Deep Learning I

Introducción al machine learning y a las redes neuronales

MIGUEL ÁNGEL MARTÍNEZ DEL AMOR

DEPARTAMENTO CIENCIAS DE LA COMPUTACIÓN E INTELIGENCIA ARTIFICIAL

UNIVERSIDAD DE SEVILLA

About me

- **Miguel Ángel Martínez del Amor**
- Profesor Ayudante Doctor del Departamento de Ciencias de la Computación e Inteligencia Artificial

www.cs.us.es/~mdelamor

mdelamor@us.es

@miguelamda

miguelamda

Research Group on Natural Computing

DeepKnowledge

NVIDIA Deep Learning Institute

Warning!

- Si quieres reproducir el código que veremos al final, te aconsejo que:
  - O bien tengas abierta una sesión con tu **cuenta de Gmail** (si no tienes, hazte una).
  - O bien tengas instalado **Python 3** en local junto con *Jupyter, Keras 2.2.5, Tensorflow 1.15, sklearn, matplotlib, numpy*…

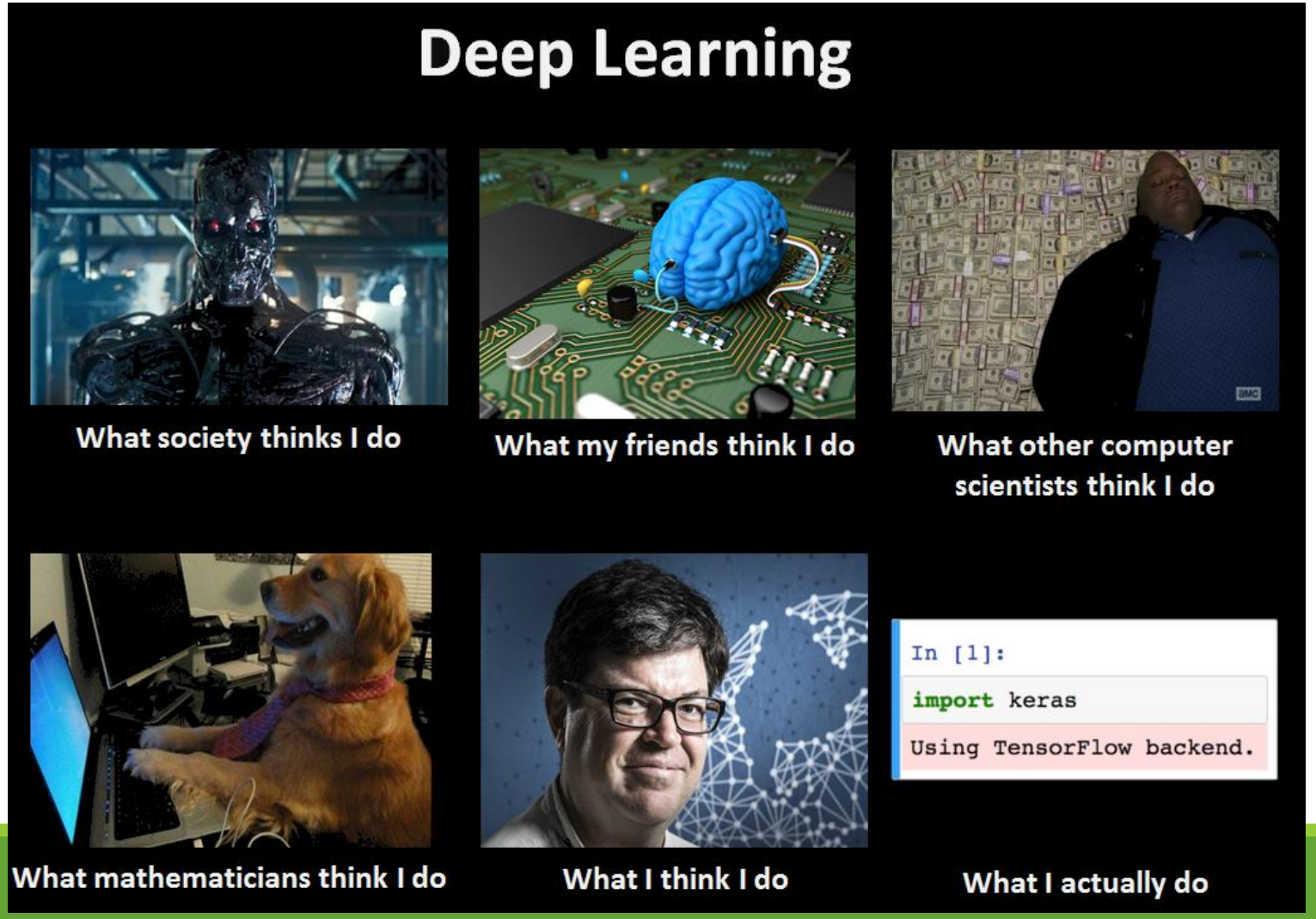
Índice

1. Motivación
2. Introducción al Machine Learning
3. Redes neuronales multicapa
4. Optimización de redes neuronales
5. Entornos software para Deep Learning
6. Nuestra primera red con Keras

Índice

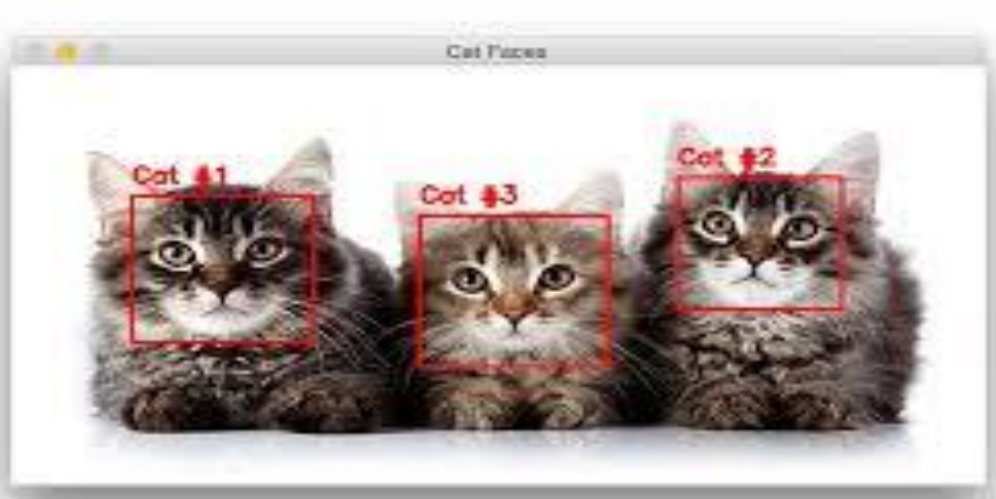
¿Inteligencia Artificial?

¿Deep Learning?



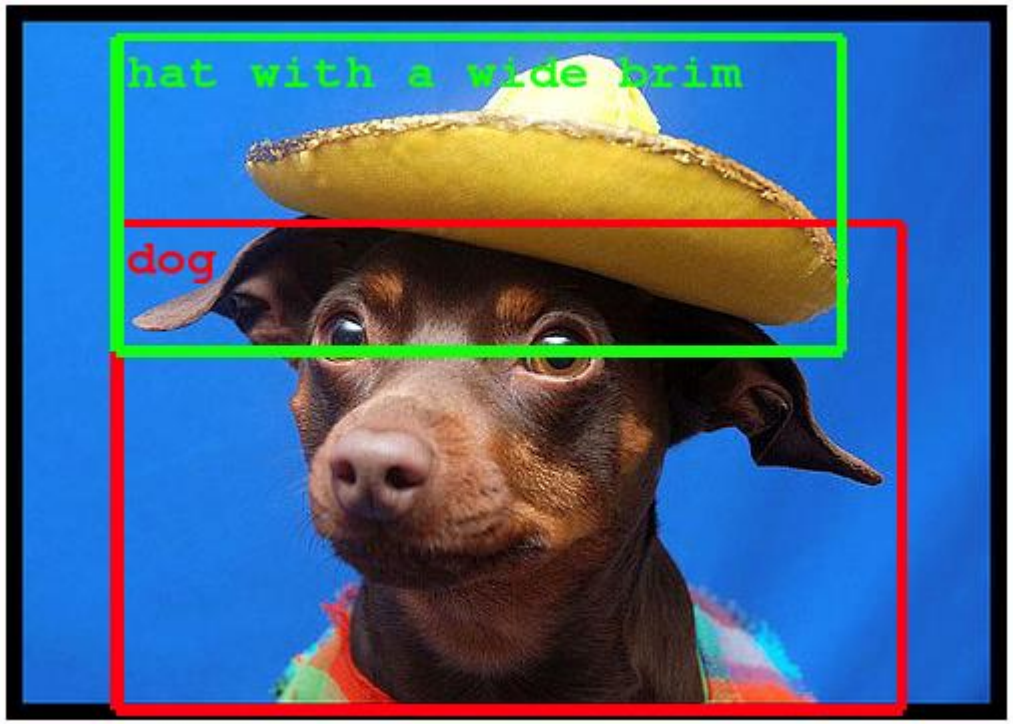
Motivación (visión artificial)

Clasificación de objetos (y gatos…)



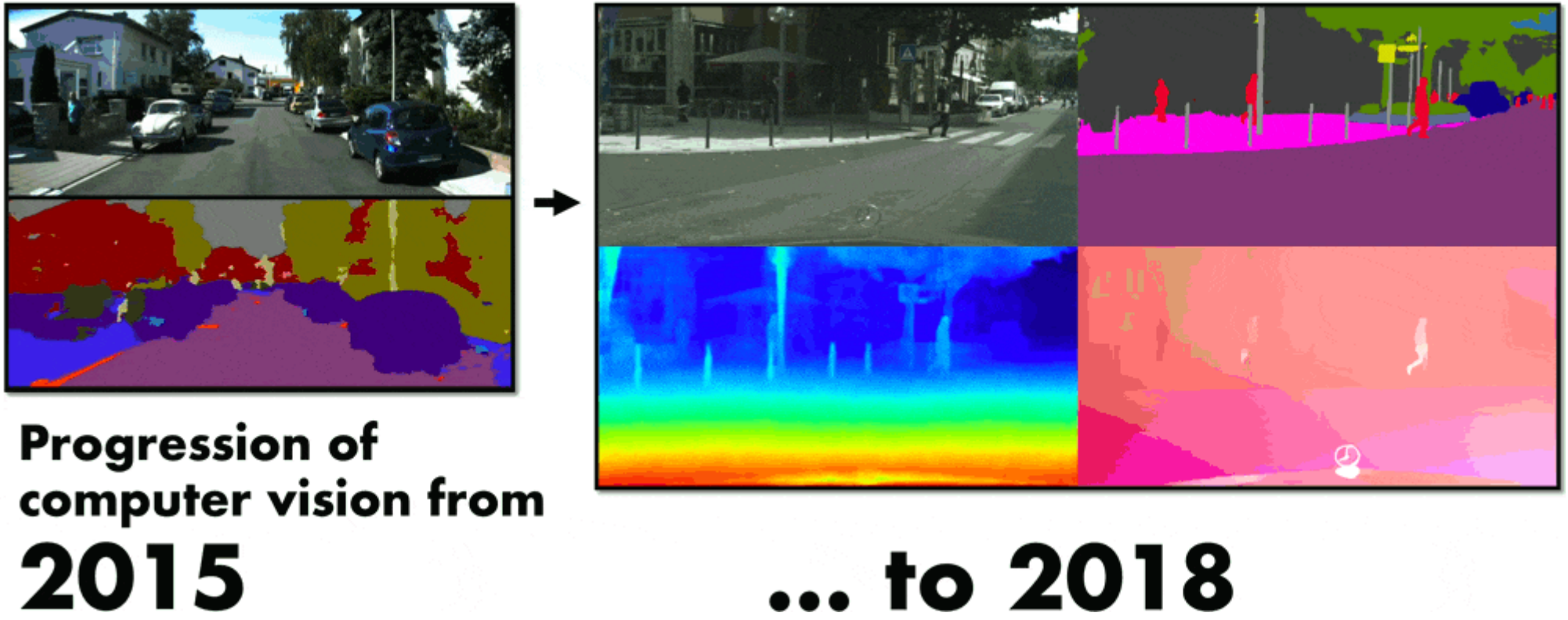
Motivación (visión artificial)

