al aprendizaje

Deep Learning

Mejora del aprendizaje ► *Early stopping*

Early stopping

Detener el entrenamiento cuando el error de validación comienza a aumentar

Dificultades

No hay un criterio universalmente definido

Qué significa que el error de validación comienza a aumentar

Puede aumentar el tiempo dedicado a entrenar el modelo

Más pruebas, más supervisión

Riesgo de caída en óptimos locales

No se explora la región del espacio donde está el óptimo

Puede ser contraproducente

Interesa que los parámetros de la red se estabilicen en una región amplia

Deep Learning

Mejora del aprendizaje ► *Early stopping*

Early stopping

Detener el entrenamiento cuando el error de validación comienza a aumentar

Soporte en Keras

- Grabación de modelos

[save model hdf5](#), [save model tf](#), [load model hdf5](#), [load model tf](#)
[save model weights hdf5](#), [load model weights hdf5](#)

- Continuación de entrenamiento a partir de los pesos actuales del modelo (*checkpoints*)

- [Callbacks](#) en función *fit*

Guardar modelo conforme se va entrenando

[callback model checkpoint](#) [ejemplo]

Detener entrenamiento

[callback early stopping](#)



dogsVScats_early-stopping.R

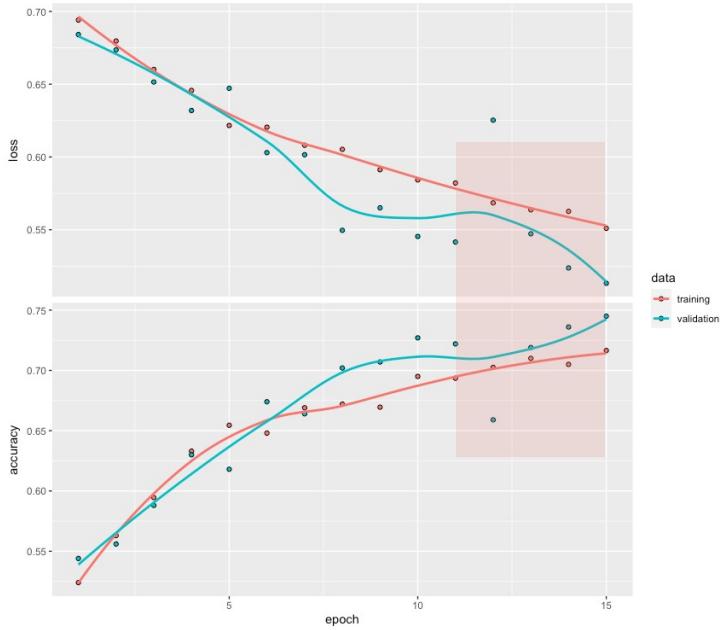
```
# https://keras.rstudio.com/reference/callback_early_stopping.html
history <- model %>%
  fit_generator(
    train_augmented_data,
    steps_per_epoch = 100,
    epochs = 30,
    validation_data = validation_data,
    validation_steps = 50,
    callbacks = list(
      callback_early_stopping(patience = 2)))
```

Deep Learning

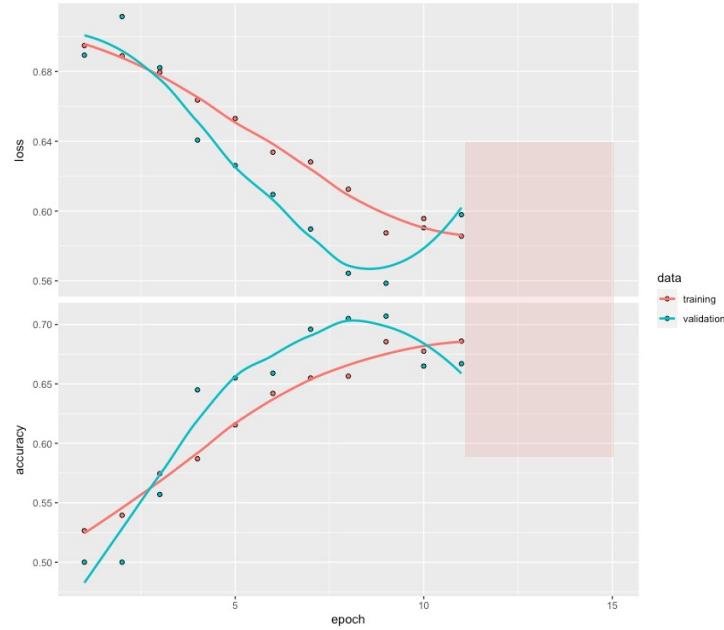
Mejora del aprendizaje ► *Early stopping*

Perros y gatos

R dogsVScats_augmentation.R



R dogsVScats_early-stopping.R



Deep Learning

Mejora del aprendizaje ► Regularización

Regularización

Modificar la forma en que se actualizan los pesos de la red durante el entrenamiento para que mantengan valores en un determinado rango

Regularización *weight decay*

Durante el entrenamiento, se añade un 'coste adicional' al coste si los pesos son altos

L1 regularization lasso

El coste añadido es proporcional al valor absoluto de los pesos

$$\Omega(\theta) = \lambda \sum |w|$$

L2 regularization ridge

El coste añadido es proporcional al cuadrado de los valores de los pesos

$$\Omega(\theta) = \lambda \sum w^2$$

Dónde: Capas densas, se prefiere L2 a L1 se puede usar también en convolutivas, pero su efectividad es discutible

Soporte en Keras

Parámetro [kernel_regularizer](#) al definir una capa

Posibilidad de definir regularizadores a medida



Lattice [\[link\]](#)

Deep Learning

Mejora del aprendizaje ► Normalización

Normalización

Modifican la salida de una neurona para que se mantenga dentro de un rango

Consiguen modelos menos dependientes del preprocesamiento y de la inicialización de los pesos

Normalización por lotes (*batch normalization*)

Se normalizan las activaciones de una neurona obtenidas con un mini-lote de tamaño k antes de pasarlas a la siguiente capa:

$$H'_j = \frac{H_j - \mu}{\sigma}$$

$$\mu = \frac{1}{k} \sum_i H_i \quad \sigma = \sqrt{\varepsilon + \frac{1}{k} \sum_i (H_i - \mu)^2}$$

Dónde: A continuación de capas densas y capas convolutivas, normalmente después de la activación también es posible antes de la función de activación, sujeto a discusión

Soporte en Keras

Capa [layer batch normalization](#)

Deep Learning

Mejora del aprendizaje ► *Dropout*

Dropout

Poner a 0 pesos de la red durante el entrenamiento para aumentar resistencia al aprendizaje

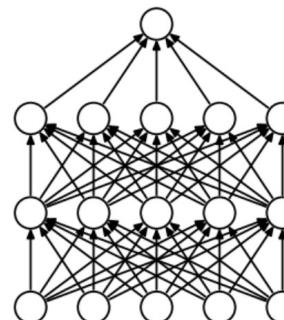
Se seleccionan aleatoriamente con probabilidad p

Dónde: Se prefiere en capas densas ($p=0.5$). Puede usarse también en las capas convolutivas ($p=0.1$)

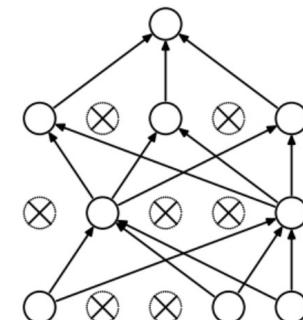
No se utiliza junto a regularización

Soporte en Keras

- Capa [layer dropout](#)



(a) Standard Neural Net



(b) After applying dropout.

N. Srivastava, G. Hinton, A. Krizhevsky, I. Sutskever, R. Salakhutdinov (2014) Dropout: a simple way to prevent neural networks from overfitting. Journal of Machine Learning Research 15(56): 1929–1958 [[link](#)]

S. Park, N. Kwak (2016) Analysis on the dropout effect in convolutional neural networks. Asian Conference on Computer Vision (ACCV 2016), pp. 189–204 [[link](#)]

Deep Learning

Mejora del aprendizaje



MNIST-CNN

mnist-cnn.R

```
model %>%
  layer_conv_2d(filters = 20, kernel_size = c(5, 5), activation = "relu", input_shape = c(28, 28, 1)) %>%
  layer_max_pooling_2d(pool_size = c(2, 2)) %>%
  layer_flatten() %>%
  layer_dense(units = 100, activation = "sigmoid") %>%
  layer_dense(units = 10, activation = "softmax")
```

Test

```
$loss
[1] 0.04481287
```

```
$accuracy
[1] 0.986
```

mnist-cnn_mejorado.R

```
model %>%
  layer_conv_2d(filters = 20, kernel_size = c(5, 5), activation = "relu", input_shape = c(28, 28, 1)) %>%
  layer_batch_normalization(epsilon = 0.01) %>%
  layer_max_pooling_2d(pool_size = c(2, 2)) %>%
  layer_flatten() %>%
  layer_dense(units = 100, activation = "sigmoid", kernel_regularizer = regularizer_l2(0.01)) %>%
#  layer_dropout(rate = 0.4) %>%
  layer_dense(units = 10, activation = "softmax")
```

Test

```
$loss
[1] 0.1622155
```

```
$accuracy
[1] 0.9718
```

Deep Learning

Mejora del aprendizaje



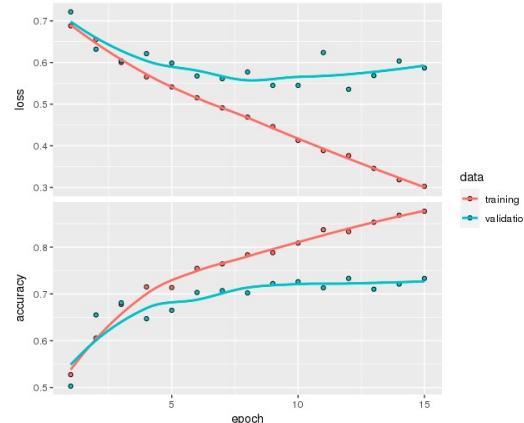
dogs VS cats

R dogsVScats.R

```
model <- keras_model_sequential() %>%
  layer_conv_2d(filters = 32, kernel_size = c(3, 3), activation = "relu", input_shape = c(150, 150, 3)) %>%
  layer_max_pooling_2d(pool_size = c(2, 2)) %>%
  layer_conv_2d(filters = 64, kernel_size = c(3, 3), activation = "relu") %>%
  layer_max_pooling_2d(pool_size = c(2, 2)) %>%
  layer_conv_2d(filters = 128, kernel_size = c(3, 3), activation = "relu") %>%
  layer_max_pooling_2d(pool_size = c(2, 2)) %>%
  layer_conv_2d(filters = 128, kernel_size = c(3, 3), activation = "relu") %>%
  layer_max_pooling_2d(pool_size = c(2, 2)) %>%
  layer_flatten() %>%
  layer_dense(units = 512, activation = "relu") %>%
  layer_dense(units = 1, activation = "sigmoid")
```

```
Test
$loss
[1] 0.5747627
```

```
$accuracy
[1] 0.732
```



Deep Learning

Mejora del aprendizaje



dogs VS cats

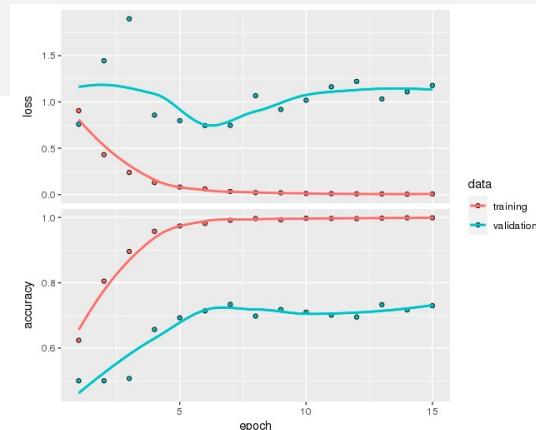
R dogsVScats_mejorado.R

```
model <- keras_model_sequential() %>%
  layer_conv_2d(filters = 32, kernel_size = c(3, 3), activation = "relu", input_shape = c(150, 150, 3)) %>%
  layer_batch_normalization(epsilon = 0.01) %>%
  layer_max_pooling_2d(pool_size = c(2, 2)) %>%
  layer_conv_2d(filters = 64, kernel_size = c(3, 3), activation = "relu") %>%
  layer_batch_normalization(epsilon = 0.01) %>%
  layer_max_pooling_2d(pool_size = c(2, 2)) %>%
  layer_conv_2d(filters = 128, kernel_size = c(3, 3), activation = "relu") %>%
  layer_batch_normalization(epsilon = 0.01) %>%
  layer_max_pooling_2d(pool_size = c(2, 2)) %>%
  layer_conv_2d(filters = 128, kernel_size = c(3, 3), activation = "relu") %>%
  layer_batch_normalization(epsilon = 0.01) %>%
  layer_max_pooling_2d(pool_size = c(2, 2)) %>%
  layer_flatten() %>%
  layer_dense(units = 512, activation = "relu") %>%
  layer_dropout(rate = 0.3) %>%
  layer_dense(units = 1, activation = "sigmoid")
```

Test

```
$loss  
[1] 1.21541
```

```
$accuracy  
[1] 0.716
```



Índice

1. Fundamentos
2. Redes convolutivas
3. Mejora de aprendizaje
- ▶ 4. Gestión del proceso de aprendizaje
5. Transferencia de aprendizaje
6. Modelos avanzados

Deep Learning

Gestión del proceso de aprendizaje



tfruns

<https://tensorflow.rstudio.com/tools/tfruns/overview/>

Seguimiento y visualización del entrenamiento



```
# Lanzar script de entrenamiento  
training_run("mnist-cnn_tfruns.R")  
  
# Consultar resultados (modo texto)  
latest_run()  
  
# Visualizar ejecución en navegador  
view_run()
```