Localización de objetos en imágenes



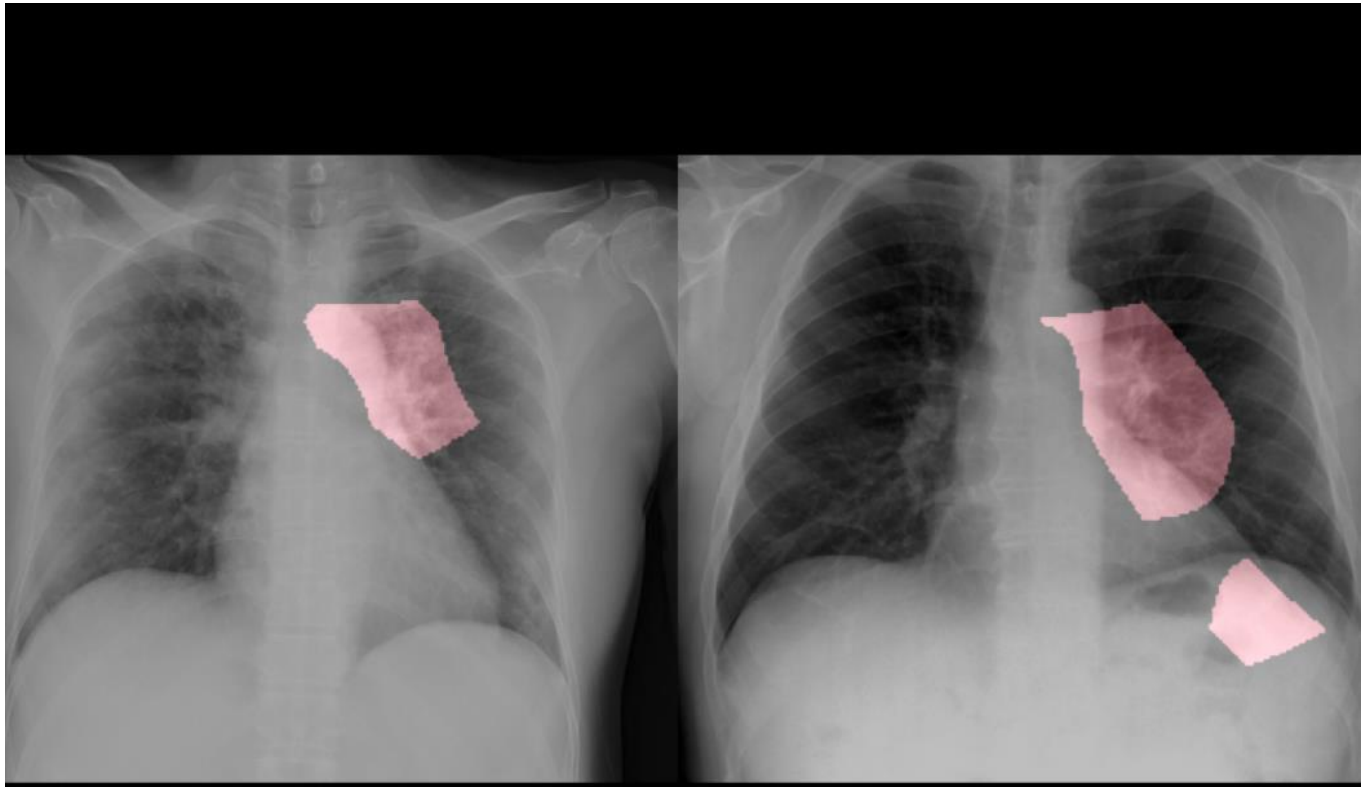
Motivación (visión artificial)

Conducción autónoma (segmentación, localización obstáculos)



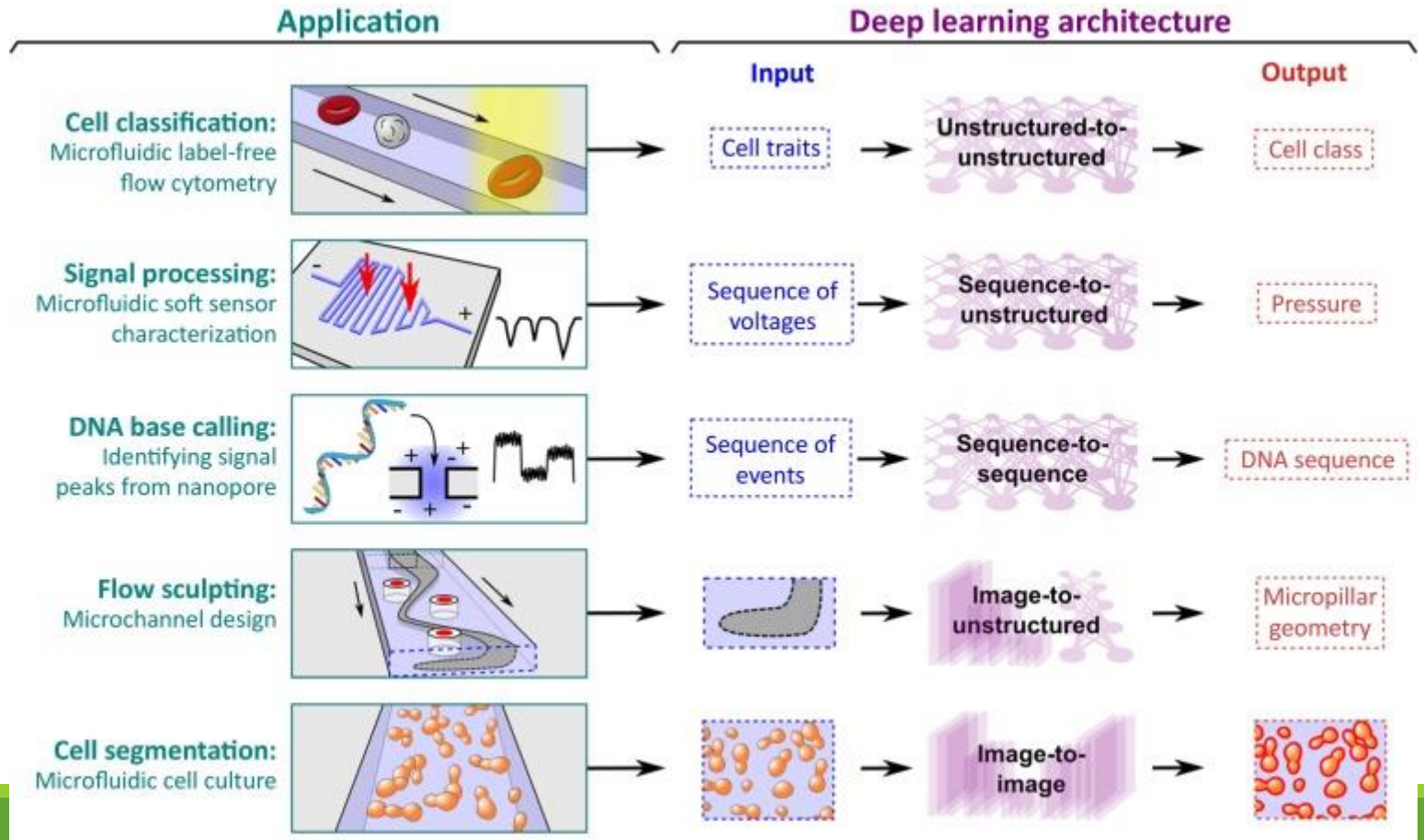
Motivación (imágenes médicas)

Segmentación de neumonía ocasionada por COVID-19



https://betakit.com/darwinai-university-of-waterloo-develop-neural-network-for-covid-19-detection/

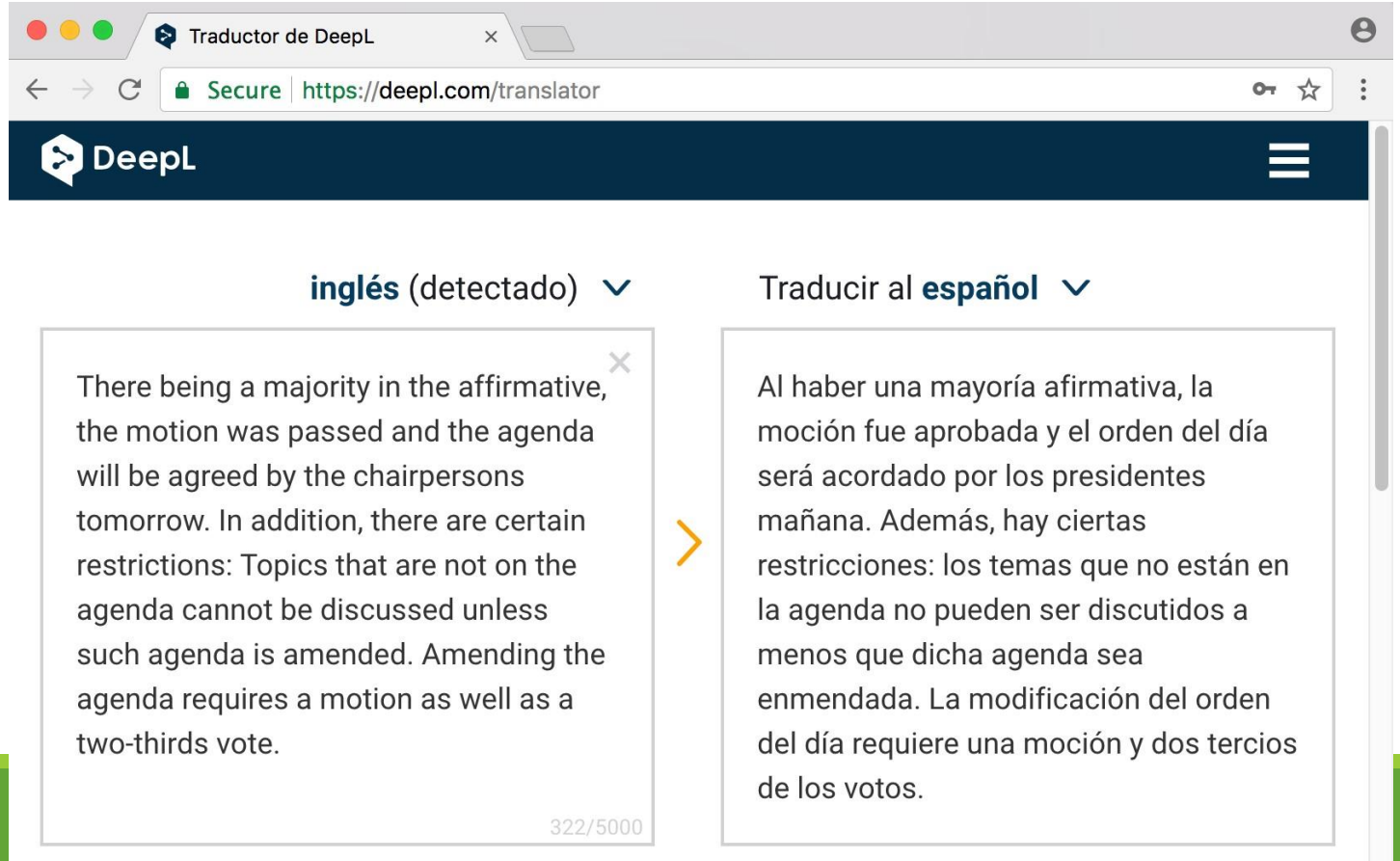
Motivación (biomedicina)



https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0167779918302452

Motivación (lenguaje natural)

Traductores automáticos



Motivación (series temporales)

Tratamiento de señales (audio, música, …)

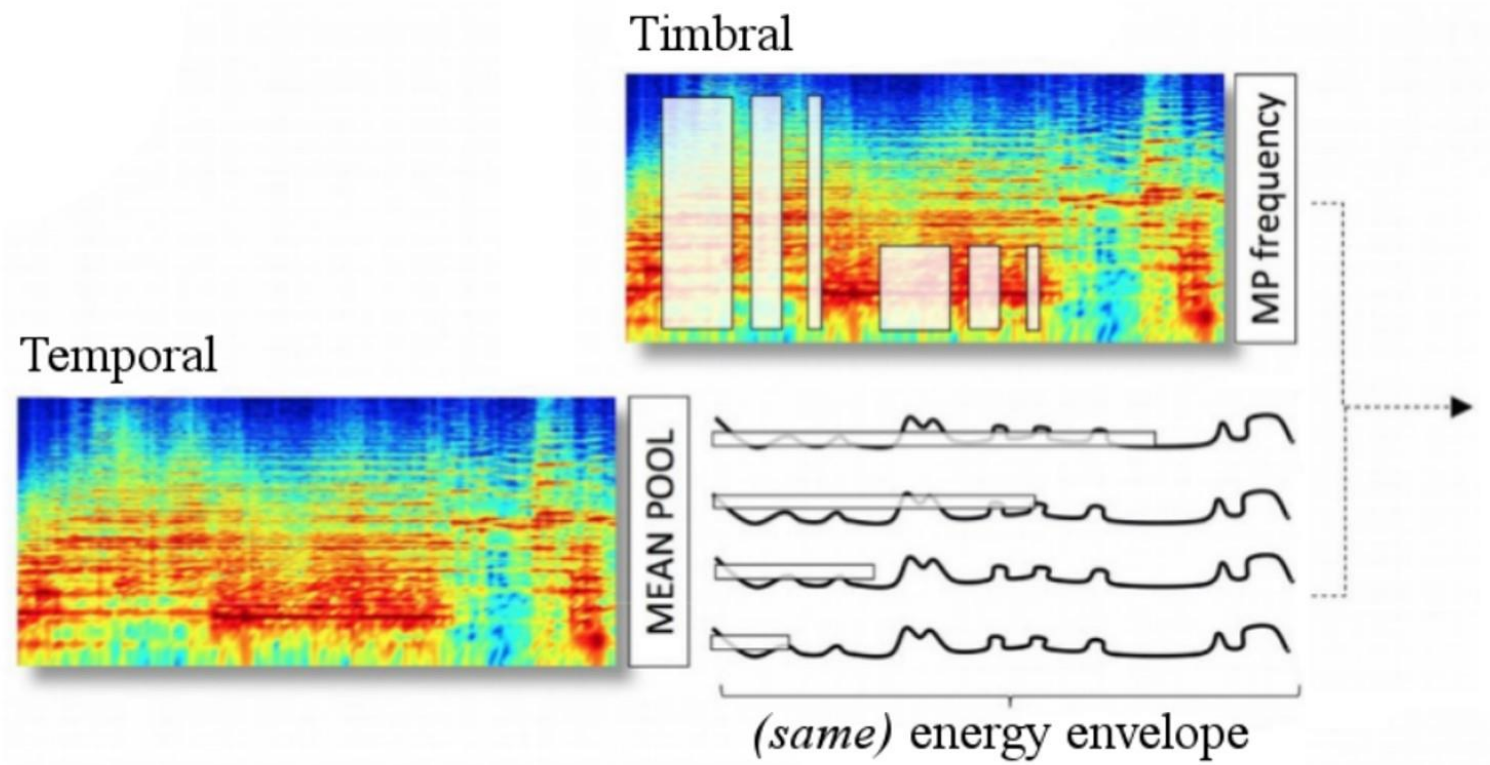


Figure 4. *Timbral+temporal* architecture. MP: max-pool.

https://bit.ly/2Rjmqhi

Motivación (generativo)

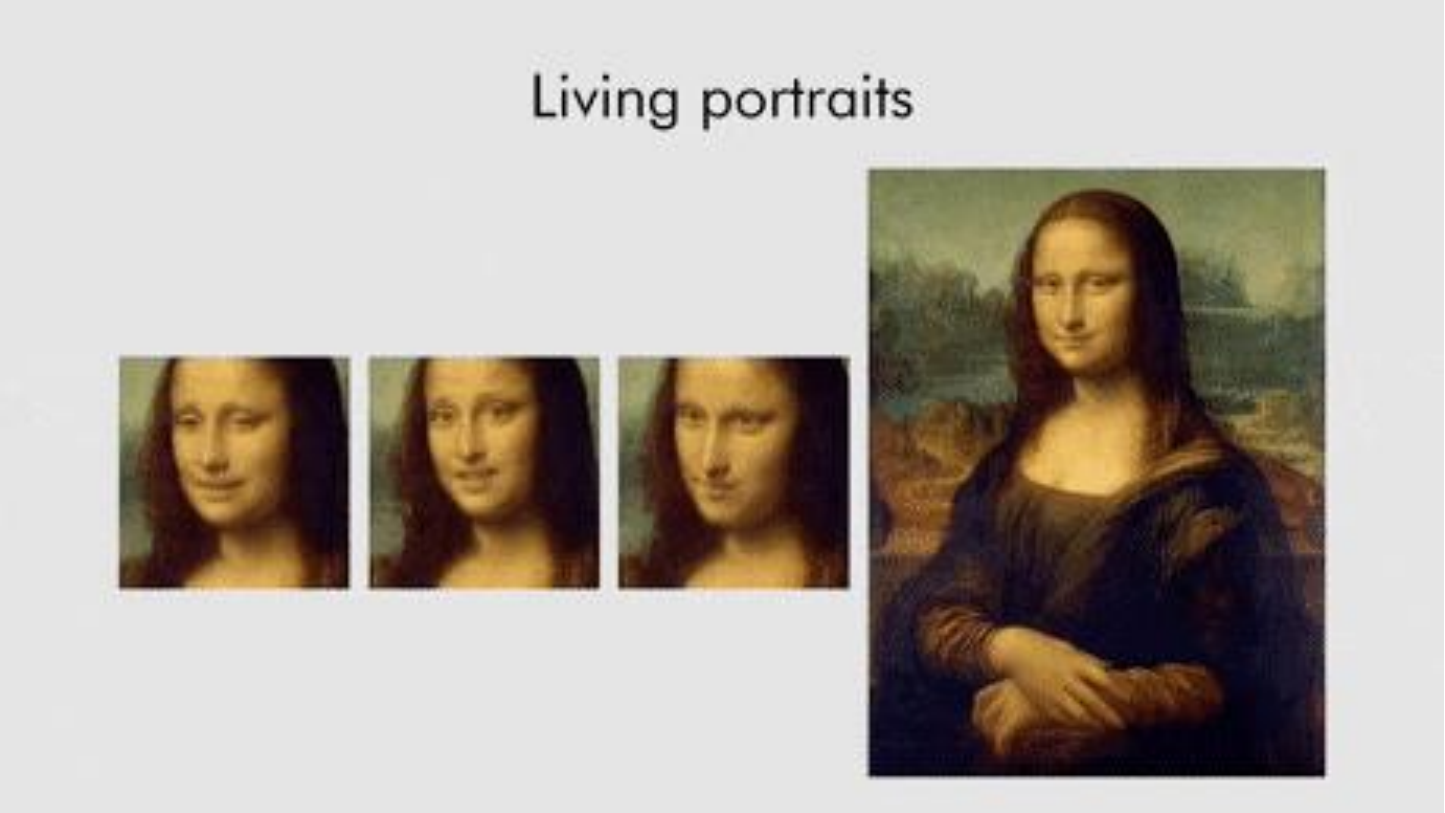
Generando caras artificiales

Motivación (generativo)

Paisajes fotorealísticos desde un dibujo

Motivación (generativo)

Haciendo hablar a la Mona Lisa:

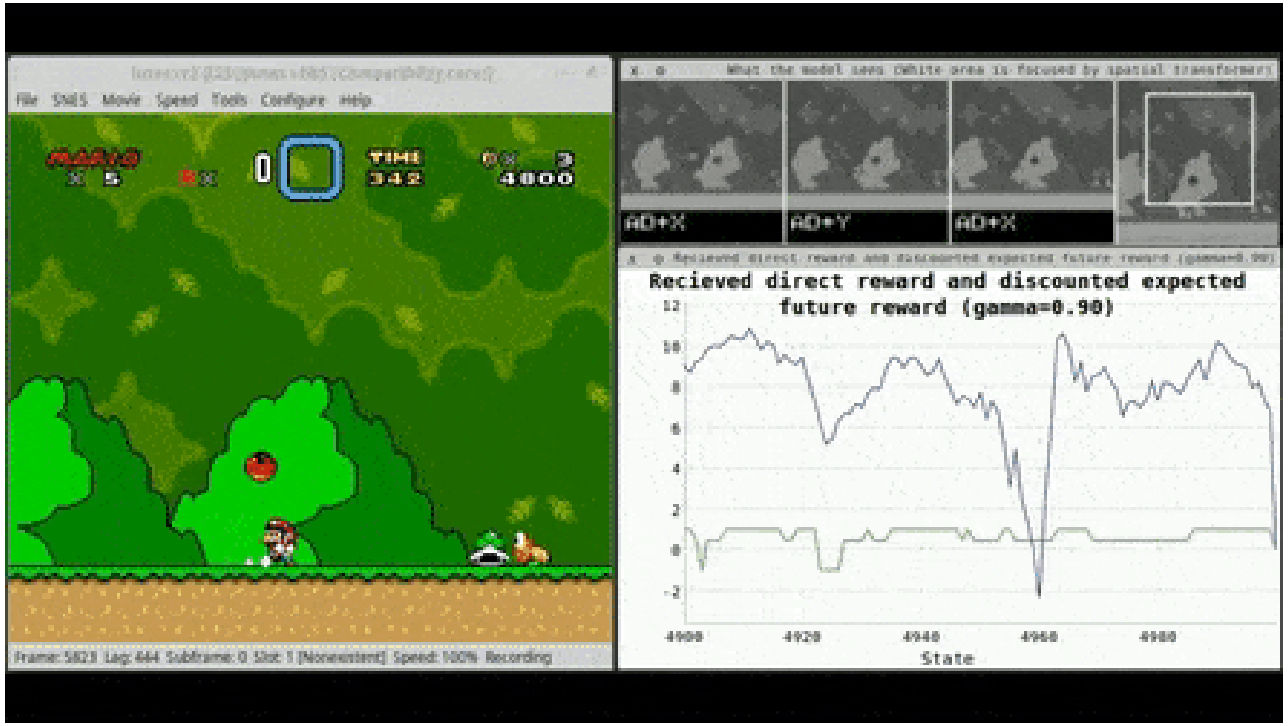


Motivación (generativo)

Añadir audio a vídeos sin sonido

Motivación (juegos y agentes)

Ganar a juegos Atari y Nintendo (sin conocer las reglas)



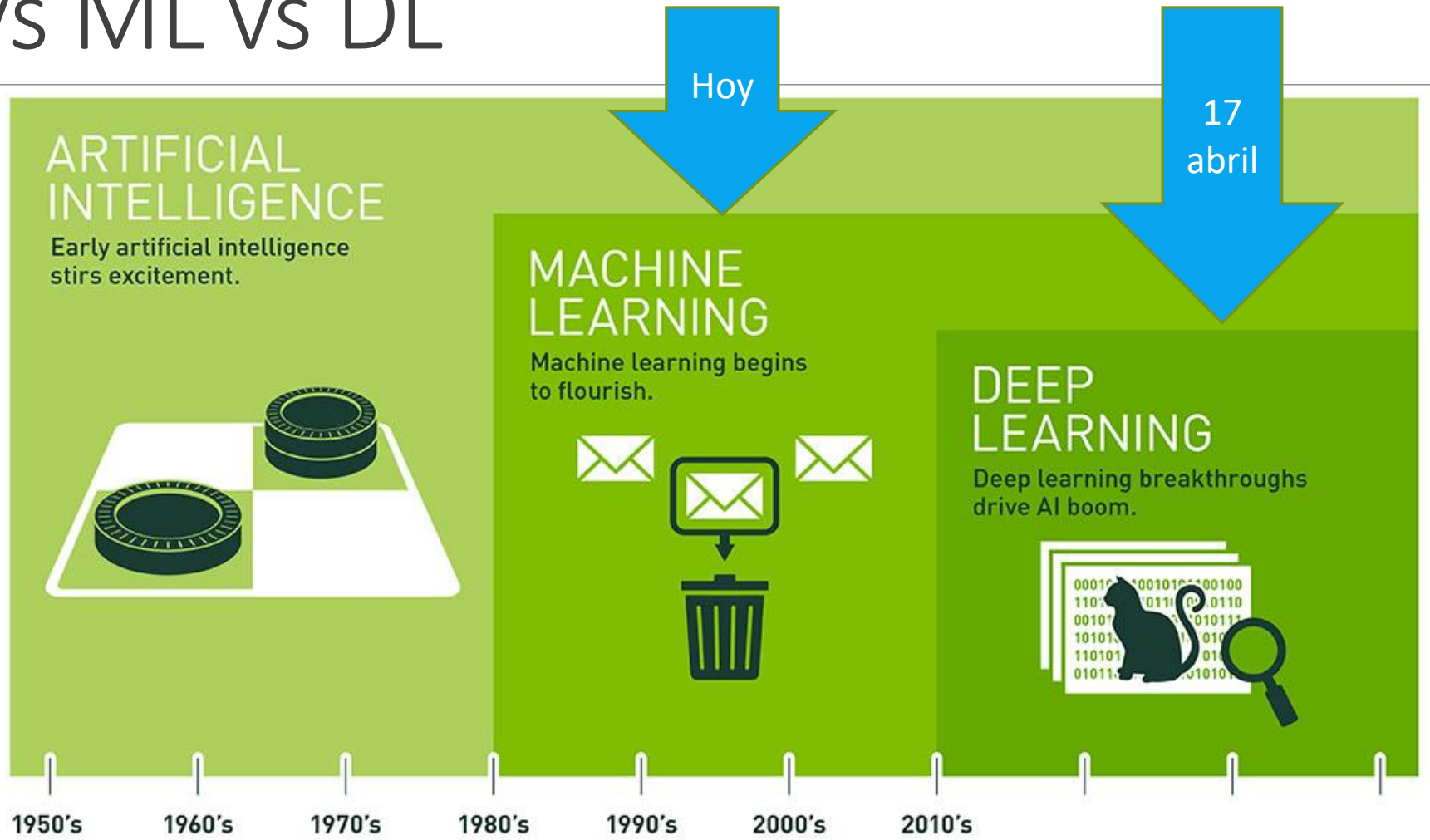
Motivación (juegos y agentes)

Ganar a StarCraft II (**AlphaStar**) y al GO (**AlphaGo**)

Índice

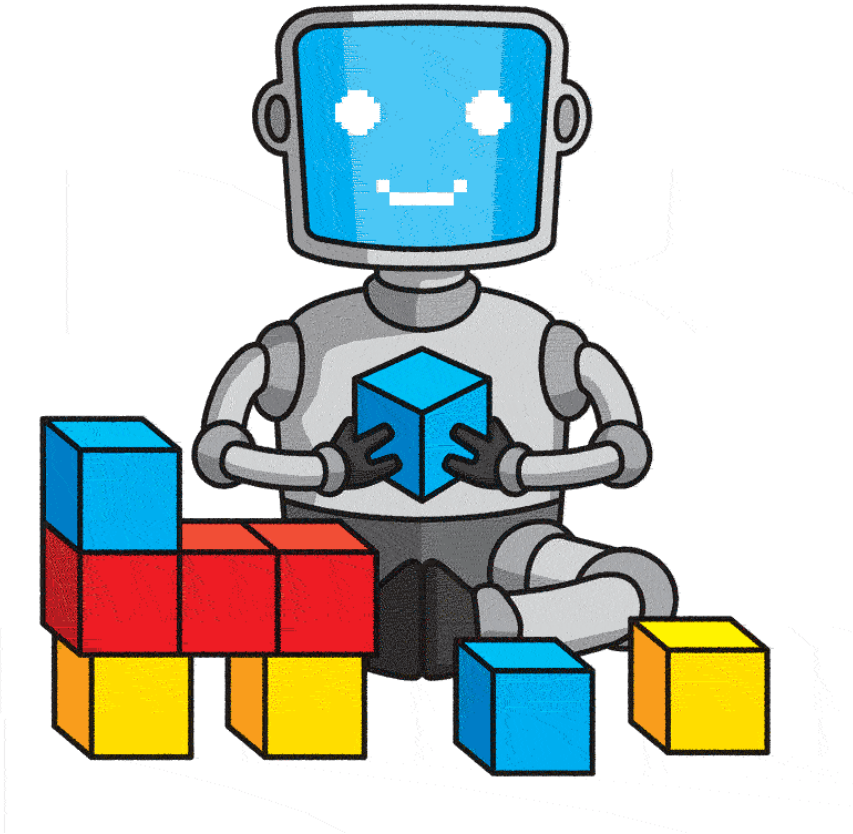
1. Motivación
2. Introducción al Machine Learning
3. Redes neuronales multicapa
4. Optimización de redes neuronales
5. Entornos software para Deep Learning
6. Nuestra primera red con Keras

IA vs ML vs DL



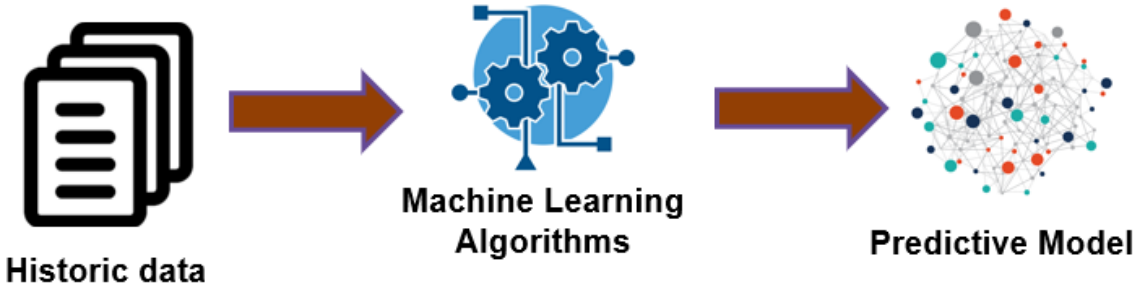
http://www.cs.us.es/~fsancho/?p=deep-learning

¿Qué es Machine Learning?