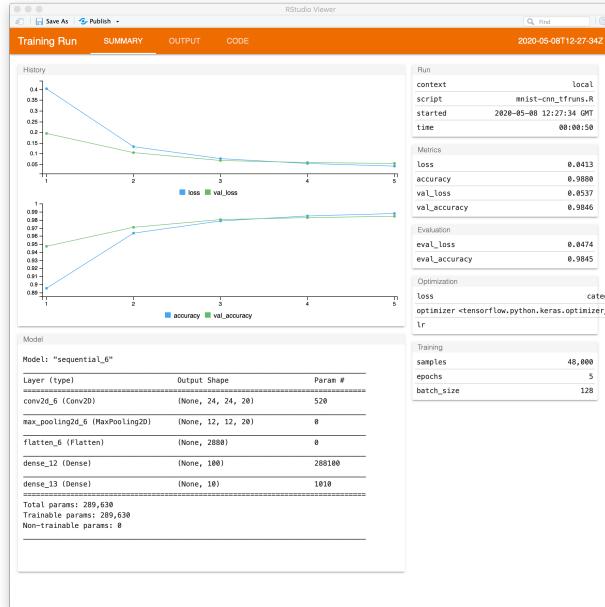
RStudio > Add-ins

```
$ RScript - 'tfruns::training_run("mnist-cnn_tfruns.R")'
```



Tensorboard

https://youtu.be/2vh_Jk2wALU



Deep Learning

Gestión del proceso de aprendizaje

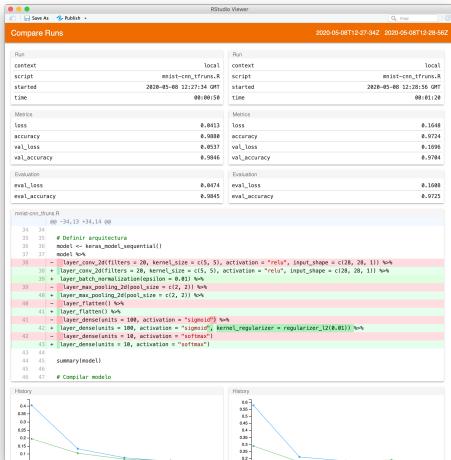


tfruns

Comparar ejecuciones

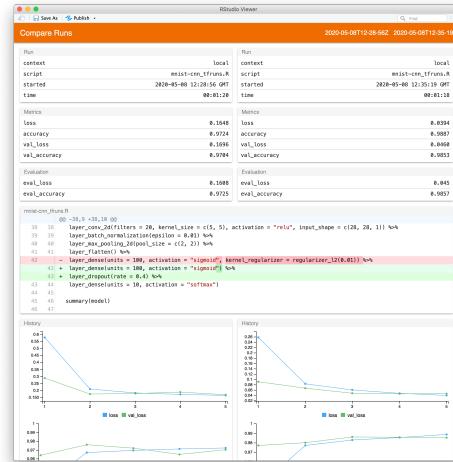


```
# Comparar las dos últimas ejecuciones  
compare_runs()
```



02 compare-runs-2020-05-08T12-28-56Z-2020-05-08T12-27-34Z.html

inicial vs L2



03 compare-runs-2020-05-08T12-35-19Z-2020-05-08T12-28-56Z.html

L2 vs dropout

Deep Learning

Gestión del proceso de aprendizaje

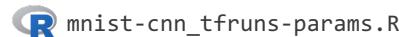


tfruns Parametrizar ejecuciones



```
# Lanzar script parametrizado
training_run("mnist-cnn_tfruns-params.R")

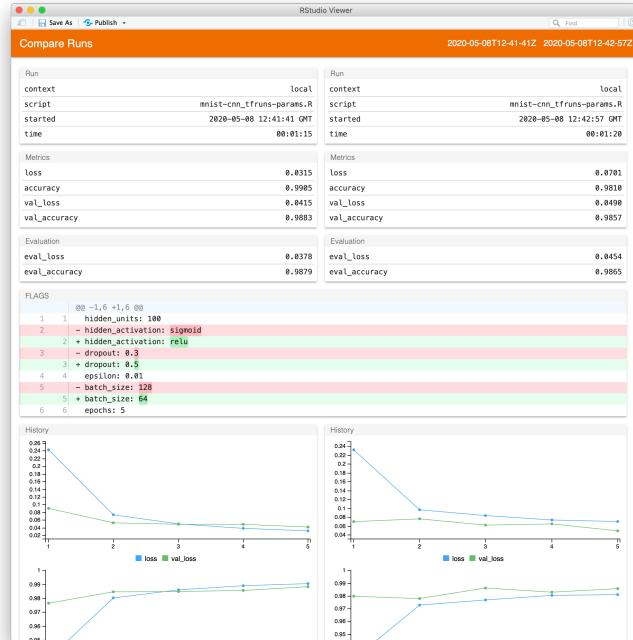
# Lanzar script parametrizado con nuevos parámetros
training_run("mnist-cnn_tfruns-params.R",
             flags = list(
               dropout=0.5,
               hidden_activation = "relu",
               batch_size=64))
```



```
FLAGS <- flags(
  flag_numeric("hidden_units", 100),
  flag_string("hidden_activation", "sigmoid"),
  flag_numeric("dropout", 0.3),
  flag_numeric("epsilon", 0.01),
  flag_numeric("batch_size", 128),
  flag_numeric("epochs", 5)
)

# ...

model <- keras_model_sequential()
model %>%
  layer_conv_2d(filters = 20, kernel_size = c(5, 5),
                activation = "relu", input_shape = c(28, 28, 1)) %>%
  layer_batch_normalization(epsilon = FLAGS$epsilon) %>%
  layer_max_pooling_2d(pool_size = c(2, 2)) %>%
  layer_flatten() %>%
  layer_dense(units = FLAGS$hidden_units, activation = FLAGS$activation) %>%
  layer_dropout(rate = FLAGS$dropout) %>%
  layer_dense(units = 10, activation = "softmax")
```



04_compare-runs-2020-05-08T12-42-57Z-2020-05-08T12-41-41Z.html

por defecto vs **dropout=0.5 + relu + batch=64**

Deep Learning

Gestión del proceso de aprendizaje



tfruns Lanzar conjuntos de experimentos parametrizados

tfruns.R

```
# Lanzar conjunto de experimentos parametrizados
runs <- tuning_run("mnist-cnn_tfruns-params.R",
  runs_dir = "dropout_batch_tuning",
  flags = list(dropout=c(0.2, 0.3, 0.4, 0.5),
    hidden_activation = "relu",
    batch_size=c(64, 128, 256))) # solo una muestra: sample = 0.3

# Listar por orden de resultado
runs[order(runs$eval_accuracy, decreasing = TRUE), ]
```

mnist-cnn_tfruns-params.R

```
FLAGS <- flags(
  flag_numeric("hidden_units", 100),
  flag_string("hidden_activation", "sigmoid"),
  flag_numeric("dropout", 0.3),
  flag_numeric("epsilon", 0.01),
  flag_numeric("batch_size", 128),
  flag_numeric("epochs", 5)
)

# **

model <- keras_model_sequential()
model %>%
  layer_conv_2d(filters = 20, kernel_size = c(5, 5),
    activation = "relu", input_shape = c(28, 28, 1)) %>%
  layer_batch_normalization(epsilon = FLAGS$epsilon) %>%
  layer_max_pooling_2d(pool_size = c(2, 2)) %>%
  layer_flatten() %>%
  layer_dense(units = FLAGS$hidden_units, activation = FLAGS$activation) %>%
  layer_dropout(rate = FLAGS$dropout) %>%
  layer_dense(units = 10, activation = "softmax")
```



05 Compare-runs-2020-05-08T12-57-51Z-2020-05-08T12-49-59Z.html

dropout=0.4 batch=64 vs dropout=0.2 batch=256

Deep Learning

Gestión del proceso de aprendizaje



<https://mlflow.org/docs/latest/quickstart.html>

Soporta múltiples lenguajes de programación ([R](#)) y bibliotecas de Aprendizaje Automático

Mayor potencia y flexibilidad, pero también más complejidad de uso

Ofrece integraciones pre-implementadas (autolog): Keras, scikit-learn, h2o, PyTorch, SpaCy, etc.

Permite realizar despliegue de aplicaciones

Elementos

Tracking: registro de experimentos (código, datos, configuración, resultados, etc.)

Projects: empaquetado de código para reproducir ejecuciones en cualquier plataforma

Models: despliegue de modelos en diversas plataformas (local y cloud)

Registry: repositorio de modelos entrenados

Deep Learning

Gestión del proceso de aprendizaje



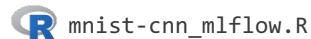
mlflow Lanzar conjuntos de experimentos parametrizados



```
# Lanzar script de entrenamiento
mlflow_run(entry_point = "mnist-cnn_mlflow.R")

# Visualizar en interfaz MLflow
# http://127.0.0.1:5987/
mlflow_ui()

# Cambiar valores de los parámetros
mlflow_run(entry_point = "mnist-cnn_mlflow.R", parameters =
list(dropout = 0.5, epochs = 3))
```



```
hidden_units <- mlflow_param(
  "hidden_units", 100, "integer", "Number of units of the hidden layer")
hidden_activation <- mlflow_param(
  "hidden_activation", "sigmoid", "string", "Activation function for the
  hidden layer")
dropout <- mlflow_param(
  "dropout", 0.3, "numeric", "Dropout rate (after the hidden layer)")
epsilon <- mlflow_param(
  "epsilon", 0.01, "numeric", "Epsilon parameter of the batch
  normalization (after convolution)")
batch_size <- mlflow_param(
  "batch_size", 128, "integer", "Mini-batch size")
epochs <- mlflow_param(
  "epochs", 5, "integer", "Number of training epochs")
```



```
with(mlflow_start_run(), {

  # Entrenar modelo
  history <- model %>%
    fit(
      x_train, y_train,
      epochs = epochs,
      batch_size = batch_size,
      validation_split = 0.2
    )

  # Calcular metricas sobre datos de validación
  metrics <- model %>%
    evaluate(x_test, y_test)

  # Guardar valores interesantes de la ejecución
  # Por ejemplo, para estudio de dropout + epochs
  # parámetros
  mlflow_log_param("dropout", dropout)
  mlflow_log_param("epochs", epochs)

  # métricas
  mlflow_log_metric("loss", metrics$loss)
  mlflow_log_metric("accuracy", metrics$accuracy)

  # modelo
  mlflow_log_model(model, "model")})
```

Deep Learning

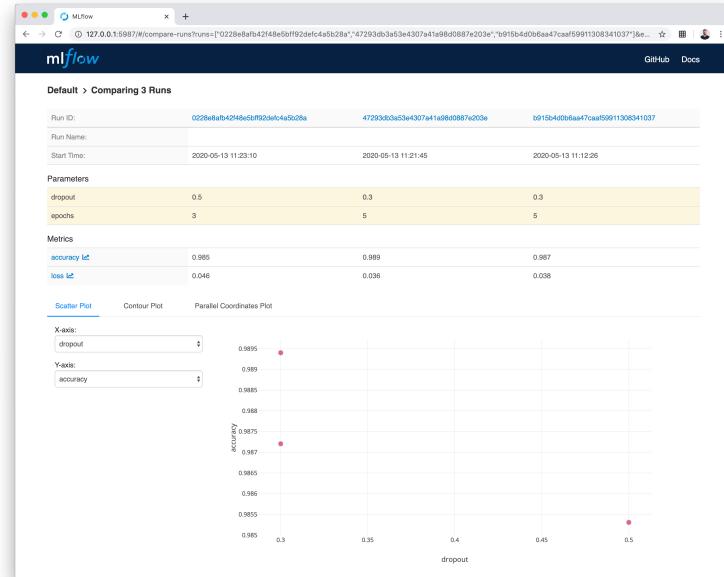
Gestión del proceso de aprendizaje



mlflow Lanzar conjuntos de experimentos parametrizados

The screenshot shows the mlflow UI for managing experiments. At the top, there's a search bar labeled "Search Experiments" and a dropdown menu for "Default". Below this, the "Experiment ID : 0" is displayed along with the "Artifact Location" which points to a local directory on the user's OneDrive. A "Notes" section indicates "None". A search bar below it filters runs based on metrics like "metrics.rmse < 1" and parameters like "model = 'tree'". The results table shows three matching runs, each with a checkbox, start time, run name, user, source, version, and two columns for parameters ("dropout" and "epochs") and metrics ("accuracy" and "loss").

	Start Time	Run Name	User	Source	Version	Parameters	Metrics
<input type="checkbox"/>	2020-05-13 11:23:10	-	juan	mlflow	0.5	3	accuracy: 0.985 loss: 0.046
<input type="checkbox"/>	2020-05-13 11:21:45	-	juan	mlflow	0.3	5	accuracy: 0.989 loss: 0.036
<input type="checkbox"/>	2020-05-13 11:12:26	-	juan	mlflow	0.3	5	accuracy: 0.987 loss: 0.038



Deep Learning

Gestión del proceso de aprendizaje



mlflow Desplegar modelo en REST

mlflow.R

```
# Desplegar el modelo disponible
# http://127.0.0.1:8090/
mlflow_rf_func_server(
    model_uri="mlruns/0/0228e8afb42f48e5bff92defc4a5b28a/artifacts/model",
    port=8090)
```

The screenshot shows a browser window displaying the MLflow Model API documentation via the Swagger UI. The URL is 127.0.0.1:8090/. The page title is "MLflow Model". It includes sections for "Schemes" (set to "HTTP") and "default". Under "default", there is a "POST /predict/" section for performing predictions. The "Parameters" table has one entry: "body" (required) which is described as "Prediction instances for model (body)". An "Example Value" is shown as an empty JSON object {}, and the "Parameter content type" is set to "application/json". Below this, the "Responses" table shows a single entry for code 200 with the description "Success".