¿Qué es Machine Learning?

Rama de la **Inteligencia Artificial** cuyo objetivo es conseguir que las computadoras “aprendan” a base de ejemplos (**Learn by example)**

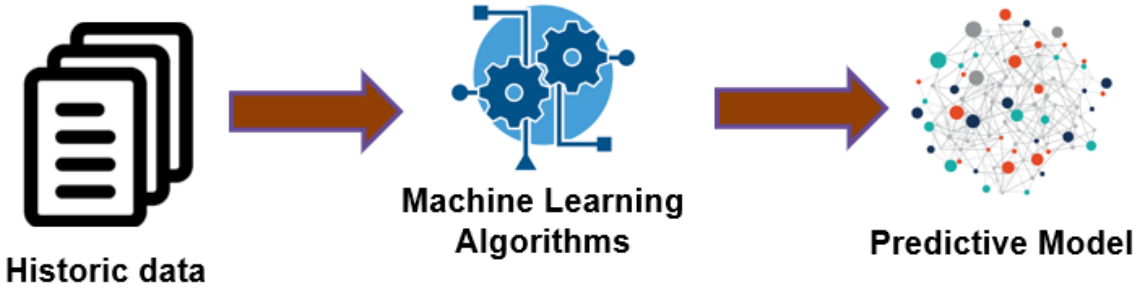


Entrenamiento

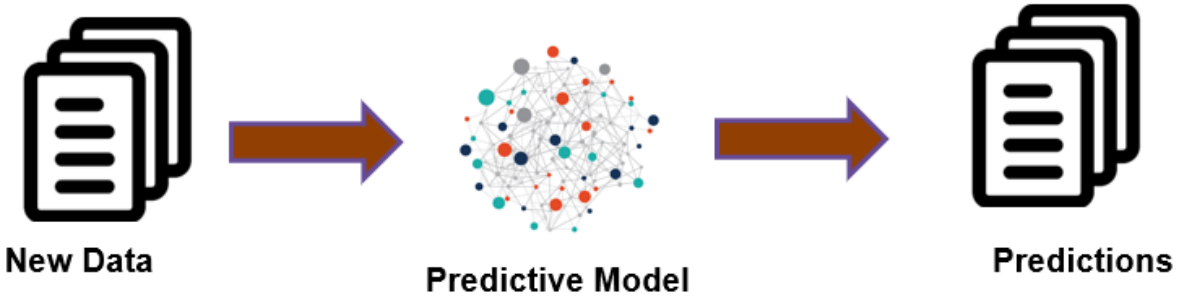
http://singaporebusinessintelligence.blogspot.com/2018/10/what-is-automated-machine-learning.html

¿Qué es Machine Learning?

Rama de la **Inteligencia Artificial** cuyo objetivo es conseguir que las computadoras “aprendan” a base de ejemplos (**Learn by example)**



Entrenamiento



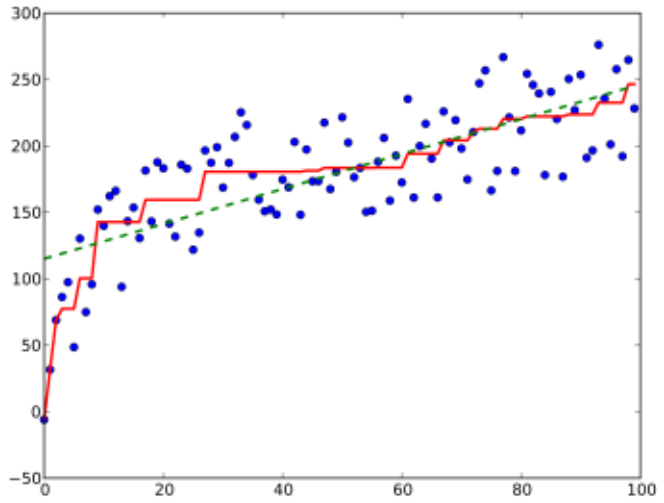
Inferencia

http://singaporebusinessintelligence.blogspot.com/2018/10/what-is-automated-machine-learning.html

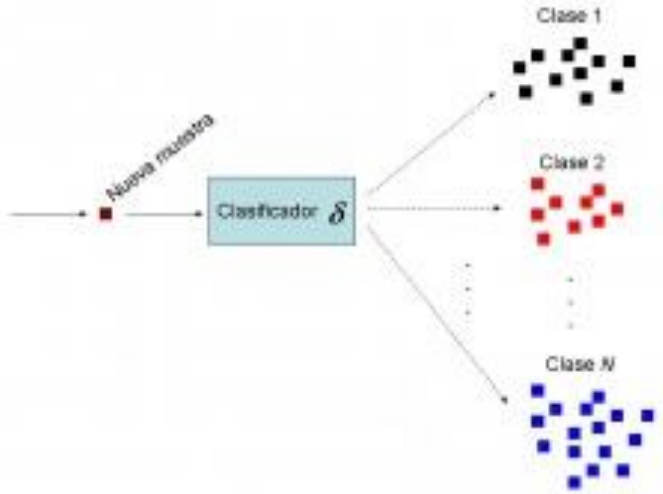
Tipos de Machine Learning

Según el objetivo a predecir

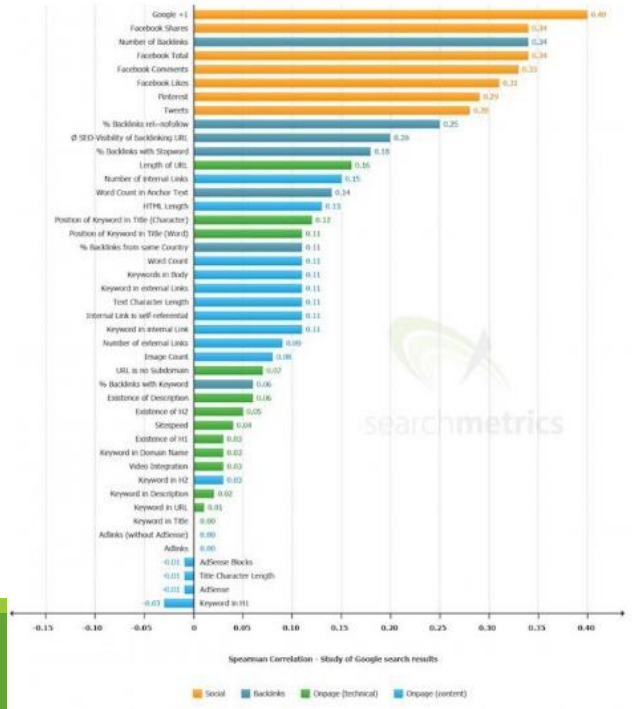
Regression



Classification



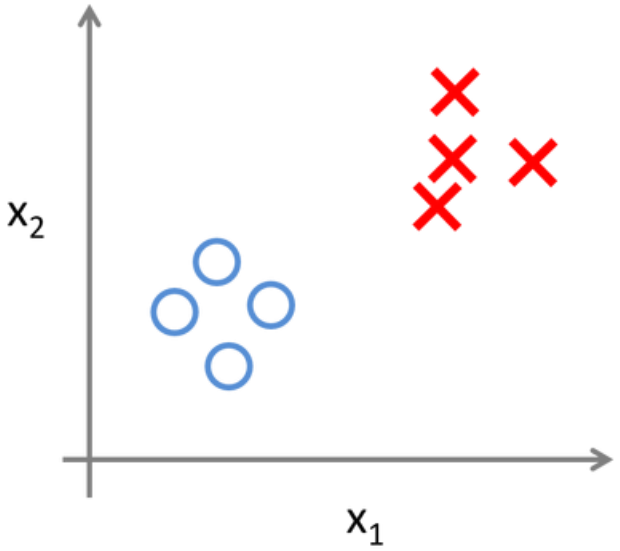
Ranking



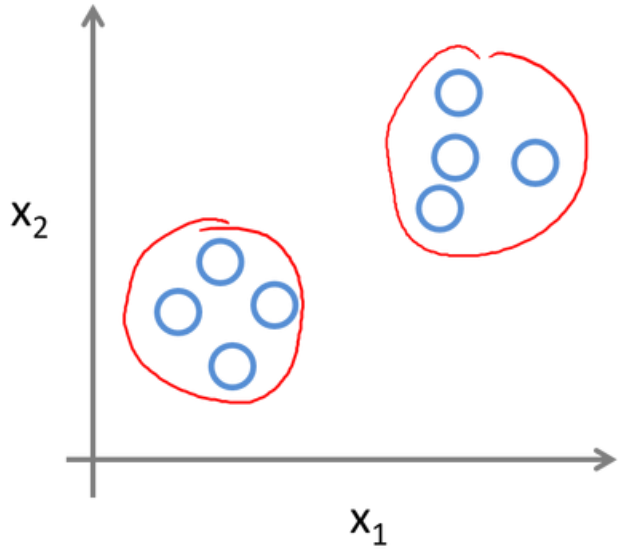
Tipos de Machine Learning

Según se usan los ejemplos

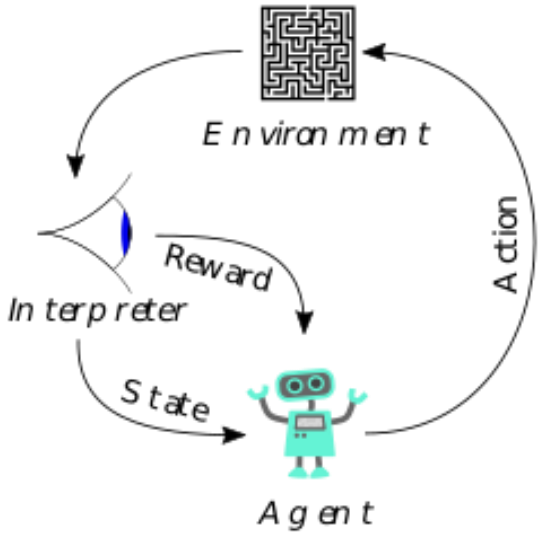
Supervised Learning



Unsupervised Learning



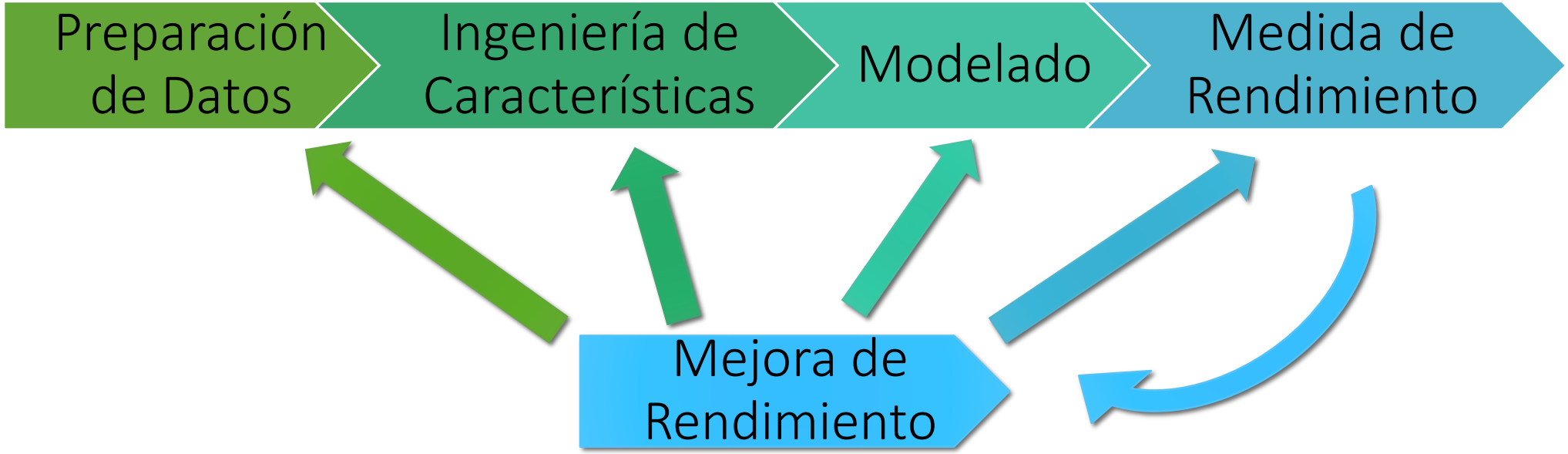
Reinforcement Learning



https://lakshaysuri.wordpress.com/2017/03/19/machine-learning-supervised-vs-unsupervised-learning/

Metodología por pasos

Hay 5 pasos básicos para construir un modelo ML:



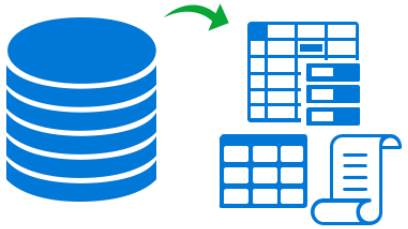
Aunque es un proceso altamente iterativo, que debe repetirse hasta encontrar resultados satisfactorios…