Deep Learning

Gestión del proceso de aprendizaje

Alternativas



Weights & Biases

<https://www.wandb.com/>

Sacred

<https://github.com/IDSIA/sacred>



<https://www.comet.ml/site/>



<https://sigopt.com/product/optimization-engine/>



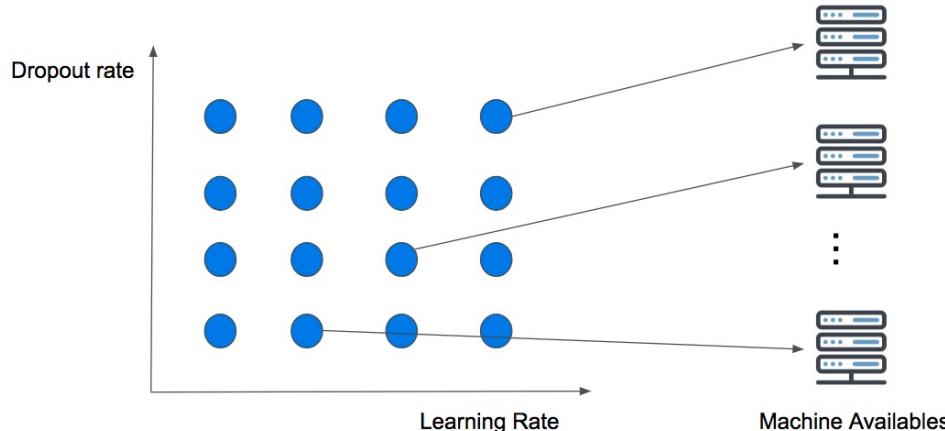
<https://neptune.ai/>

Deep Learning

Gestión del proceso de aprendizaje

Hiperparámetros

Grid search



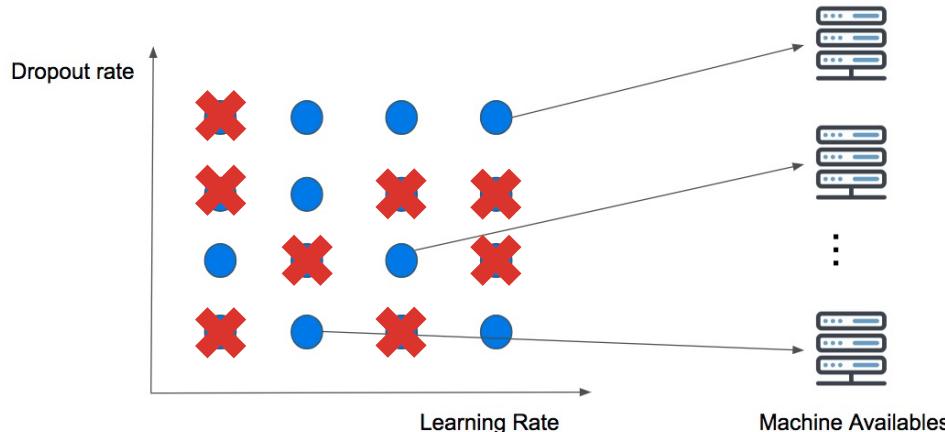
A. Gozzoli (2018) *Practical Guide to Hyperparameters Optimization for Deep Learning Models* [[link](#)]

Deep Learning

Gestión del proceso de aprendizaje

Hiperparámetros

Random search



A. Gozzoli (2018) Practical Guide to Hyperparameters Optimization for Deep Learning Models [\[link\]](#)

Deep Learning

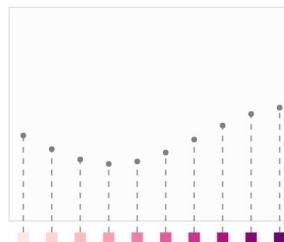
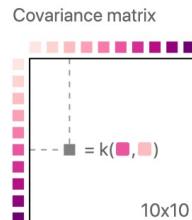
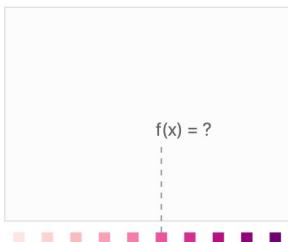
Gestión del proceso de aprendizaje

Meta-Learning – AutoML (?)

Optimización bayesiana

Se construye un modelo de predicción $P : \vartheta \rightarrow \mathcal{L}$ para estimar el valor que se obtendrá de la métrica a partir de los hiperparámetros

Cálculo de $P(\mathcal{L}|\vartheta)$ como un problema de regresión aplicando un proceso gaussiano



mlflow
<https://youtu.be/eEVDOIYUmk>

K Keras
[Learning rate](#)
[Keras tuner \[video\]](#)

J. Görtler, R. Kehlbeck, O. Deussen (2019) A Visual Exploration of Gaussian Process [\[link\]](#)

Deep Learning

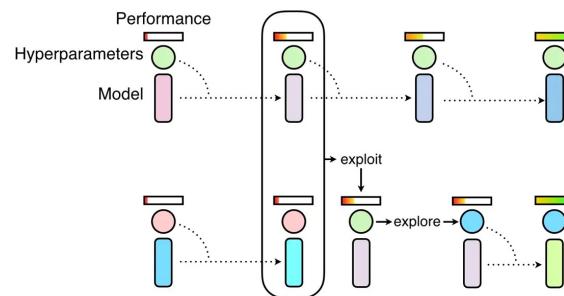
Gestión del proceso de aprendizaje

Meta-Learning

Algoritmos genéticos

Cada gen codifica los hiperparámetros (+ topología)

La función de *fitness* es la métrica de aprendizaje

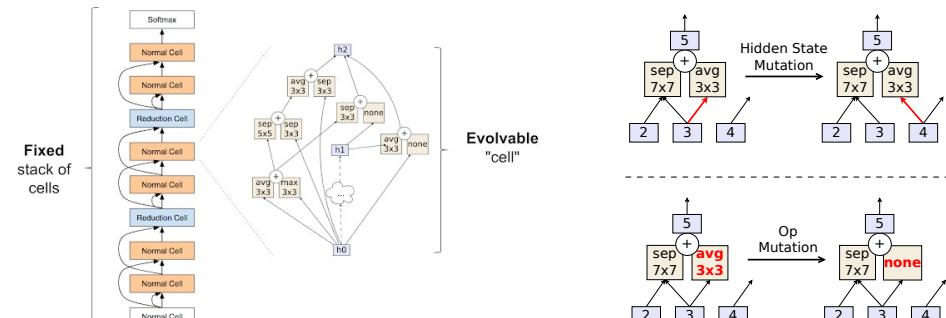


M. Jaderberg et al. (2017) Population-Based Training of Neural Networks [[link](#)]

Selección: torneo modificado

Cruce: mezcla de dos redes

Mutación: modificación de una conexión de la red



E. Real et al. (2017) Regularized Evolution for Image Classifier Architecture Search [[link](#)]

Deep Learning

Gestión del proceso de aprendizaje

Meta-Learning

Neural Architecture Search

Resolver el problema de optimización de la topología de la red con una red neuronal

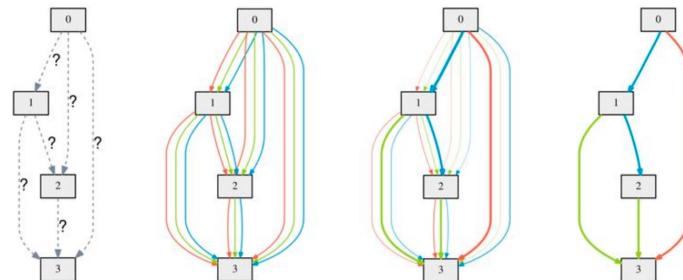
DARTS Differentiable Architecture Search

- Una red se codifica como un conjunto de operaciones encadenadas
- Una operación se encadena con otra si están conectadas (α)
- Algunas de estas operaciones (dense, conv) utilizan pesos (w)

Objetivo: encontrar los valores α^* que minimizan el error $\mathcal{L}_{val}(w^*, \alpha^*)$, siendo w^* los valores que minimizan el error $\mathcal{L}_{train}(w, \alpha^*)$

Procedimiento problema de optimización bi-nivel

1. Aplicar gradiente descendente sobre el error de entrenamiento $\mathcal{L}_{train}(w_{k-1}, \alpha_{k-1})$ para obtener w_k
2. Con w_k fijo, aplicar gradiente descendente sobre el error de validación $\mathcal{L}_{val}(w_k, \alpha_{k-1})$ para obtener α_k



H. Liu, Y. Yang (2018) DARTS: Differentiable Architecture Search [[link](#)]

R. Karim (2019) Illustrated: Efficient Neural Architecture Search [[link](#)]

Deep Learning

Gestión del proceso de aprendizaje

Meta-Learning

Google AutoML

Cloud AutoML es un paquete de productos de aprendizaje automático que permite a los desarrolladores con poca experiencia en la materia preparar modelos de alta calidad adaptados a las necesidades de su negocio. Todo ello gracias a la tecnología de búsqueda con arquitectura neuronal y al aprendizaje por transferencia de última generación de Google.

Combinación de *transfer learning + neural architecture search*

R. Thomas (2018) An opinionated introduction to AutoML and Neural Architecture Search [\[link\]](#)

Visión	AutoML Vision Extrae información valiosa de imágenes en la nube o en el perímetro. Más información	AutoML Video Intelligence ^{BETA} Descubre contenido valioso y ofrece experiencias de video atractivas Más información
Idioma	AutoML Natural Language Analiza la estructura y el significado del texto mediante el aprendizaje automático. Más información	AutoML Translation Detecta y traduce textos de manera dinámica. Más información
Datos estructurados	AutoML Tables ^{BETA} Crea y despliega automáticamente modelos de aprendizaje automático de vanguardia sobre datos estructurados. Más información	

Deep Learning

Gestión del proceso de aprendizaje

Meta-Learning



<https://autokeras.com/>



<https://www.microsoft.com/en-us/research/project/automl/>



Amazon SageMaker

<https://aws.amazon.com/es/sagemaker/>

auto-sklearn

<https://automl.github.io/auto-sklearn/master/>

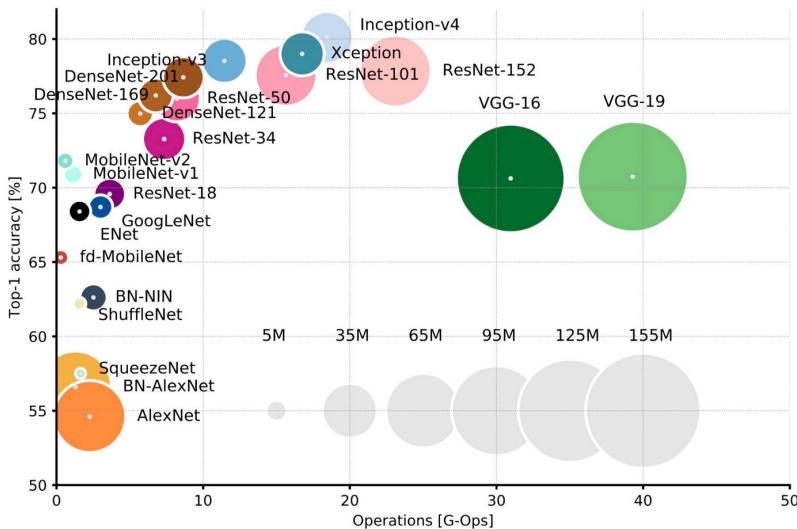
Índice

1. Fundamentos
2. Redes convolutivas
3. Mejora de aprendizaje
4. Gestión del proceso de aprendizaje
- ▶ 5. Transferencia de aprendizaje
6. Modelos avanzados

Deep Learning

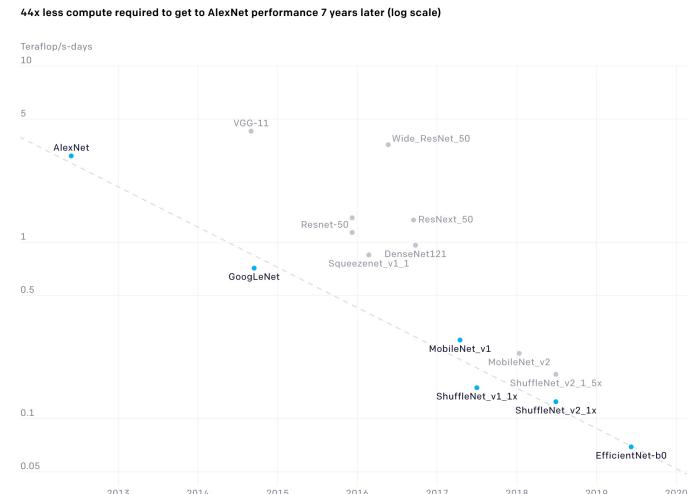
Transferencia de aprendizaje

Redes pre-entrenadas



E. Culurciello (2018) Neural Network Architectures [[link](#)]

S. Ilic (2020) CNN Architectures - implementations [[link](#)]



D. Hernández, T. Brown (2020) AI and Efficiency [[link](#)]

Deep Learning

Transferencia de aprendizaje

Redes pre-entrenadas

Topología definida

Entrenadas con un conjunto de datos general, como ImageNet

Consiguen resultados *state-of-the-art* (SOTA)

Keras: Xception, Inception V3, ResNet50, VGG16, VGG19, MobileNet, ...