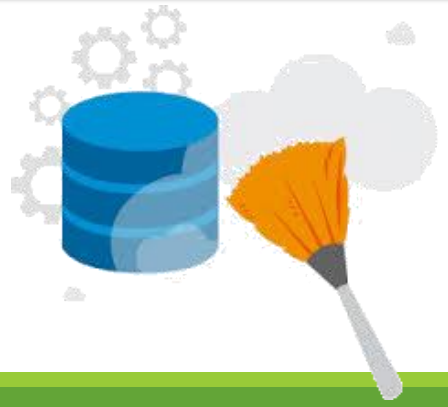
Paso 1. Preparación de Datos

Obtención

Limpieza

Formateado





Paso 2. Ingeniería de Características

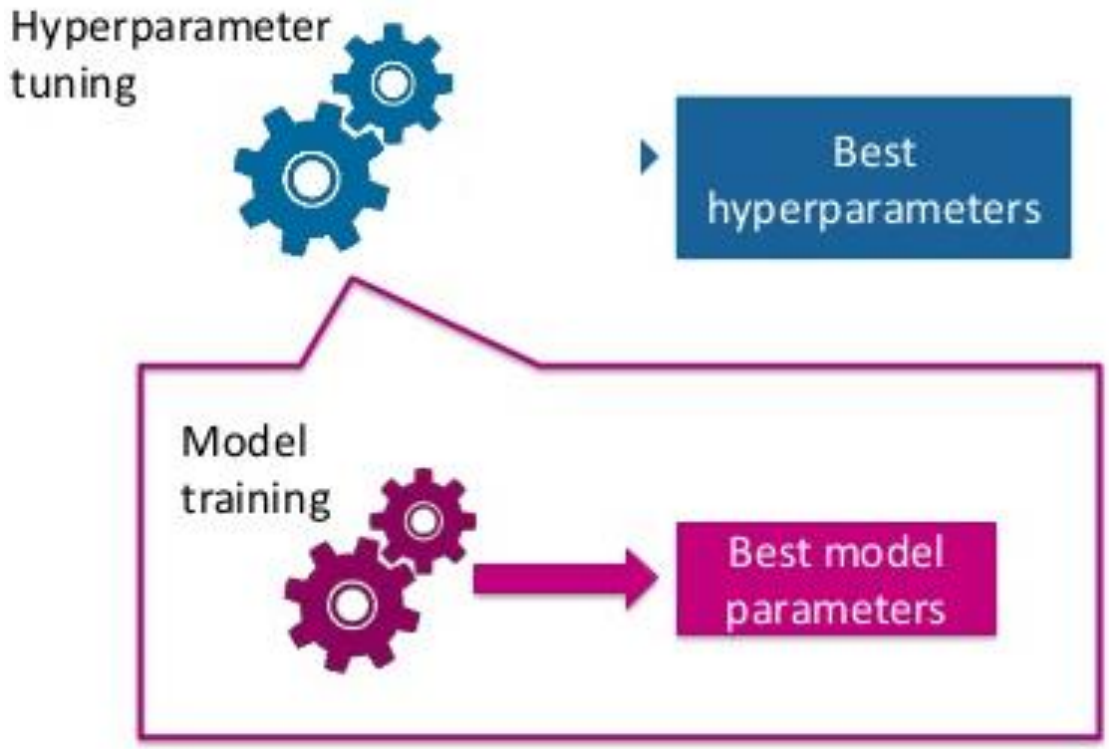
- Una **característica** (**feature**) es una propiedad individual medible del fenómeno/problema que está siendo analizado, y que será usado para formar predicciones.
  - imágenes: pixeles
  - coches autónomos: datos cámaras, sensores, GPS…
- El número de características se llama **dimensión**.

	iris	sepal length	sepal width	petal length	petal width
111	Iris-virginica	6.500	3.200	5.100	2.000
117	Iris-virginica	6.500	3.000	5.500	1.800
148	Iris-virginica	6.500	3.000	5.200	2.000
59	Iris-versicolor	6.600	2.900	4.600	1.300
76	Iris-versicolor	6.600	3.000	4.400	1.400
66	Iris-versicolor	6.700	3.100	4.400	1.400
78	Iris-versicolor	6.700	3.000	5.000	1.700
87	Iris-versicolor	6.700	3.100	4.700	1.500
109	Iris-virginica	6.700	2.500	5.800	1.800
125	Iris-virginica	6.700	3.300	5.700	2.100
141	Iris-virginica	6.700	3.100	5.600	2.400
145	Iris-virginica	6.700	3.300	5.700	2.500
146	Iris-virginica	6.700	3.000	5.200	2.300
77	Iris-versicolor	6.800	2.800	4.800	1.400
113	Iris-virginica	6.800	3.000	5.500	2.100
144	Iris-virginica	6.800	3.200	5.900	2.300
53	Iris-versicolor	6.900	3.100	4.900	1.500
121	Iris-virginica	6.900	3.200	5.700	2.300

Paso 3. Modelado

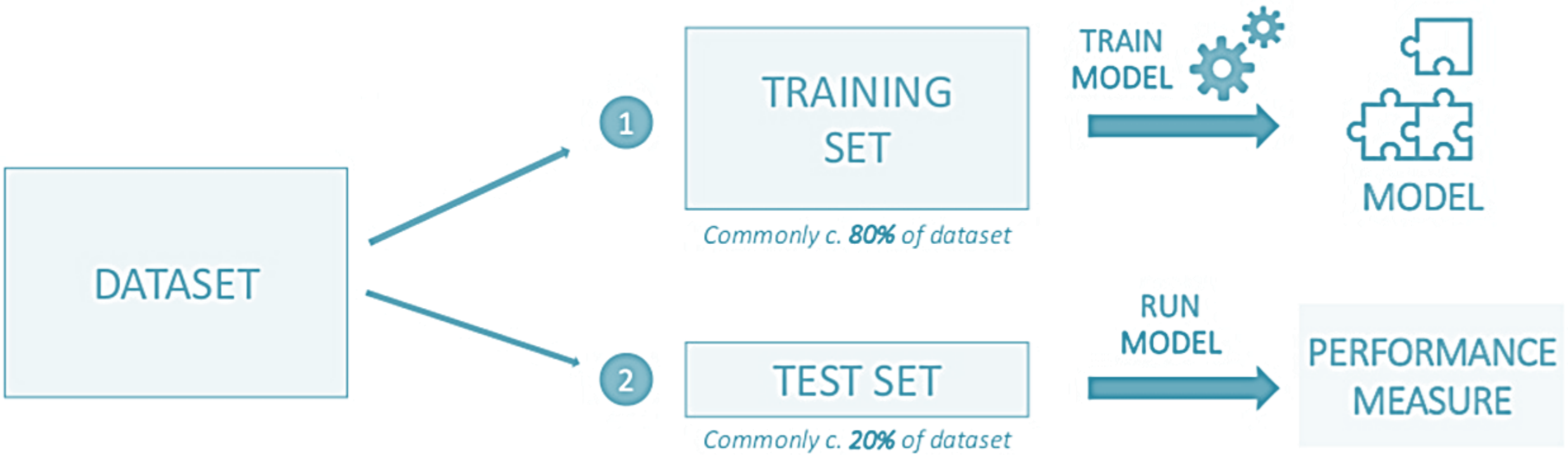
- Hay que elegir un tipo de modelo:
  - **Paramétrico**: El modelo resume los datos con un conjunto de parámetros (p.ej. Regresión lineal, **redes neuronales**, SVM, …)
  - **No paramétrico**: El modelo representa los datos sin parámetros, basado directamente en información de los ejemplos (p.ej. Árbol de decisión, KNN…)

- No confundir un parámetro del modelo con un **hiperparámetro**: parámetro que se emplea para ajustar el entrenamiento del modelo



https://towardsdatascience.com/understanding-hyperparameters-and-its-optimisation-techniques-f0debba07568

Paso 4. Medida del Rendimiento



Paso 4. Medida del Rendimiento

Por ejemplo, en clasificación binaria:

Predicción: (¿es gato?)

Imagen:

True Positive **(TP)**	**True** Negative **(TN)**	**False** Negative **(FN)**	**False** Positive **(FP)**

Images from the STL-10 dataset

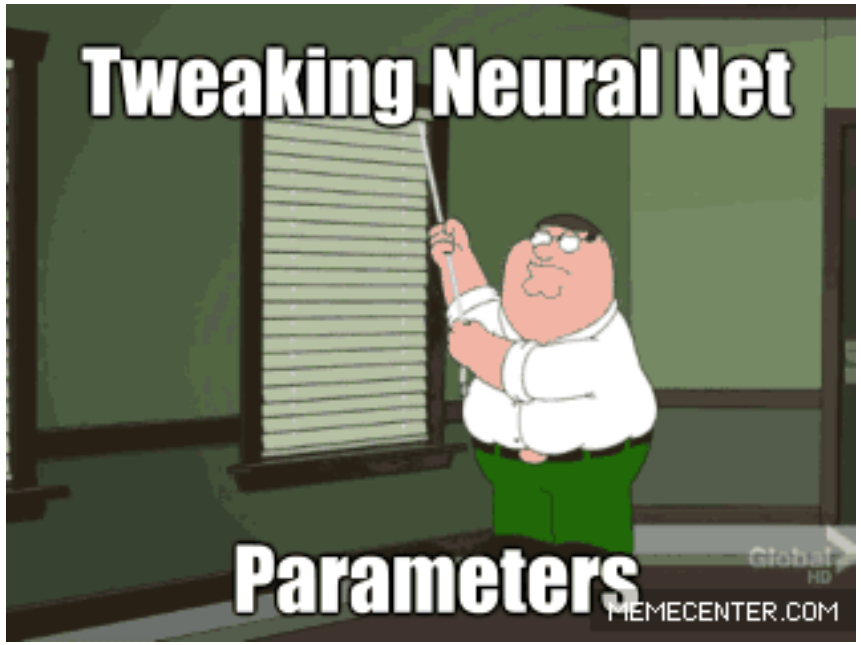
$$\text{Accuracy} = \frac{TP+TN}{TOTAL}$$

$$\text{Precission} = \frac{TP}{TP+FP}$$

$$\text{Recall} = \frac{TP}{TP+FN}$$

Paso 5. Mejora de Rendimiento

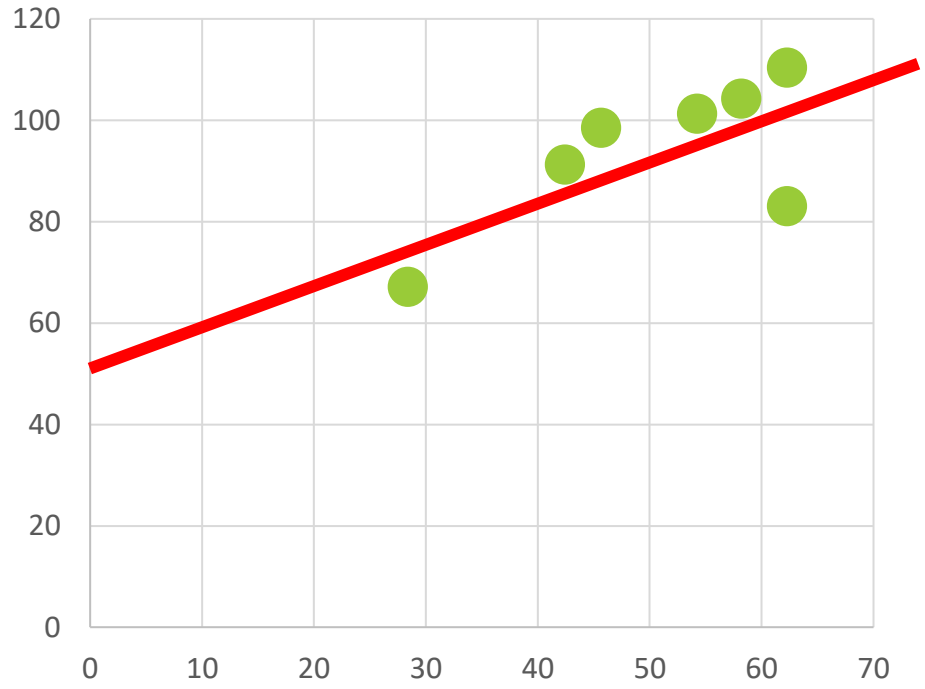
Al final, todo se reduce a un proceso de mejora continuado.



Índice

Regresión lineal

Tamaño (m^2)	Precio (€)
42,45	91241
54,25	101251
32,5	83051
62,3	110341
28,4	67124
45,69	98525
58,2	104251



X

y

$y \approx f(x) = Wx + b$ =0,8233x+52,096

Regresión lineal

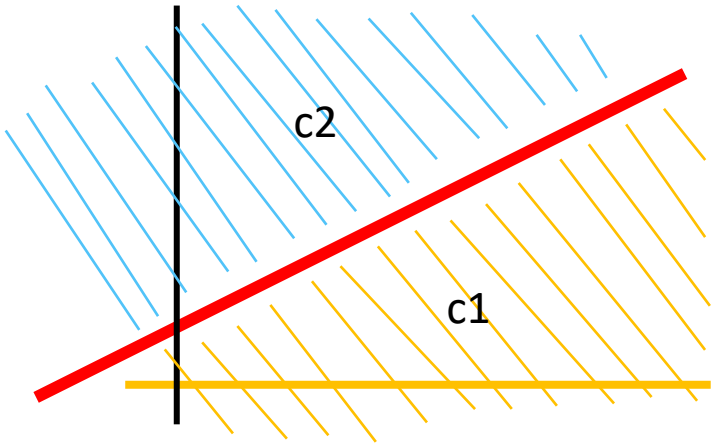
x_1	x_2	x_3	x_4	y
Tamaño (m^2)	Número habitaciones	Número plantas	Años construido	Precio (€)
42,45	2	1	10	91241
54,25	3	2	23	101251
32,5	2	1	5	83051
62,3	4	3	41	110341
28,4	1	1	24	67124

$$y \approx f(x) = W x^T = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + w_3 x_3 + w_4 x_4$$

$$f = 80 + 0{,}9x_1 + 0{,}5x_2 + 3x_3 - 2x_4$$

Perceptrón simple / Regresión logística

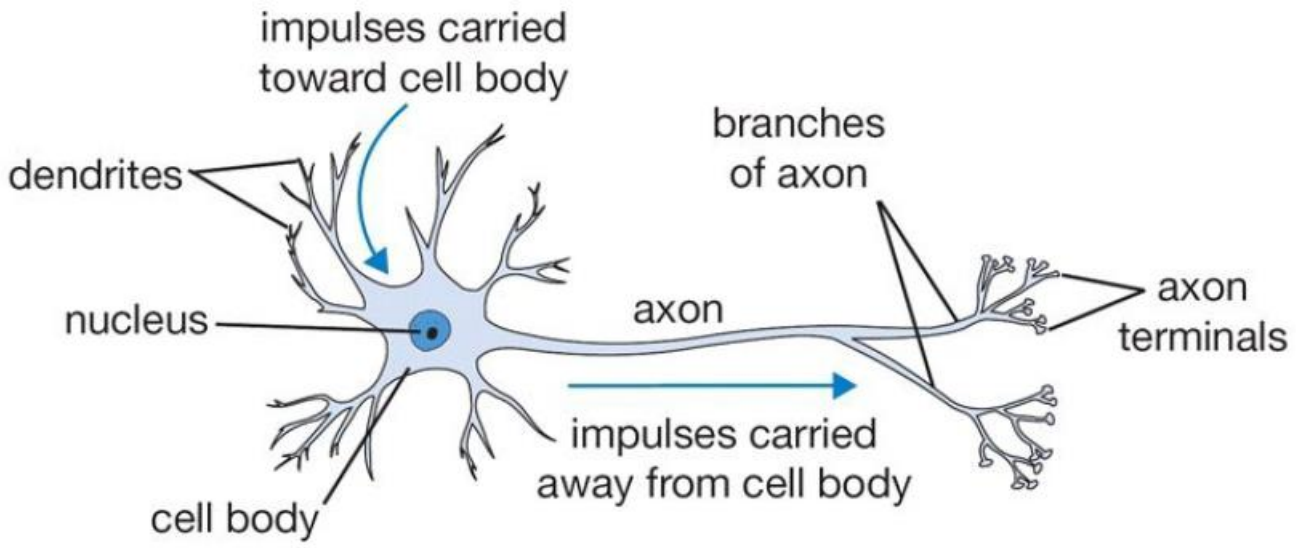
- *Frank Rosenblatt, ~1957*
- Clasificación **binaria** (dos clases, 0 y 1).



- $y \approx f(W x^T + b) = \begin{cases} 1, \text{ si } Wx^t + b > \text{valor\_umbral} \\ 0, \text{ en otro caso} \end{cases}$
- Otras funciones de activación: sigmoide (regresión logística), signo, …
- Si pensamos en 2 dimensiones, sería partir el plano mediante una recta.

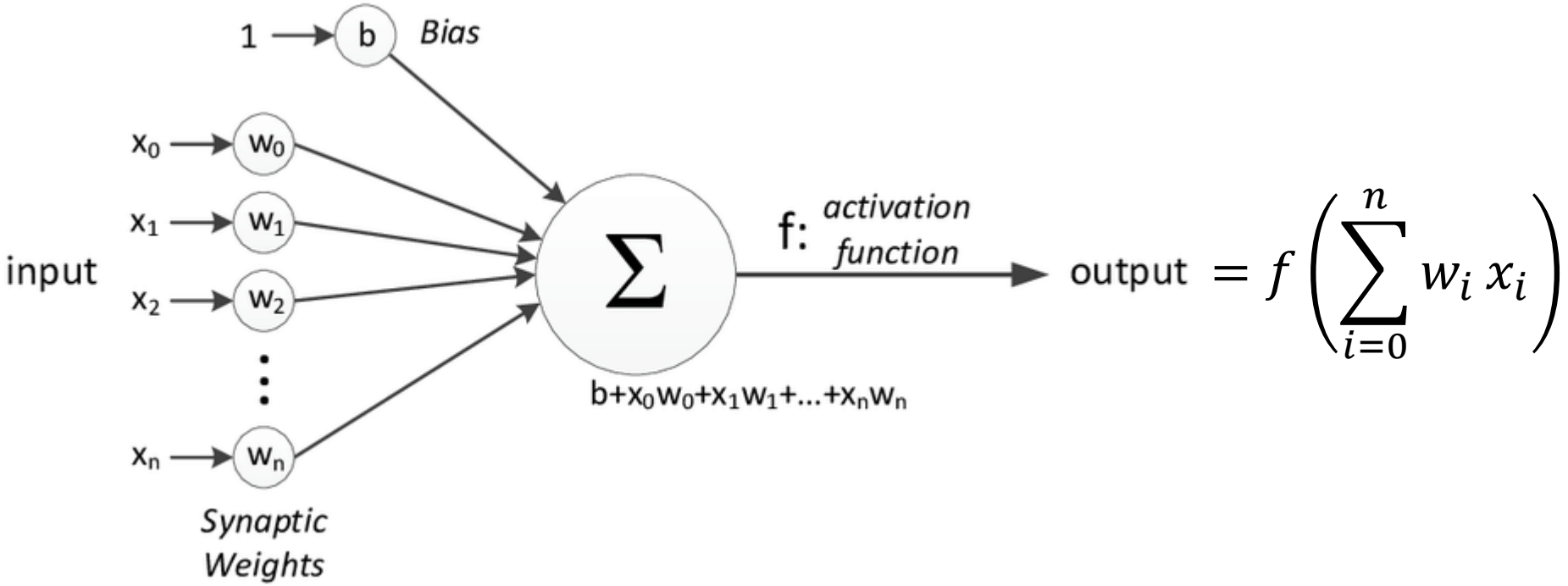
La neurona artificial

- **Neurona artificial**, 1943, McCulloch y Pitts



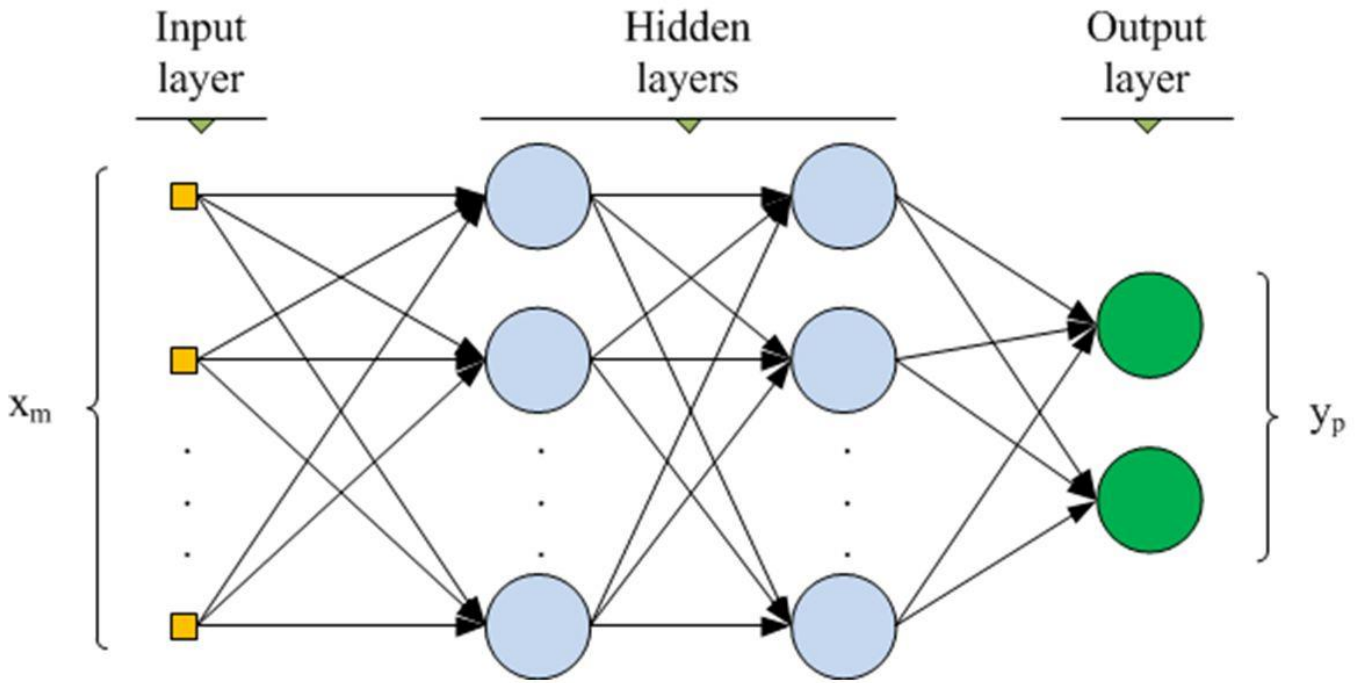
La neurona artificial

- **Neurona artificial**, 1943, McCulloch y Pitts



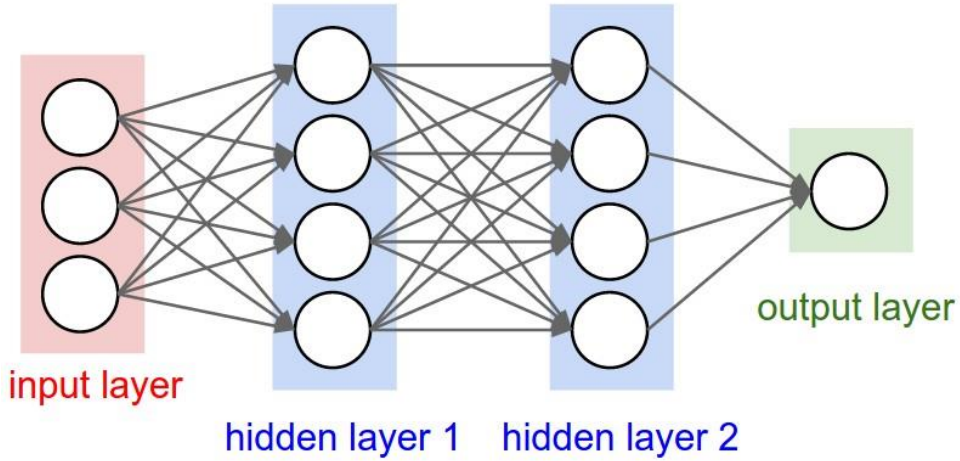
Redes multicapa

- Organizando **perceptrones simples en múltiples capas (MLP):**
  - Capa de **neuronas** de entrada
  - Capa/s de **neuronas** ocultas
  - Capa de **neuronas** de salida
- Cada neurona de una capa conectada con todas de la capa anterior (**fully connected**)
- Capa de **entrada** sin pesos

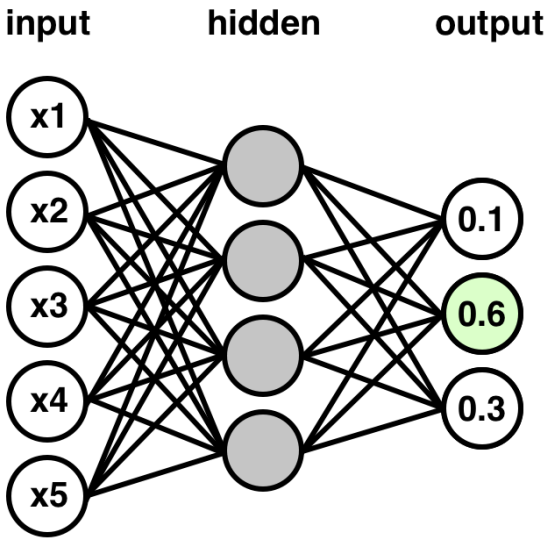


Redes multicapa: capa de salida

- Clasificación **binaria**:
  - K=2 clases
  - Variable de salida es y=0 o 1
  - *1 unidad de salida*

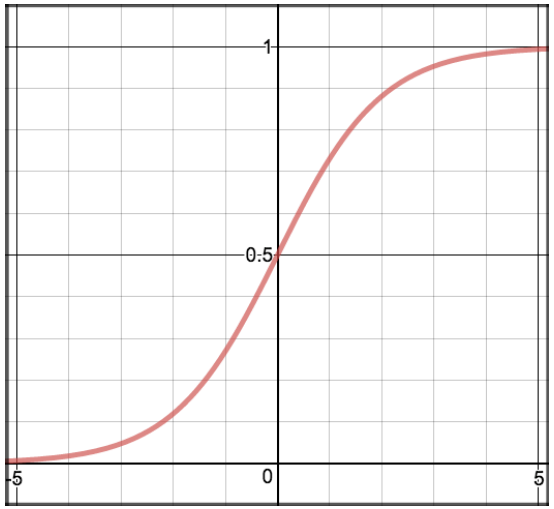


- Clasificación **multiclase**:
  - K≥3 clases
  - K variables de salida, , $y_1..y_k$
  - *K unidades de salida*
  - Se considera la más alta