<https://keras.rstudio.com/articles/applications.html>

<https://tensorflow.rstudio.com/guide/tfhub/hub-with-keras/>



dogsVScats_transfer.R

```
## Clasificación con red ya entrenada
model_resnet50 <- application_resnet50(
  weights = "imagenet"
)

img_path <- './cat1.jpg'
img <- image_load(img_path, target_size = c(224,224))
x <- image_to_array(img)

x <- array_reshape(x, c(1, dim(x)))
x <- imagenet_preprocess_input(x)

preds <- model_resnet50 %>% predict(x)
imagenet_decode_predictions(preds, top = 3)[[1]]
```



	class_name	class_description	score
1	n02123394	Persian_cat	0.89344072
2	n02123045	tabby	0.01761619
3	n04589890	window_screen	0.01025248

Deep Learning

Transferencia de aprendizaje

Redes pre-entrenadas

Topología definida

Entrenadas con un conjunto de datos general, como ImageNet

Consiguen resultados *state-of-the-art* (SOTA)

Keras: Xception, Inception V3, ResNet50, VGG16, VGG19, MobileNet, ...

<https://keras.rstudio.com/articles/applications.html>

 dogsVScats_transfer.R

```
## Clasificación con red ya entrenada
model_resnet50 <- application_resnet50(
  weights = "imagenet"
)

img_path <- './dragon1.jpg'
img <- image_load(img_path, target_size = c(224,224))
x <- image_to_array(img)

x <- array_reshape(x, c(1, dim(x)))
x <- imagenet_preprocess_input(x)

preds <- model_resnet50 %>% predict(x)
imagenet_decode_predictions(preds, top = 3)[[1]]
```



class_name	class_description	score
n01704323	triceratops	0.55621058
n01688243	frilled_lizard	0.05542799
n02317335	starfish	0.04102186

Deep Learning

Transferencia de aprendizaje

Redes pre-entrenadas

Aproximaciones

Uso directo

Utilizar la red entrenada para un problema igual o similar

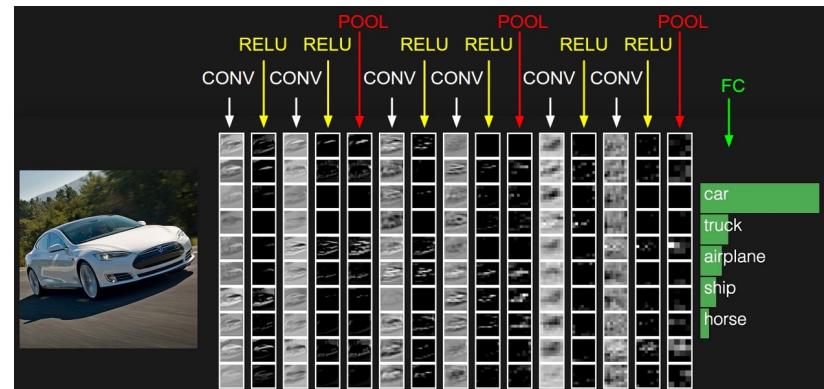
Reutilizar extracción de características

Utilizar las capas convolutivas de la red ya entrenada para extraer características geométricas

Acoplar una nueva subred densa para realizar la clasificación

Fine-tuning

Se re-entrena una parte o todas las capas convolutivas de la red ya entrenada partiendo de los pesos pre-existentes

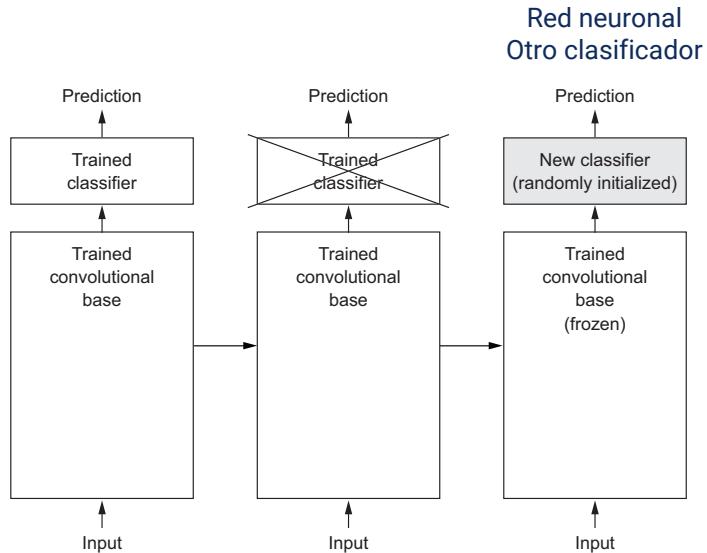


Deep Learning

Transferencia de aprendizaje

Extracción de características

<https://keras.rstudio.com/articles/applications.html>



dogsVScats_transfer.R

```
## Extracción de características
# Cargar capa convolutoria de VGG16, pre-entrenada con ImageNet
conv_base <- application_vgg16(
  weights = "imagenet",
  include_top = FALSE,
  input_shape = c(150, 150, 3)
)

# Congelar las capas convolutorias ya entrenadas
freeze_weights(conv_base)

# Acoplar nuevo clasificador (red densa)
model <- keras_model_sequential() %>%
  conv_base %>%
  layer_flatten() %>%
  layer_dense(units = 512, activation = "relu") %>%
  layer_dense(units = 1, activation = "sigmoid")

# Entrenar modelo
model %>% compile(
  optimizer = optimizer_rmsprop(lr = 2e-5),
  loss = "binary_crossentropy",
  metrics = c("accuracy")
)

history <- model %>%
  fit_generator(
    train_data,
    steps_per_epoch = 100,
    epochs = 2, # 30
    validation_data = validation_data,
    validation_steps = 50
  )
```

Test
\$loss
[1] 0.3358

\$accuracy
[1] 0.858

Deep Learning

Transferencia de aprendizaje

Extracción de características

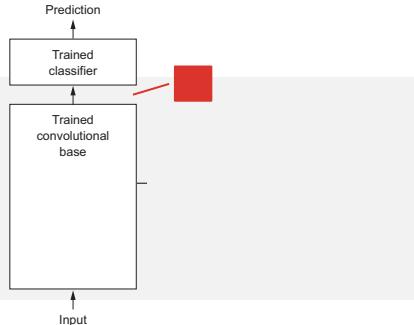
<https://keras.rstudio.com/articles/applications.html>

Opción 1: Seleccionar solo parte convolutiva

```
model <- application_vgg16(weights = 'imagenet', include_top = FALSE)

img_path <- "elephant.jpg"
img <- image_load(img_path, target_size = c(224,224))
x <- image_to_array(img)
x <- array_reshape(x, c(1, dim(x)))
x <- imagenet_preprocess_input(x)

features <- model %>% predict(x)
```

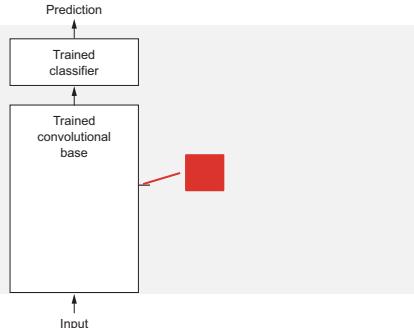


Opción 2: Truncar una parte de la red

```
base_model <- application_vgg19(weights = 'imagenet')
model <- keras_model(inputs = base_model$input,
                      outputs = get_layer(base_model, 'block4_pool')$output)

img_path <- "elephant.jpg"
img <- image_load(img_path, target_size = c(224,224))
x <- image_to_array(img)
x <- array_reshape(x, c(1, dim(x)))
x <- imagenet_preprocess_input(x)

block4_pool_features <- model %>% predict(x)
```

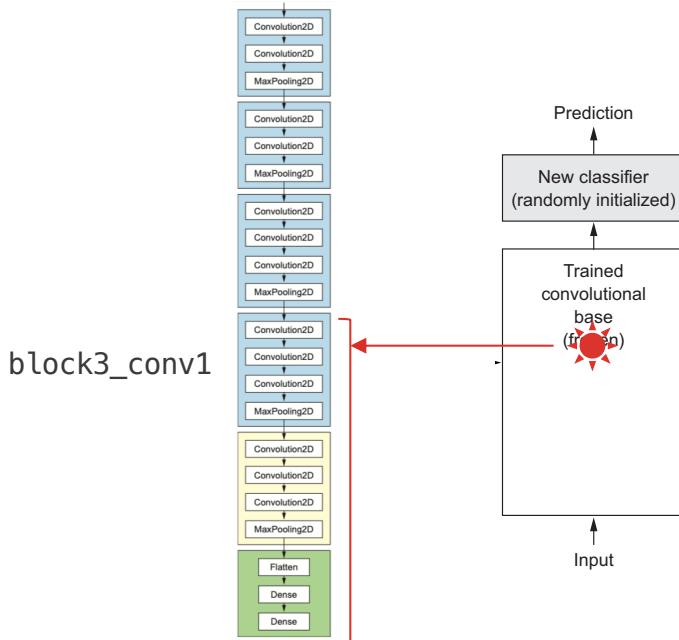


Deep Learning

Transferencia de aprendizaje

Fine tuning

<https://keras.rstudio.com/articles/applications.html>



1. Añadir capa FC personalizada
2. Congelar los pesos de la red base
3. Entrenar la capa FC
4. Descongelar capas de la red base
5. Entrenar capa descongelada y FC

 dogsVsCats_transfer.R

```
## (continúa ejemplo anterior)

# 4. Descongelar una parte de la la capa base
unfreeze_weights(conv_base, from = "block3_conv1")

# 5. Entrenar capa descongelada y FC
model %>% compile(
  loss = "binary_crossentropy",
  optimizer = optimizer_rmsprop(lr = 1e-5),
  metrics = c("accuracy")
)

history <- model %>%
  fit_generator(
    train_data,
    steps_per_epoch = 100,
    epochs = 25,
    validation_data = validation_data,
    validation_steps = 50
)
```

Test
\$loss
[1] 0.3522196
\$accuracy
[1] 0.953

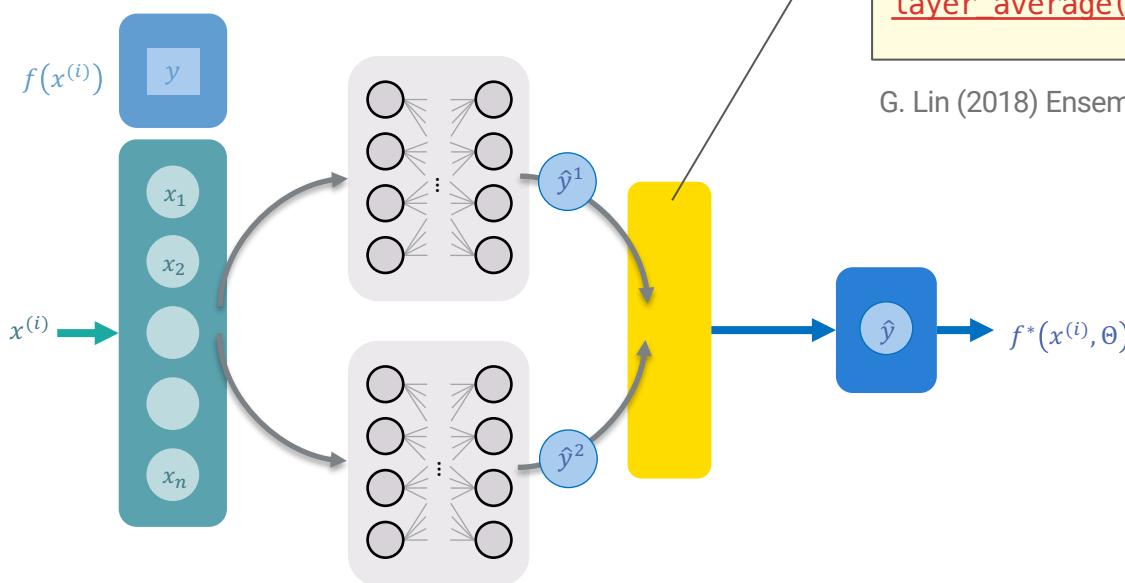
Índice

1. Fundamentos
2. Redes convolutivas
3. Mejora de aprendizaje
4. Gestión del proceso de aprendizaje
5. Transferencia de aprendizaje
- ▶ 6. Modelos avanzados

Deep Learning

Temas avanzados ► Ensamblado de modelos

Ensembles



Bagging
layer_maximum()

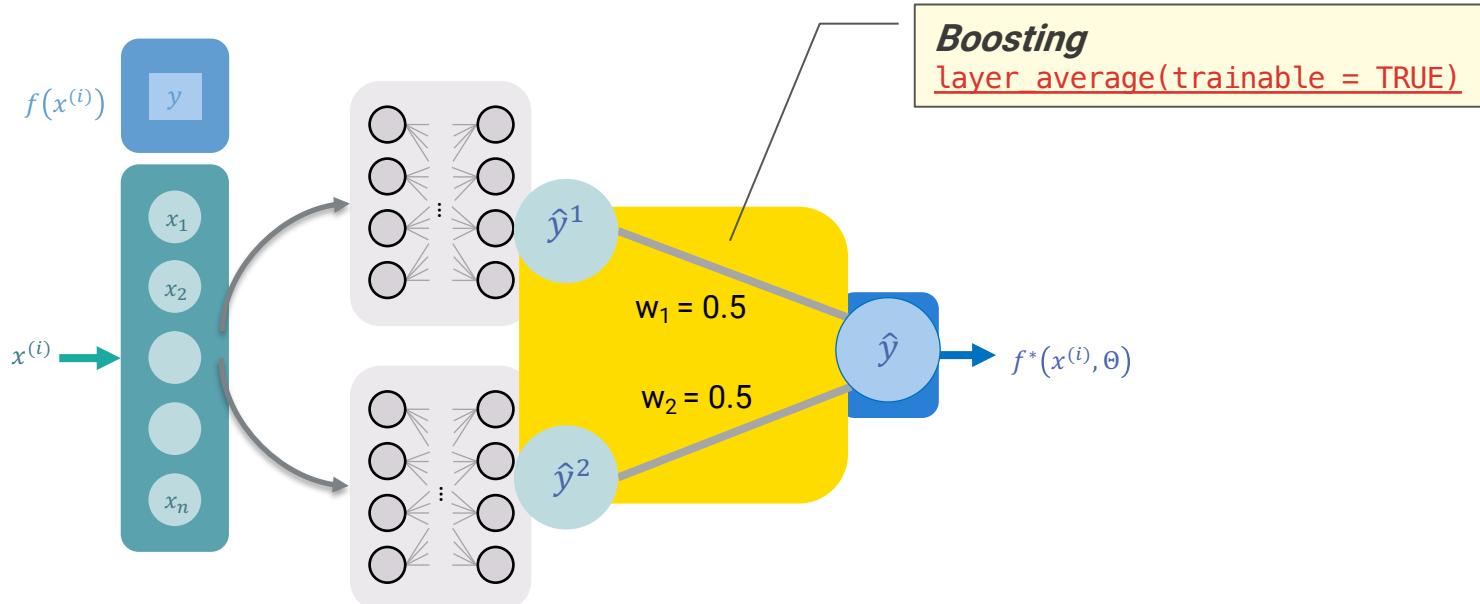
Media
layer_average()

G. Lin (2018) Ensembling Keras models in R [link]

Deep Learning

Temas avanzados ► Ensamblado de modelos

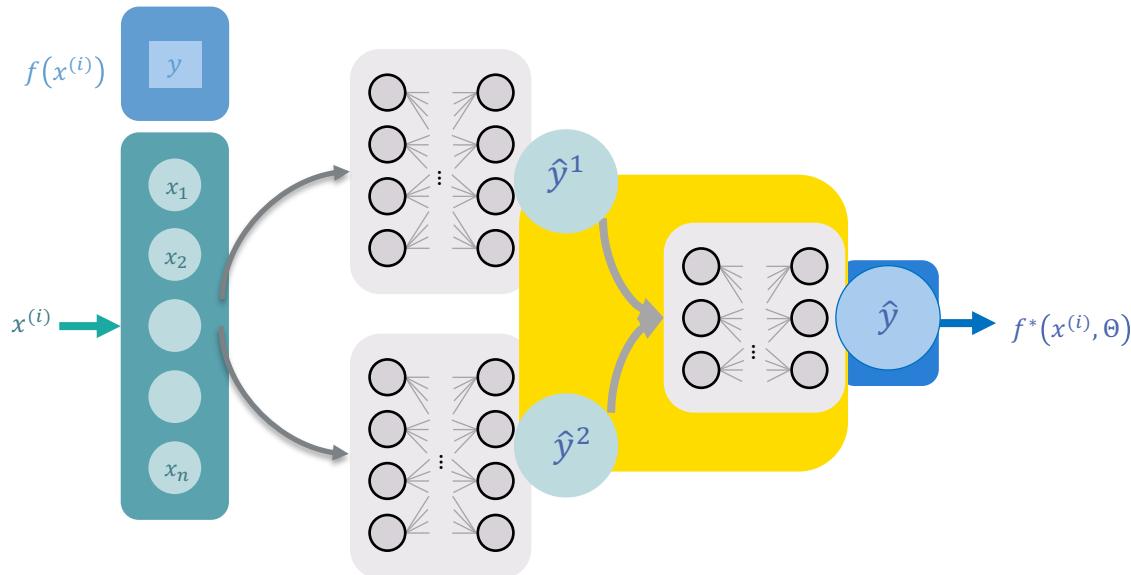
Ensembles



Deep Learning

Temas avanzados ► Ensamblado de modelos

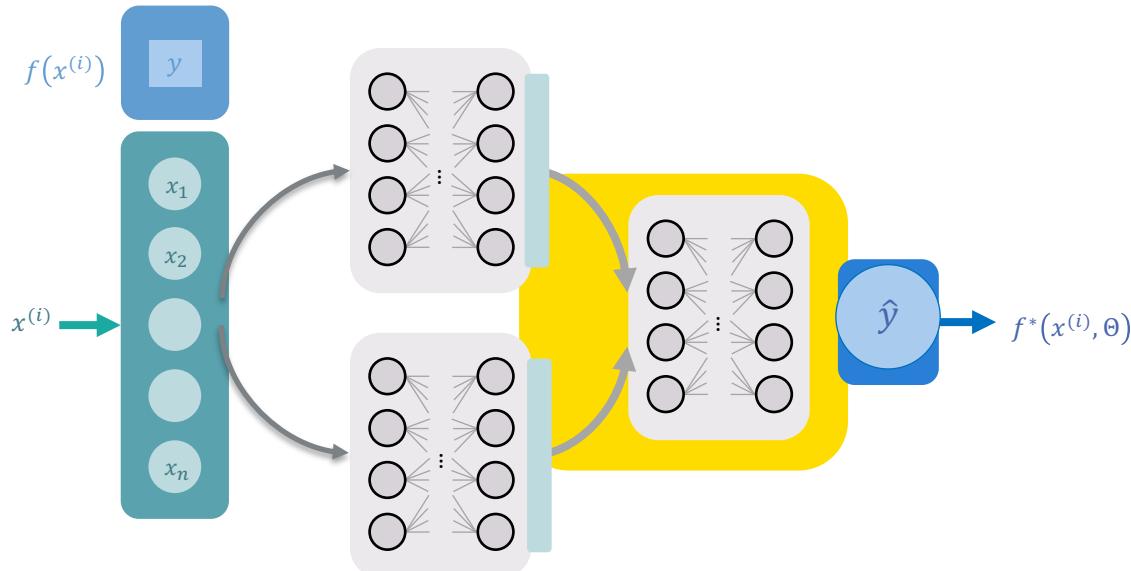
Ensembles



Deep Learning

Temas avanzados ► Ensamblado de modelos

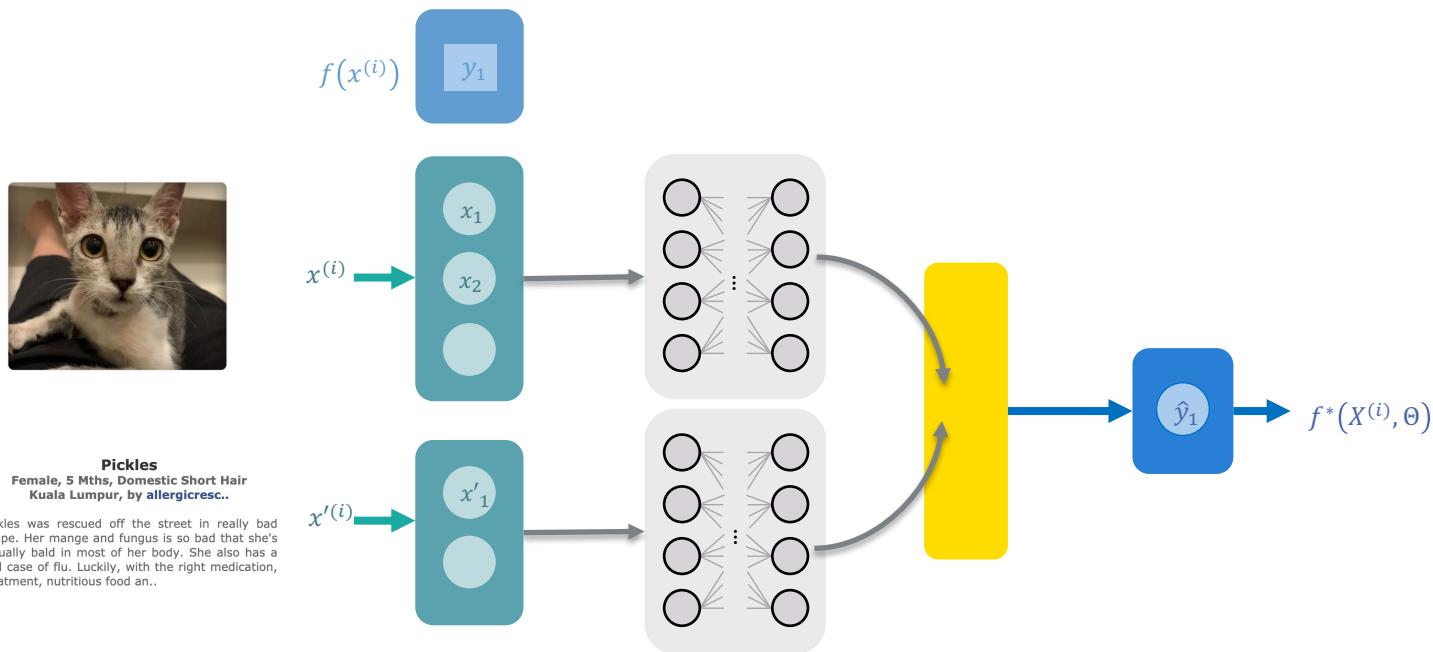
Ensembles



Deep Learning

Temas avanzados ► Ensamblado de modelos

Ensembles



Deep Learning

Temas avanzados ► Series de datos

Series de datos

Secuencias de datos con relación temporal entre ellos

Univariate

Una variable a la entrada (una a la salida)

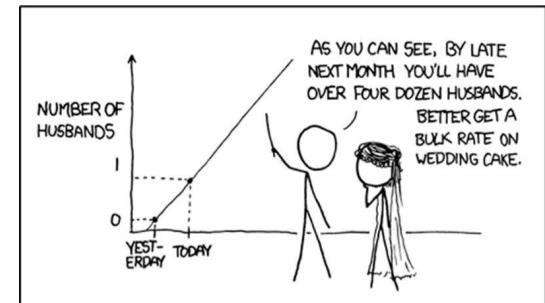
Multivariate

Varias variables a la entrada (una o varias a la salida)

Características del aprendizaje

Se busca predecir un valor (o valores) de la serie en el futuro

La predicción se realiza a partir de los valores $t, t-1, t-2, \dots$ de la(s) secuencia(s)



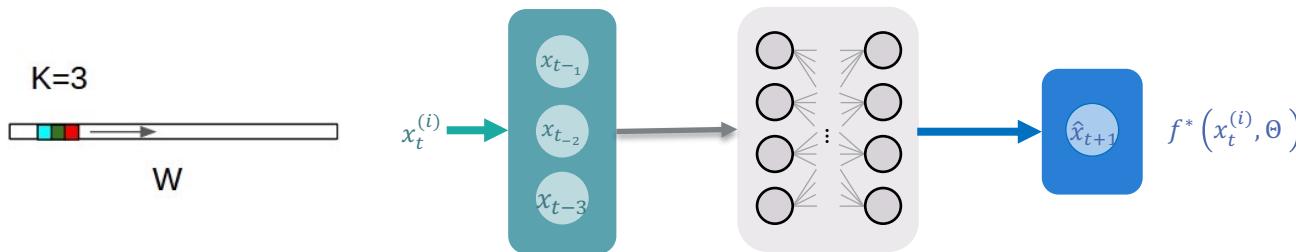
Extrapolating <https://xkcd.com/605/>

Deep Learning

Temas avanzados ► Series de datos

MLP “temporal”

La secuencia se segmenta en intervalos



Convolución temporal

Se aplica una convolución sobre la secuencia para agregar los valores



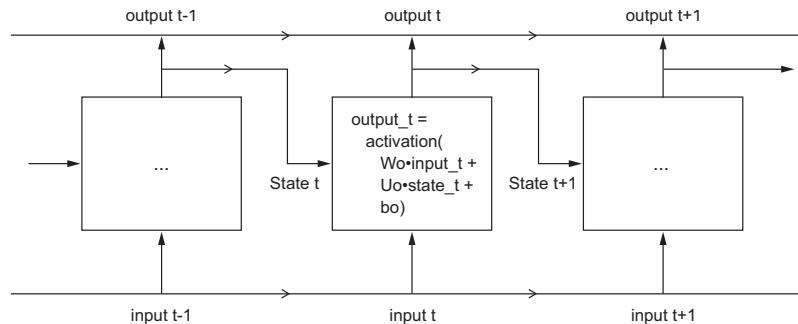
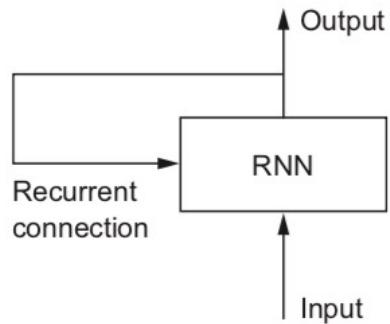
<https://stackoverflow.com/questions/42883547/intuitive-understanding-of-1d-2d-and-3d-convolutions-in-convolutional-neural-n>

Deep Learning

Temas avanzados ► Series de datos

Redes neuronales recurrentes

La salida depende de los valores de entrada y de la salida previa de la red



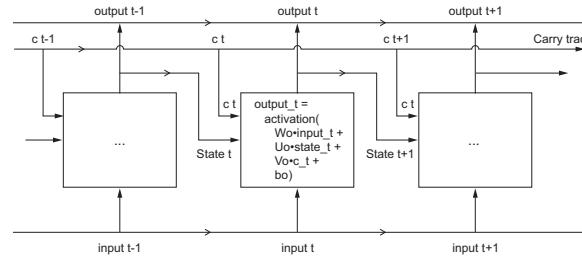
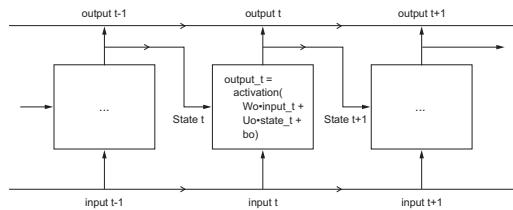
layer_simple_rnn

Deep Learning

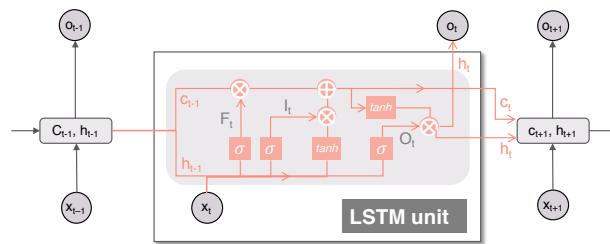
Temas avanzados ► Series de datos

Redes neuronales recurrentes avanzadas

Arquitecturas más complejas para conseguir recordar a más largo plazo



LSTM: Long-short term memory
layer_lstm



C. Olah (2015) Understanding LSTM Networks [[link](#)]

Deep Learning

Temas avanzados ► Procesamiento del Lenguaje Natural

Lenguaje natural

Tipo especial de secuencia de datos



fakenews-text.R

Características del aprendizaje

Codificación de los datos

> *Embeddings*

Contexto hacia delante y hacia atrás

> Mecanismos de atención

Múltiples tareas: extracción de entidades y relaciones, traducción automática, conversión imagen-texto, etc.