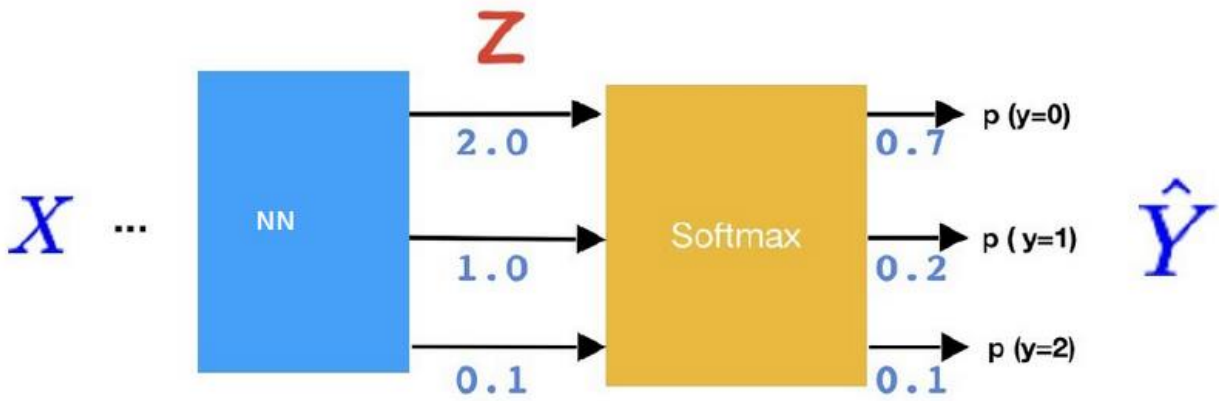


Funciones de activación: capa de salida

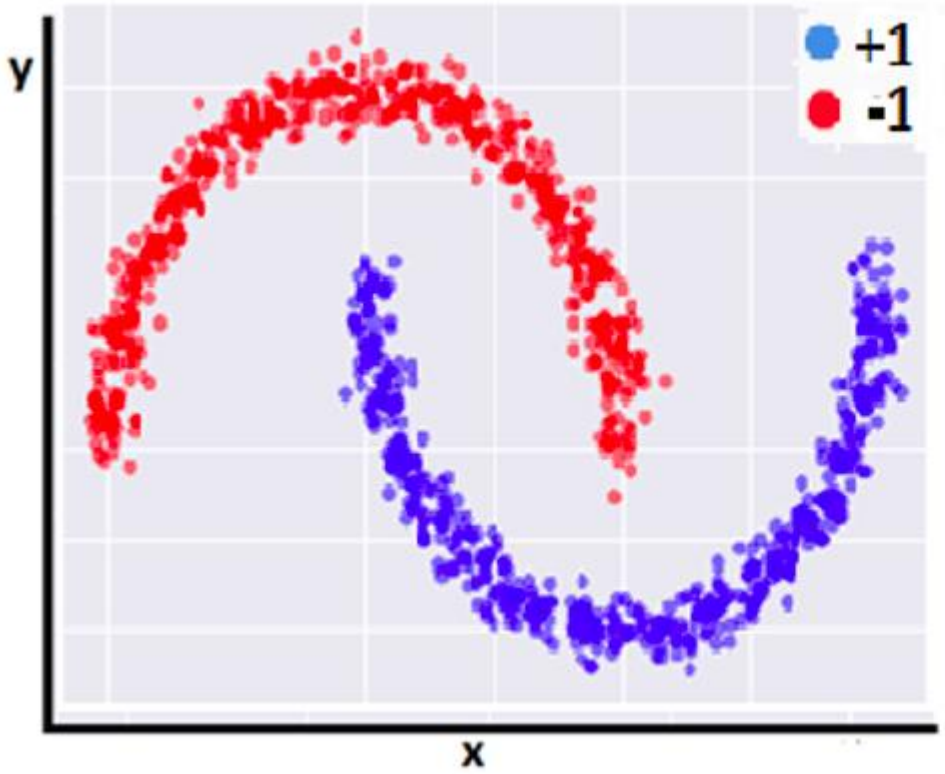
- **Clasificación binaria:**
  - La función **sigmoide o logística**: $\boldsymbol{\sigma(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}}$

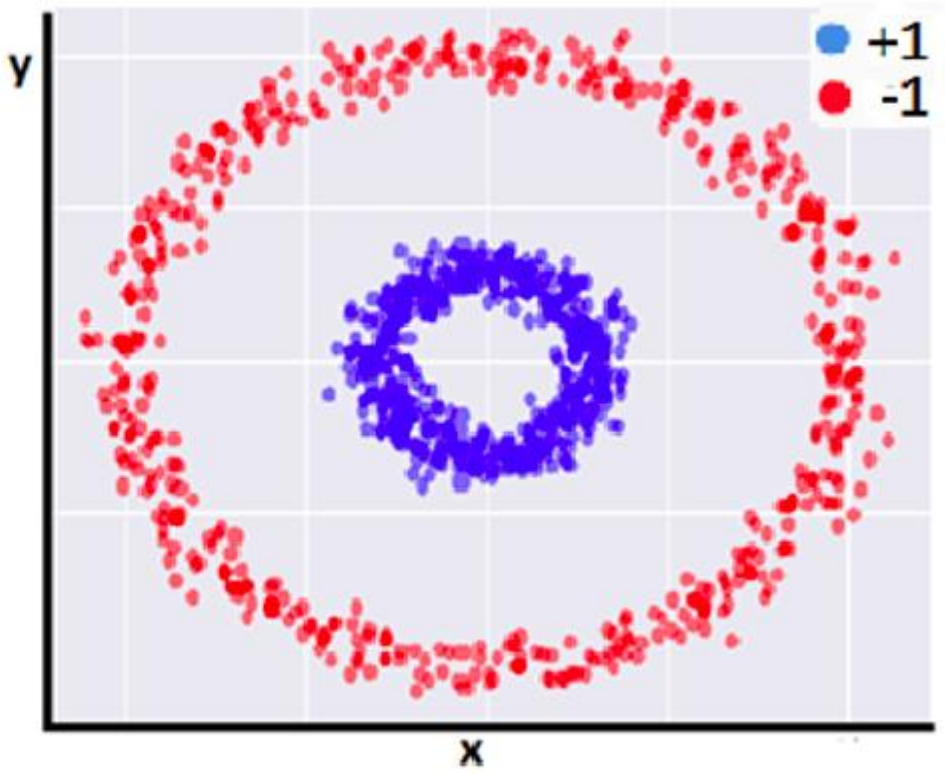


- **Clasificación multiclase:**
  - La función **softmax**: $\boldsymbol{\sigma(z)_j = \frac{e^{z_j}}{\sum_{k=1}^{N} e^{z_k}}}$



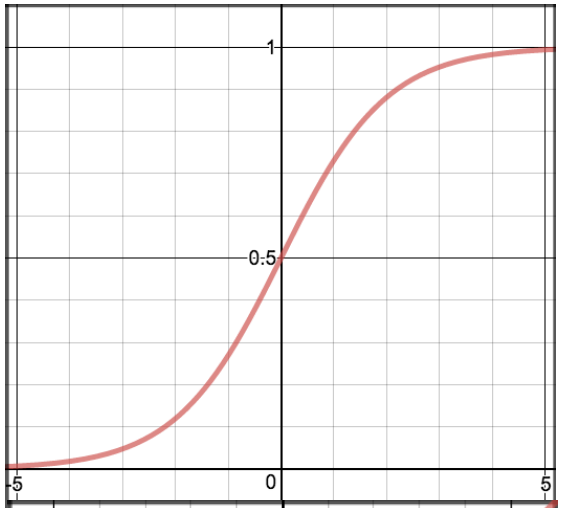
Funciones de activación: No linealidad



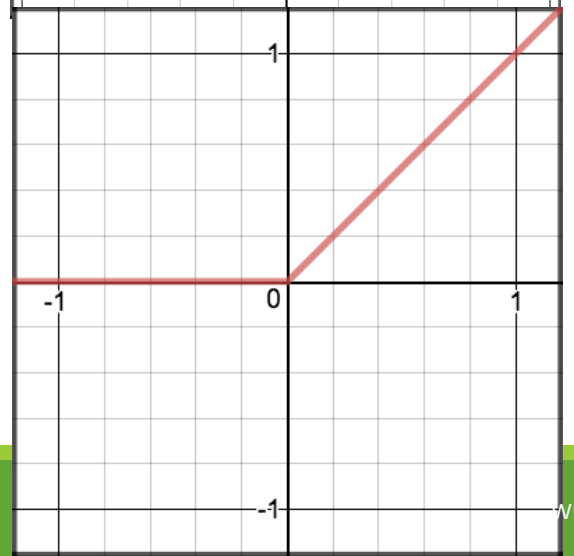


Funciones de activación: capas ocultas

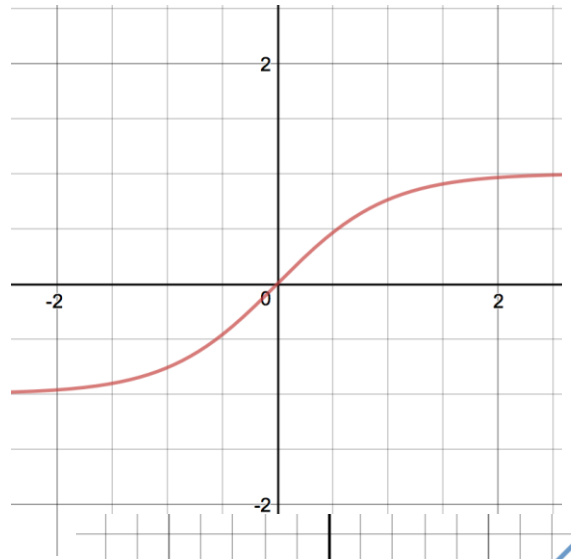
sigmoide: $\boldsymbol{\sigma(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}}$



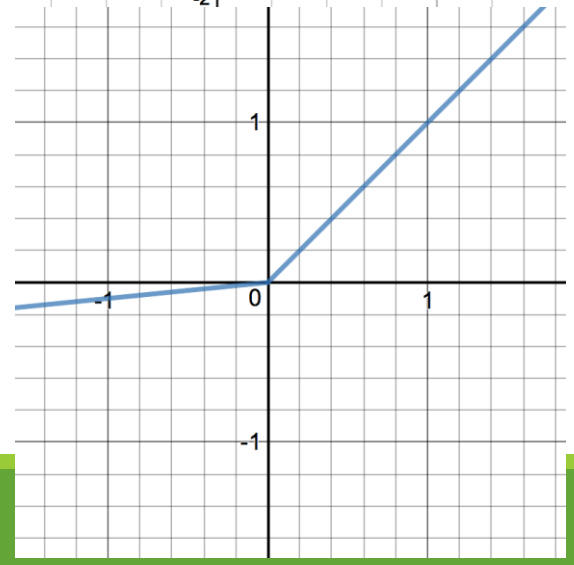
$\boldsymbol{ReLU(x) = max(0, x)}$



$\boldsymbol{tanh(x) = \frac{e^{x}-e^{-x}}{e^{x}+e^{-x}}}$



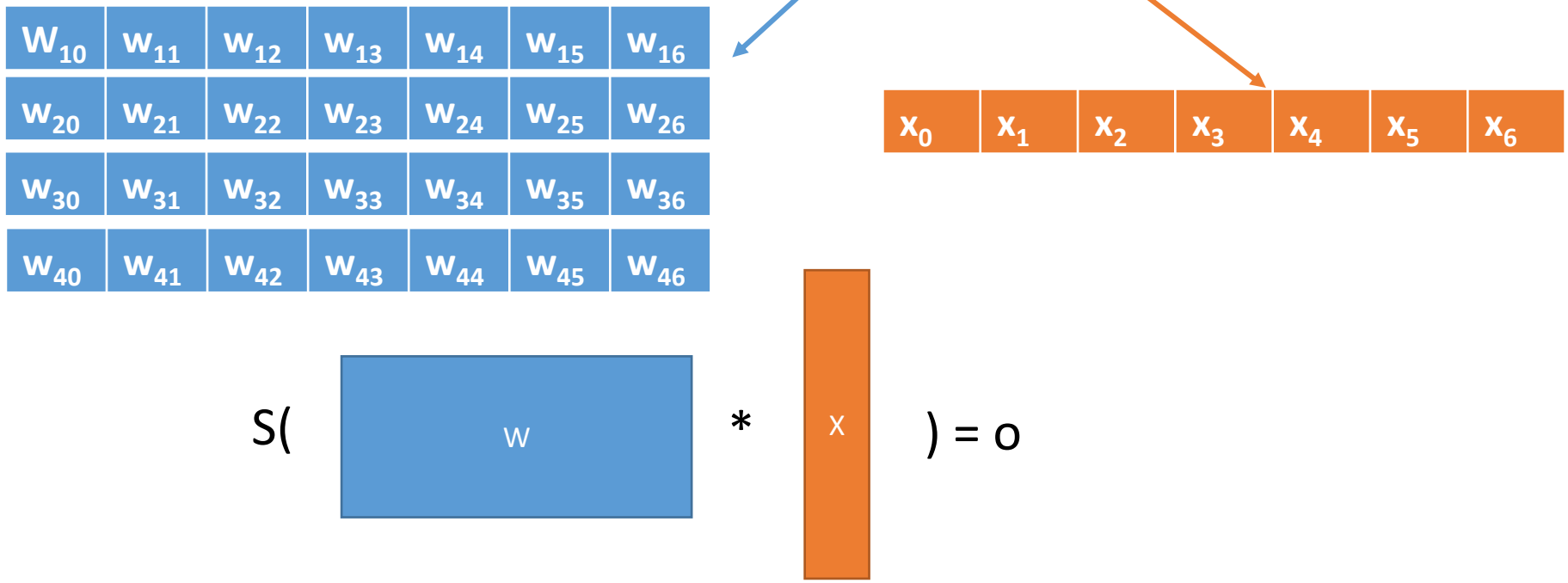
$$\boldsymbol{LeakyReLU(x) = \begin{cases} x, x > 0 \\ \alpha x, x \leq 0 \end{cases}}$$



¿Cómo se implementa?