> Modelos de tipo *sequence-to-sequence*

> Modelos de tipo *transformer*

E. Saravia, S. Poria (2020) Modern Deep Learning Techniques Applied to Natural Language Processing [[link](#)]

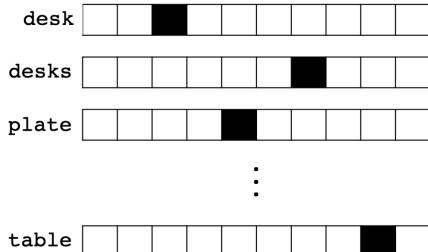
Deep Learning

Temas avanzados ► Procesamiento del Lenguaje Natural

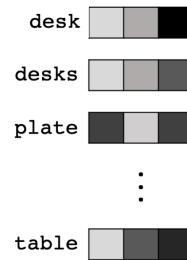
Embeddings

Representación de los elementos del lenguaje mediante vectores numéricos

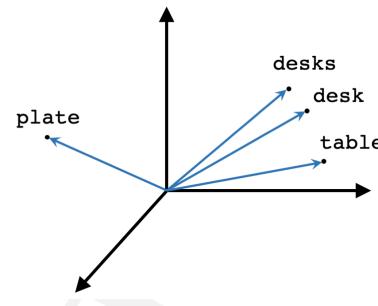
Un elemento del lenguaje (por ejemplo, una palabra) se representa con un conjunto de vectores (embeddings), cada uno de ellos codificando una característica (feature). Estos valores codificados son los que se utilizan como entrada de la red neuronal



one-hot encoding



vector space encoding



Deep Learning

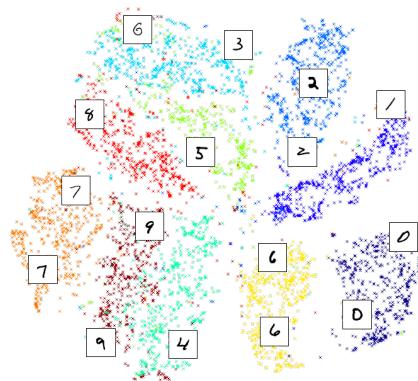
Temas avanzados ► Procesamiento del Lenguaje Natural

Embeddings

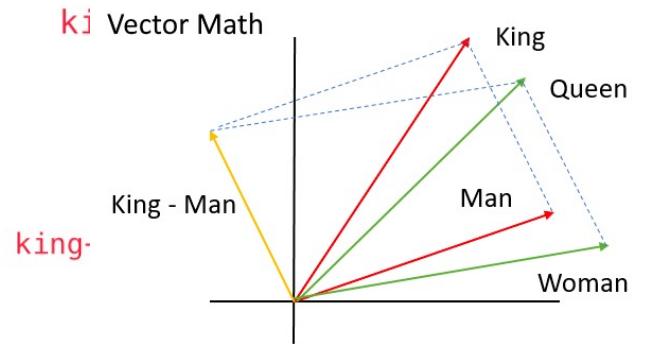
Dos elementos del lenguaje similares tendrán una representación cercana en el espacio vectorial definido por los embeddings

Possible operar con los vectores aplicando su semántica: <rey> - <hombre> + <mujer> = <reina>

MNIST dataset – Two-dimensional embedding of 70,000 handwritten digits with t-SNE



A. Fabisch (2020) t-Distributed Stochastic Neighbor Embedding (t-SNE) [[link](#)]



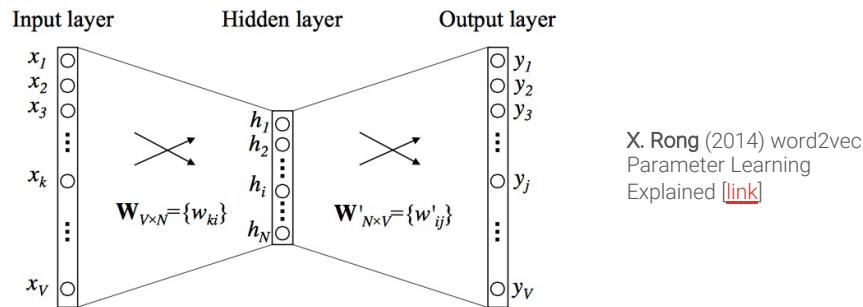
J. Alammár (2020) The Illustrated Word2vec [[link](#)]

Deep Learning

Temas avanzados ► Procesamiento del Lenguaje Natural

Embeddings

Se calculan a partir de sus propiedades lingüísticas, información contextual y recursos lingüísticos adicionales



Embeddings (pre-entrenados): word2vec, GloVe, fasttext, etc.

Modelos de lenguaje (pre-entrenados): BERT (Google), XLNet (Google), GPT-3 (OpenAI)

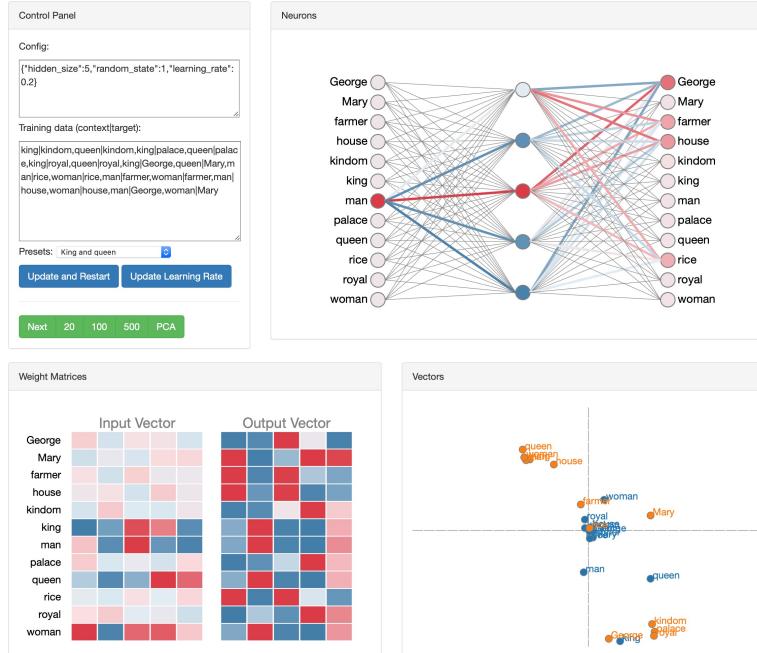
layer_embedding

Deep Learning

Temas avanzados ► Procesamiento del Lenguaje Natural

wevi: word embedding visual inspector

Everything you need to know about this tool - Source code



X. Rong (2014) Wevi: word embedding visual inspector [[link](#)]

Deep Learning

Temas avanzados ► Procesamiento del Lenguaje Natural

Arquitecturas avanzadas

Redes recurrentes bidireccionales

Consideran el contexto por delante y por detrás de una palabra

Mecanismos de atención

Sustituyen las recurrencias por “convoluciones” aplicadas a representaciones matriciales de texto para fijarse en partes concretas de las frases

Transformers

Arquitecturas con secciones de codificación-decodificación

Modelos predictivos de lenguaje (pre-entrenados):

BERT (Google), XLNet (Google), GPT-3 (OpenAI)

Deep Learning

Temas avanzados ► Procesamiento del Lenguaje Natural

Tareas

General Language Understanding Evaluation (2019)
clasificación, similitud, predicción, etc.



<https://youtu.be/otvqkWFvUZU>

Probando a GPT-3



Opinion

GPT-3, Bloviator: OpenAI's language generator has no idea what it's talking about

Tests show that the popular AI still has a poor grasp of reality.

by **Gary Marcus** and **Ernest Davis**

August 22, 2020

<https://www.technologyreview.com/2020/08/22/1007539/gpt3-openai-language-generator-artificial-intelligence-ai-opinion/>

Deep Learning

Temas avanzados ► Procesamiento del Lenguaje Natural

Herramientas

spaCy

<https://spacy.io/>



HUGGING FACE

AllenNLP

<https://allennlp.org/>

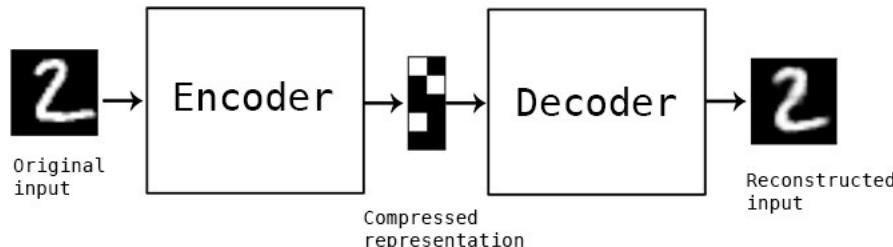
NLTK

<https://www.nltk.org/>

Deep Learning

Temas avanzados ► Autoencoders & transformers

Autoencoder : modelo optimizado para obtener una réplica de la entrada



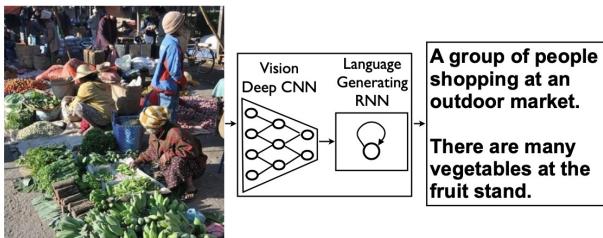
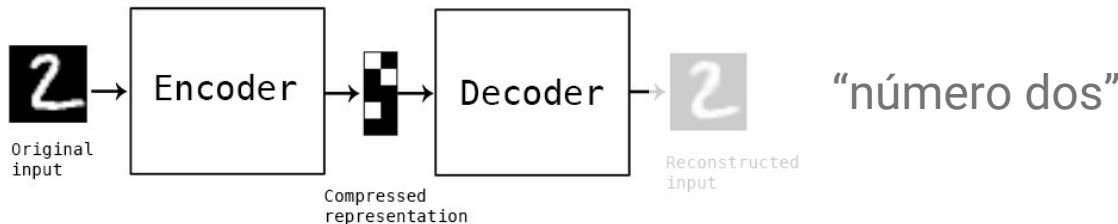
F. Chollet (2016) Building autoencoders with Keras [\[link\]](#)

- Dos módulos: codificador, decodificador
- Representación intermedia en espacio latente
- Aprendizaje auto-supervisado (*self-supervised*)
- Entrenamiento: minimizar $x - D(E(x))$

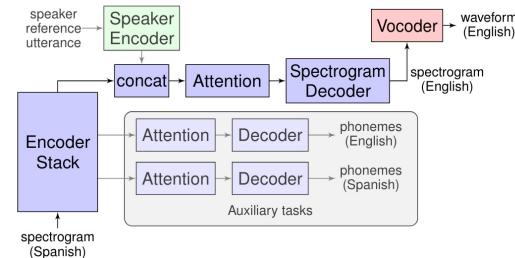
Deep Learning

Temas avanzados ► Autoencoders & transformers

Sequence-to-sequence: modelo optimizado para obtener una secuencia a partir de una secuencia



O. Vinyals, A. Toshev, S. Bengio, D. Erhan (2014) Show and Tell: A Neural Image Caption Generator [[link](#)]

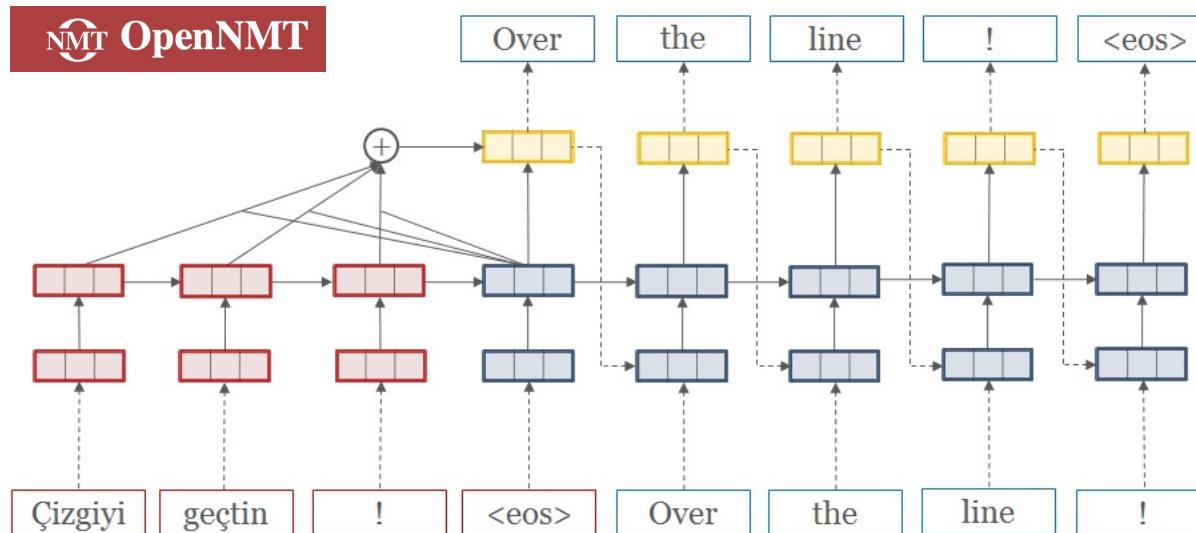


Y. Jia et al (2019) Direct speech-to-speech translation with a sequence-to-sequence model [[link](#)]

Deep Learning

Temas avanzados ► Autoencoders & transformers

Traducción automática

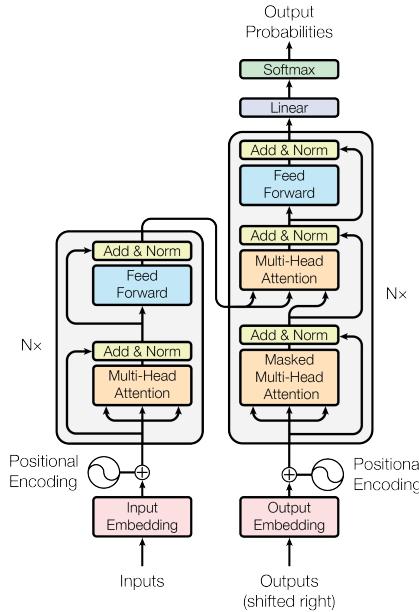


L. Gatys, A. Ecker, M. Bethge (2016) Machine Translation Reading List [[link](#)]

Deep Learning

Temas avanzados ► Autoencoders & transformers

Transformer: modelo para sequence-to-sequence que sólo utiliza atención

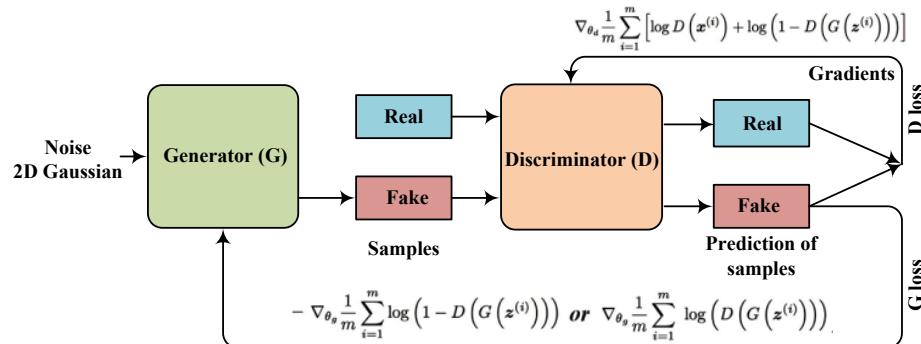


A. Vaswani et al. (2017) Attention is all you need [link]

Deep Learning

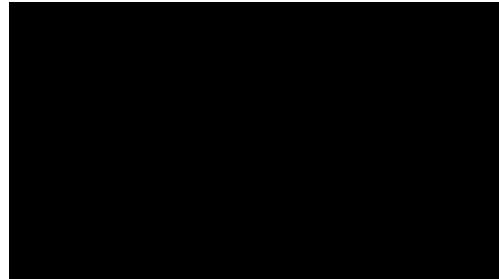
Temas avanzados ► Modelos generativos

Generative adversarial networks (GANs): procedimiento para entrenamiento de modelos generativos

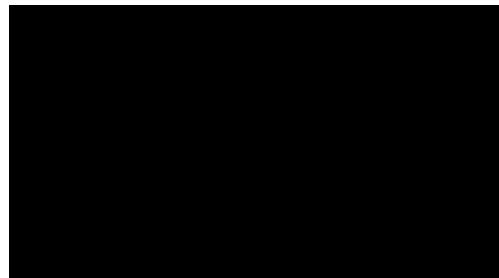


I. Goodfellow et al. (2014) Generative Adversarial Nets. NIPS 2014 [\[link\]](#)

D. Saxena, J. Cao (2020) Generative Adversarial Networks (GANs): Challenges, Solutions, and Future Directions [\[link\]](#)



T. Karras et al. (2020) StyleGAN2 [\[link\]](#)

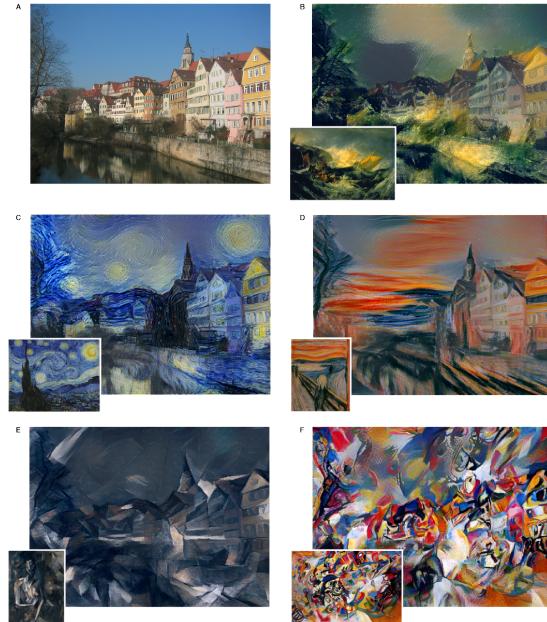
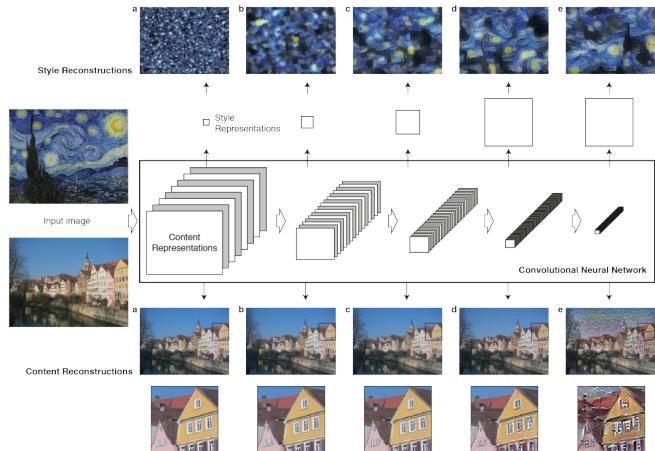


Arxiv Insights (2019) Face editing with Generative Adversarial Networks [\[link\]](#)

Deep Learning

Temas avanzados ► Modelos generativos

Transferencia de estilo



L. Gatys, A. Ecker, M. Bethge (2016) A Neural Algorithm of Artistic Style [[link](#)]

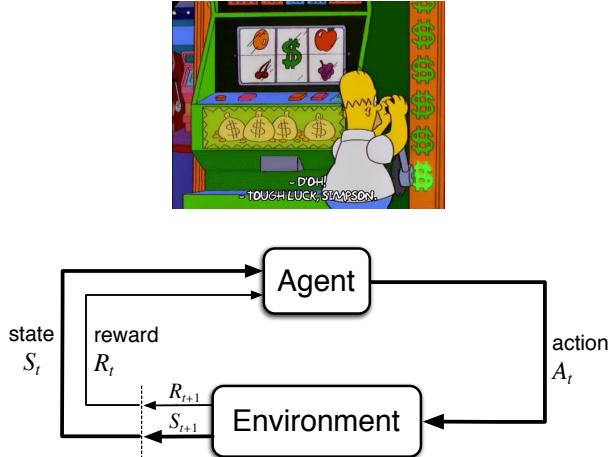
Índice

1. Fundamentos
 2. Redes convolutivas
 3. Mejora de aprendizaje
 4. Gestión del proceso de aprendizaje
 5. Transferencia de aprendizaje
 6. Modelos avanzados
- **Bonus track:** Aprendizaje profundo por refuerzo

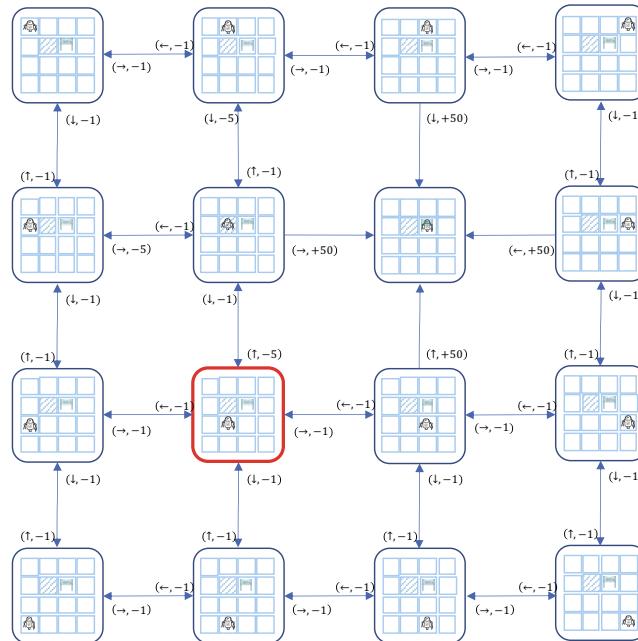
Aprendizaje profundo por refuerzo

Concepto

Aprendizaje por refuerzo: Resolución de una tarea mediante “prueba y error”

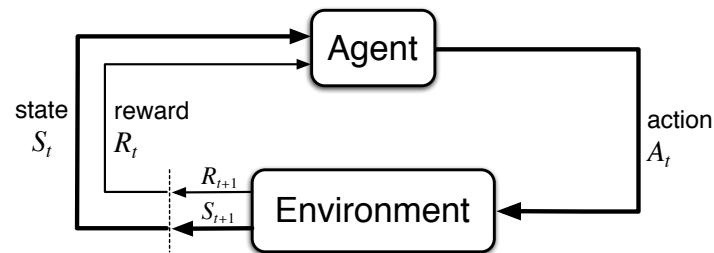


R.S. Sutton, A.G. Barto (2018)
Reinforcement Learning. MIT Press.



Aprendizaje profundo por refuerzo

Formulación



Markov Decision Process - MDP

tiempo: $t = 0, 1, 2, \dots$

estado: $S_t \in \mathcal{S}$

acción: $A_t \in \mathcal{A}(S_t)$

recompensa: $R_{t+1} \in \mathcal{R} \subset \mathbb{R}$

estado siguiente: $S_{t+1} \in \mathcal{S}$

secuencia:

$S_0, A_0, R_1, S_1, A_1, R_2, S_2, A_2, R_3, \dots$

dinámica del MDP:

$$p(s', r | s, a) \doteq \Pr\{S_t = s', R_t = r | S_{t-1} = s, A_{t-1} = a\}$$

Aprendizaje profundo por refuerzo

Formulación

Markov Decision Process - MDP

Recompensa acumulada:

$$G_t \doteq R_{t+1} + R_{t+2} + R_{t+3} + \dots + R_T$$

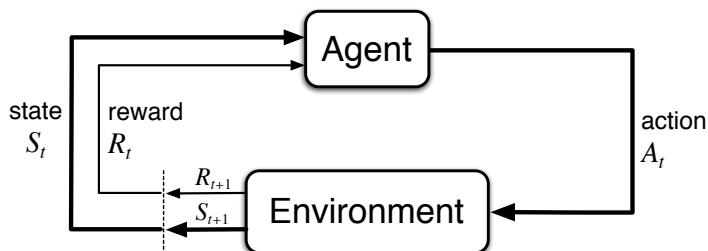
Recompensa con descuento:

$$G_t \doteq R_{t+1} + \gamma R_{t+2} + \gamma^2 R_{t+3} + \dots = \sum_{k=0}^T \gamma^k R_{t+k+1}$$

Política de actuación: π

Acción según π : $\pi(a|s)$

Política de actuación óptima: π_*



Aprendizaje profundo por refuerzo

Formulación

Markov Decision Process - MDP

Función de estado-valor [state value] (para todo s):

$$v_{\pi}(s) \doteq \mathbb{E}_{\pi}[G_t \mid S_t = s] = \mathbb{E}_{\pi} \left[\sum_{k=0}^{\infty} \gamma^k R_{t+k+1} \mid S_t = s \right]$$

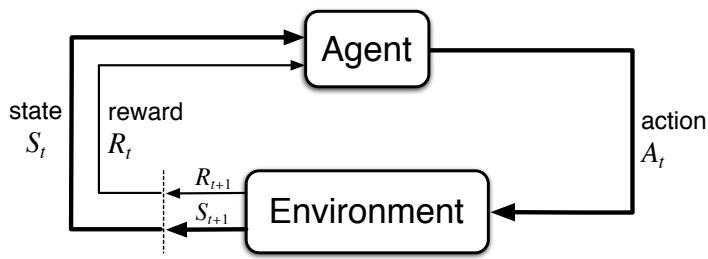
Función de acción-valor [action value] (para todo (s, a)):

$$q_{\pi}(s, a) \doteq \mathbb{E}_{\pi}[G_t \mid S_t = s, A_t = a] = \mathbb{E}_{\pi} \left[\sum_{k=0}^{\infty} \gamma^k R_{t+k+1} \mid S_t = s, A_t = a \right]$$

Comparación de políticas de actuación y política óptima

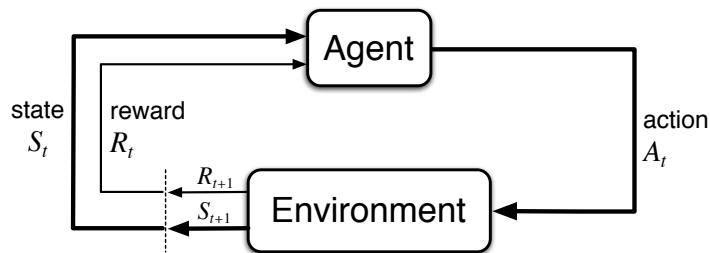
$$\pi \geq \pi' \Leftrightarrow v_{\pi}(s) \geq v'_{\pi}(s)$$

$$\pi_* \geq \pi' \quad \forall \pi' \quad \text{(garantizada)}$$



Aprendizaje profundo por refuerzo

Formulación



Ecuación de Bellman (recursividad de v_π)

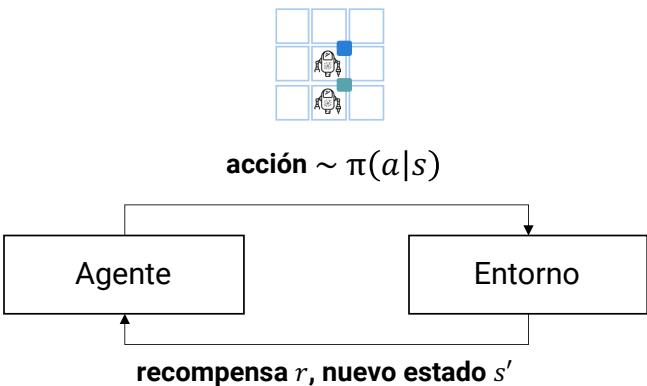
$$\begin{aligned} v_\pi(s) &\doteq \mathbb{E}_\pi[G_t \mid S_t = s] \\ &= \mathbb{E}_\pi[R_{t+1} + \gamma G_{t+1} \mid S_t = s] \\ &= \mathbb{E}_\pi[R_{t+1} + \gamma v_\pi(S_{t+1}) \mid S_t = s] \end{aligned}$$

Ecuación de Bellman (optimalidad de v_{π_*})

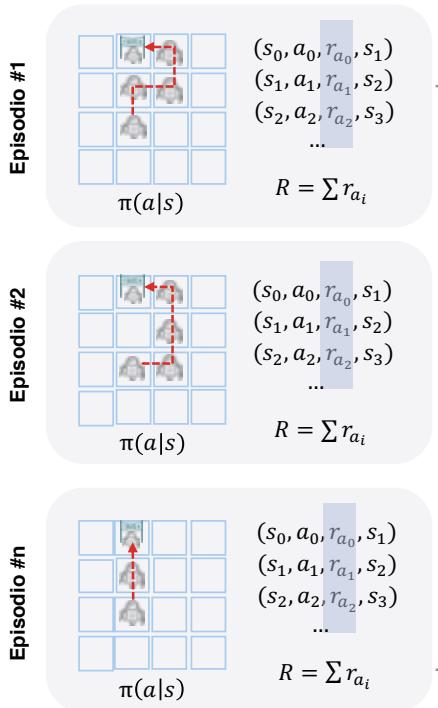
$$v_{\pi_*}(s) = \max_{a \in \mathcal{A}(s)} q_{\pi_*}(s, a)$$

Aprendizaje profundo por refuerzo

Resolución



Episodios de entrenamiento



Estado	Acción	q
(3, 0)	↑	10
(2, 0)	→	12
...

training

$$\pi' = \arg \max_{\pi} \sum_{t=0}^{\infty} \gamma^t * r_{at}(s_t, s_{t+1})$$

con $a_t \sim \pi(a|s)$

$\gamma \in [0, 1]$: tasa de descuento

Aprendizaje profundo por refuerzo

Resolución

Método de Montecarlo (MC)

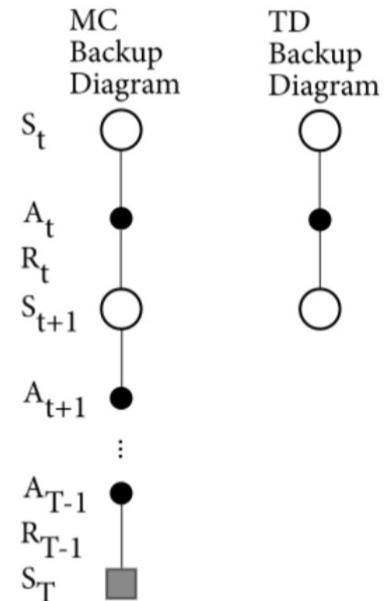
Estimar la tabla Q iterativamente con los datos recogidos en cada episodio con la política π

$$Q'(s, a) \approx Q(s, a) + \hat{q}_{\pi_i}(s, a)$$

Q-Learning (TD)

Estimar la tabla Q iterativamente con los datos recogidos en cada paso con la política π

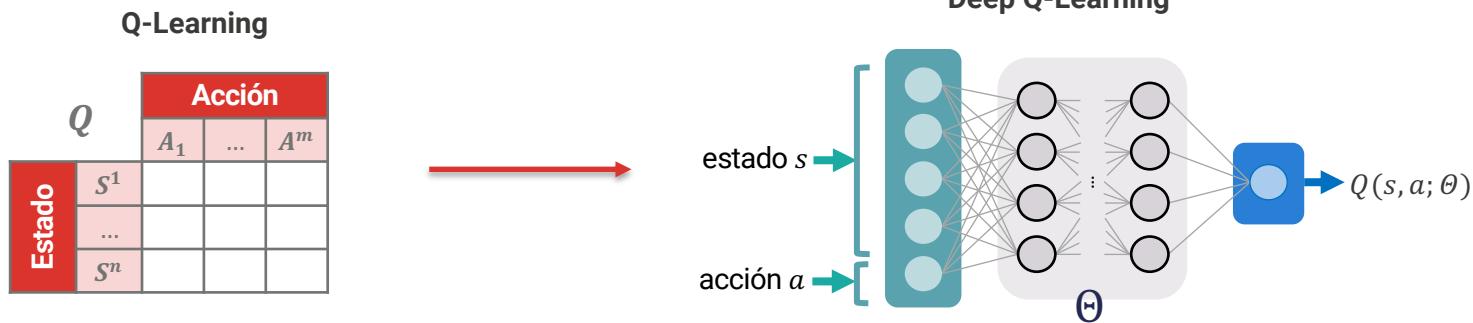
$$Q(S_t, A_t) \leftarrow Q(S_t, A_t) + \alpha \left(R_{t+1} + \gamma \max_{a \in \mathcal{A}} Q(S_{t+1}, a) - Q(S_t, A_t) \right)$$



Aprendizaje profundo por refuerzo

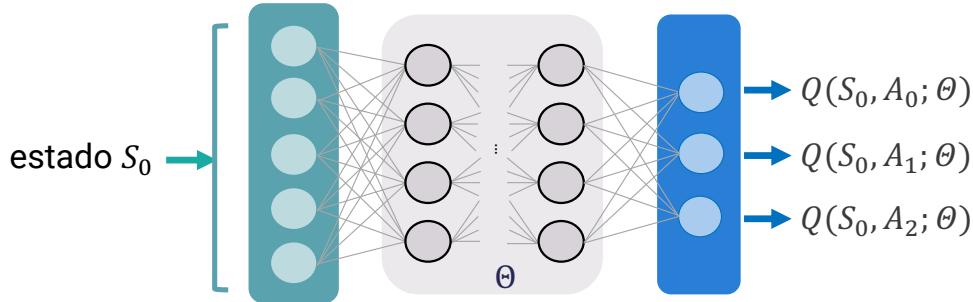
Resolución

Aprendizaje profundo por refuerzo: Uso de redes neuronales para estimar la “mejor acción”



Aprendizaje profundo por refuerzo

DQN – Deep Q-Network



Entrenamiento (*learning*)

Entrada: S

Salida: $Q(S; \theta)$

Función de error: $\mathcal{L}(Q(S), Q(S; \theta))$

Guardar una base de datos o memoria de *experiencias*

Se puede utilizar en cualquier orden y más de una vez

*¡No disponemos
de esta salida!*

Pero podemos estimarla a partir de:

$S_0 \ A_0 \ R_1 \ S_1$

$$Q(S_0, A_0) \leftarrow Q(S_0, A_0) + \alpha \left(R_1 + \gamma \max_{a \in \mathcal{A}} Q(S_1, a) - Q(S_0, A_0) \right)$$

Aprendizaje profundo por refuerzo

DQN – Deep Q-Network

$$\ell(x^{(i)}, \Theta) = \mathcal{L}(Q(S), Q(S, A; \Theta))$$

$$\text{Con MSE: } E = \mathbb{E}_{\pi} \left[(Q(S, A) - Q(S, A; \Theta))^2 \right]$$

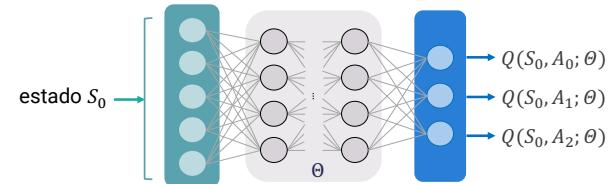
Recordemos que: $\Delta \Theta = \Delta w = -\eta \frac{\partial E}{\partial w}$

$$\text{Desarrollamos: } \frac{\partial E}{\partial w} = 2(Q(S, A) - Q(S, A; \Theta)) \frac{\partial Q(S, A; \Theta)}{\partial w}$$

$$\text{Sustituimos: } \Delta \Theta = -2\eta (Q(S, A) - Q(S, A; \Theta)) \nabla_{\Theta} Q(S, A; \Theta)$$

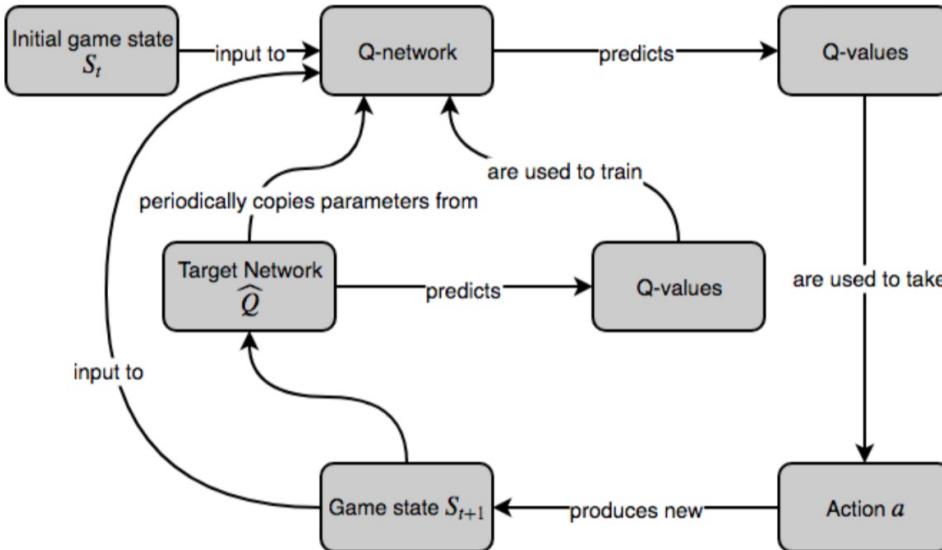
Simplificamos y aplicamos la expresión de Q-Learning:

$$\Delta \Theta = \alpha \left(R + \gamma \max_{a \in \mathcal{A}} Q(S', a; \Theta) - Q(S, A; \Theta) \right) \nabla_{\Theta} Q(S, A; \Theta)$$



Aprendizaje profundo por refuerzo

DQN – Deep Q-Network



A. Zai, B. Brown (2018) **Deep Reinforcement Learning in Action**. Manning.

Aprendizaje profundo por refuerzo

DQN – Deep Q-Network



V. Mnih et al. (2015) Human-level control through deep reinforcement learning. Nature 518, 529-533
Deep Mind DQN (2016). Más: <https://deepmind.com/research/dqn/>

Aprendizaje profundo por refuerzo

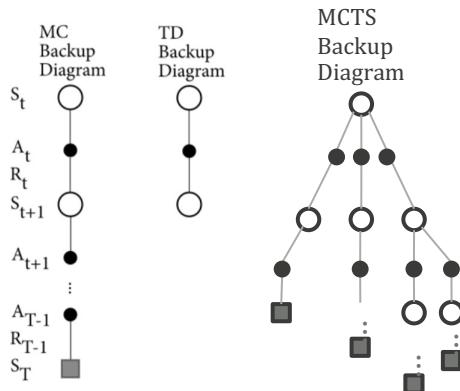
Monte Carlo Tree Search



AlphaGo

Resolución de juegos mediante árboles de búsqueda

Aprendizaje profundo por refuerzo



<http://www.alphagomovie.com/>

D. Silver et al. (2016) Mastering the game of Go with Deep Neural Networks & Tree Search. Nature 529, 484-489

Aprendizaje profundo por refuerzo

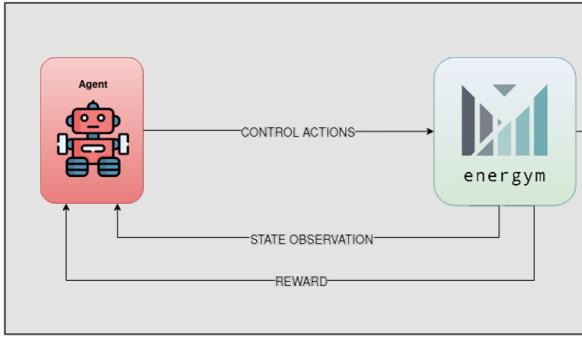
Aplicaciones



Alejandro Campoy Nieves (2020) Aprendizaje por refuerzo profundo para la resolución de juegos



Ángel Murcia Díaz (2021) Aprendizaje profundo por refuerzo en el entorno Google Football



energym (2021) An open-source gym-like environment for building energy control



L2RPN (2021) Learning to operate a power grid

Sistemas Inteligentes para Gestión en la Empresa

Máster en Ingeniería Informática

¡Gracias!

Dale a *like* (en la encuesta)