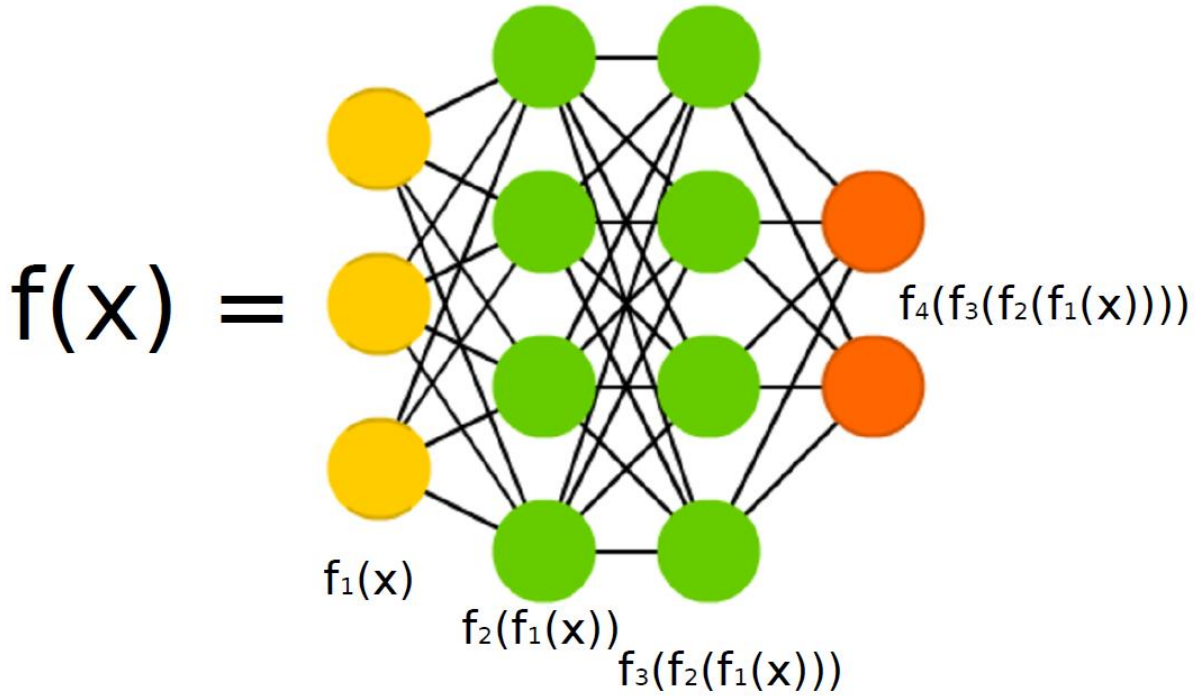
- Una capa oculta (k neuronas)

$$o = f\left(\sum_{i=0}^{n}\sum_{j=0}^{k_h} w_{ij}\, x_i\right)$$



Interpretación de una red multicapa

También se les denomina redes **feed-forward**, diferentes **funciones** que **componen** a **f** hasta dar la salida **o**:



Índice

Función de coste

- Necesitaremos ajustar los parámetros del modelo (pesos W) para que se comporte mejor con los datos.
- Por tanto, necesitamos **cuantificar** cuánto de "***buena***" es nuestra red para un ejemplo.
- Definiremos:
  - La **función de pérdida (loss):** para un ejemplo
  - La **función de coste** (**cost**): para un conjunto de ejemplos (dataset, batch)
  - La **función objetivo** a minimizar. La función de coste es una función objetivo.
- El nombre de estas funciones se suelen confundir

Función de coste

- En **regresión** lineal es **MSE** (error cuadrático medio):

$$J(\mathrm{W}) = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\left(f_{\mathrm{W}}(x^i) - y^i\right)^2$$

- En regresión logística para **clasificación binaria (binary cross entropy):**

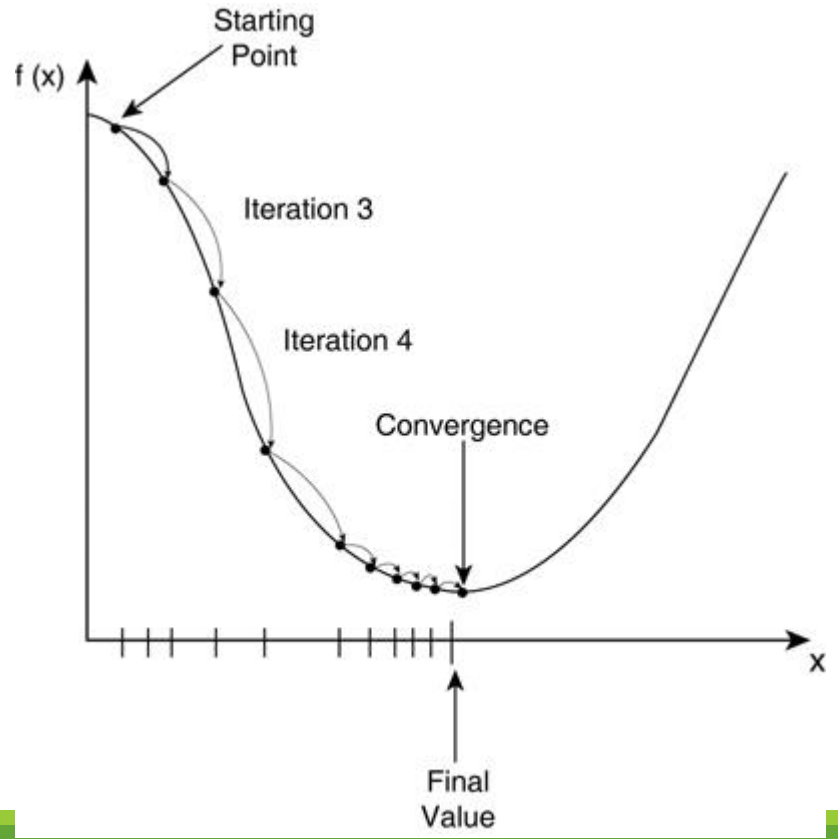
$$J(\mathrm{W}) = \frac{1}{m}\left(\sum_{i=1}^{m} y^i \log(f_{\mathrm{W}}(x^i)) + (1 - y^i)\log(1 - f_{\mathrm{W}}(x^i))\right)$$

- En regresión logística para **clasificación multiclase (cross entropy):**

$$J(\mathrm{W}) = \frac{1}{m}\left(\sum_{i=1}^{m}\sum_{k=1}^{K} y_k^i \log\left(f_{\mathrm{W}}^k(x^i)\right) + (1 - y_k^i)\log(1 - f_{\mathrm{W}}^k(x^i))\right)$$

Descenso por gradiente

Buscar el mínimo posible de la función de coste, es decir $\min_{W} J(W)$



Descenso por gradiente

Buscar el mínimo posible de la función de coste, es decir $\min_{W} J(W)$

Descenso por gradiente

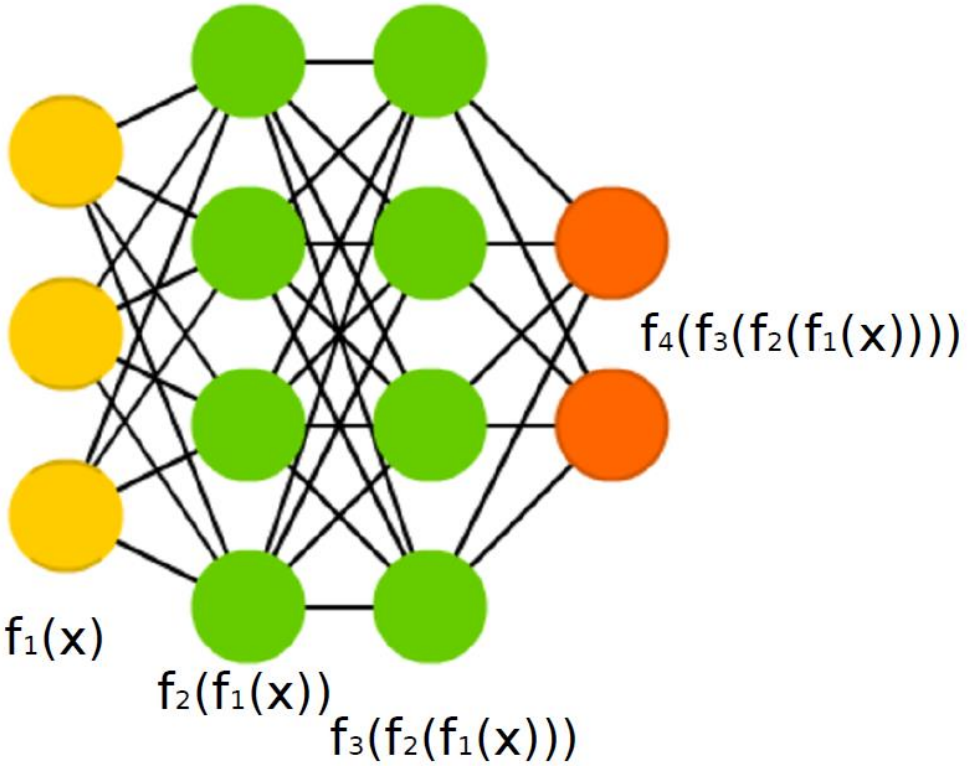
- Seguir el **gradiente** en negativo (la mayor pendiente)
- Es decir: calculamos el coste, su derivada, y actualizamos cada parámetro w_j:

$$w_j = w_j - \boldsymbol{\alpha} \frac{d}{dw_j} J(W)$$

$$w_j = w_j - \boldsymbol{\alpha} \sum_{i=1}^{m} \left(f_W(x^i) - y^i\right) f'_W(x^i)\, x_j^i$$

Matemáticamente: regla de la cadena

$f(x) =$



$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial f_4}{\partial x}$$

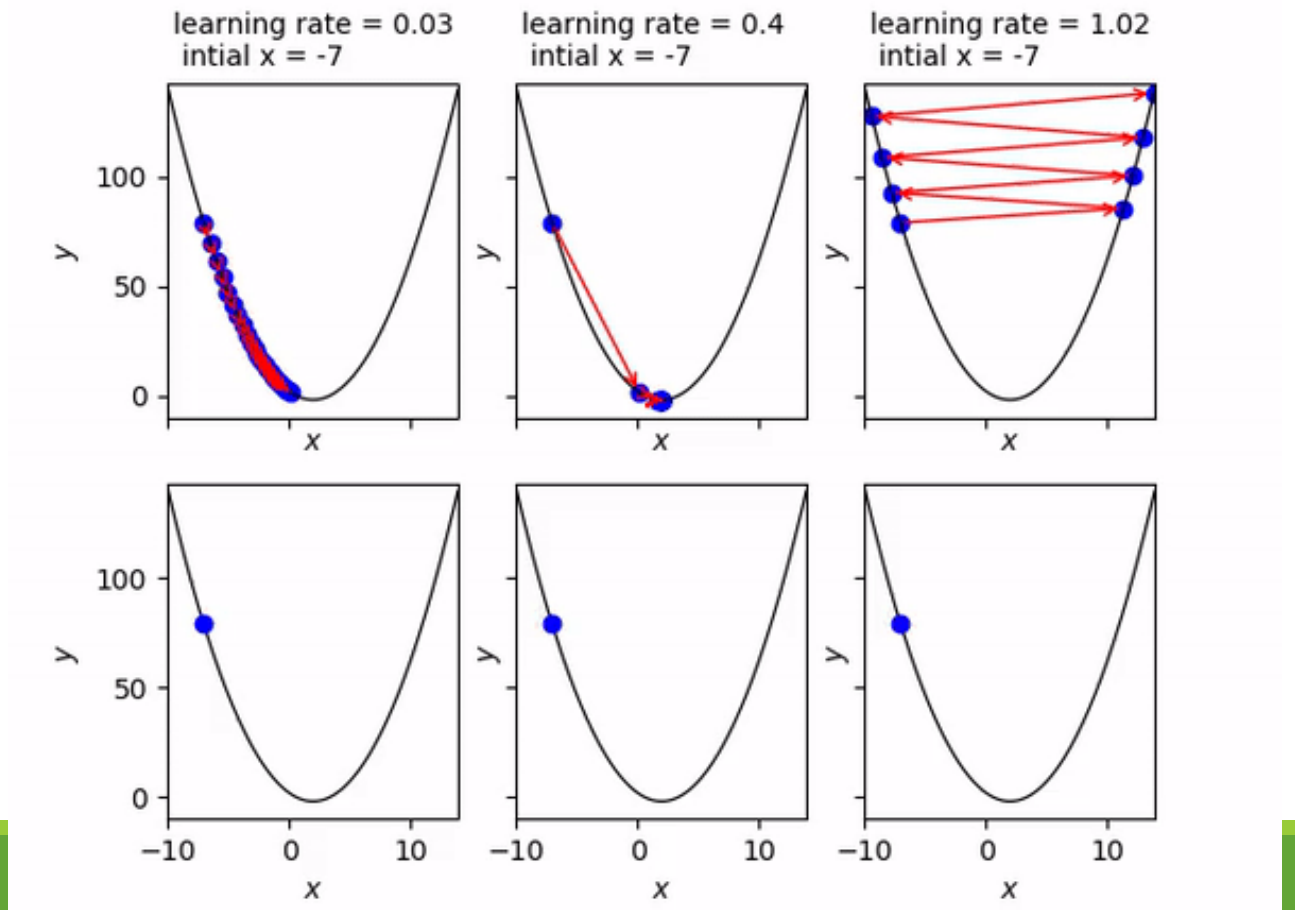
$$\frac{\partial f_4}{\partial x} = \frac{\partial f_4}{\partial f_3}\frac{\partial f_3}{\partial x}$$

$$\frac{\partial f_4}{\partial x} = \frac{\partial f_4}{\partial f_3}\frac{\partial f_3}{\partial f_2}\frac{\partial f_2}{\partial x}$$

$$\frac{\partial f_4}{\partial x} = \frac{\partial f_4}{\partial f_3}\frac{\partial f_3}{\partial f_2}\frac{\partial f_2}{\partial f_1}\frac{\partial f_1}{\partial x}$$

Descenso por gradiente

- α es el factor de aprendizaje (un *hiperparámetro*). Hay que ajustarlo bien:

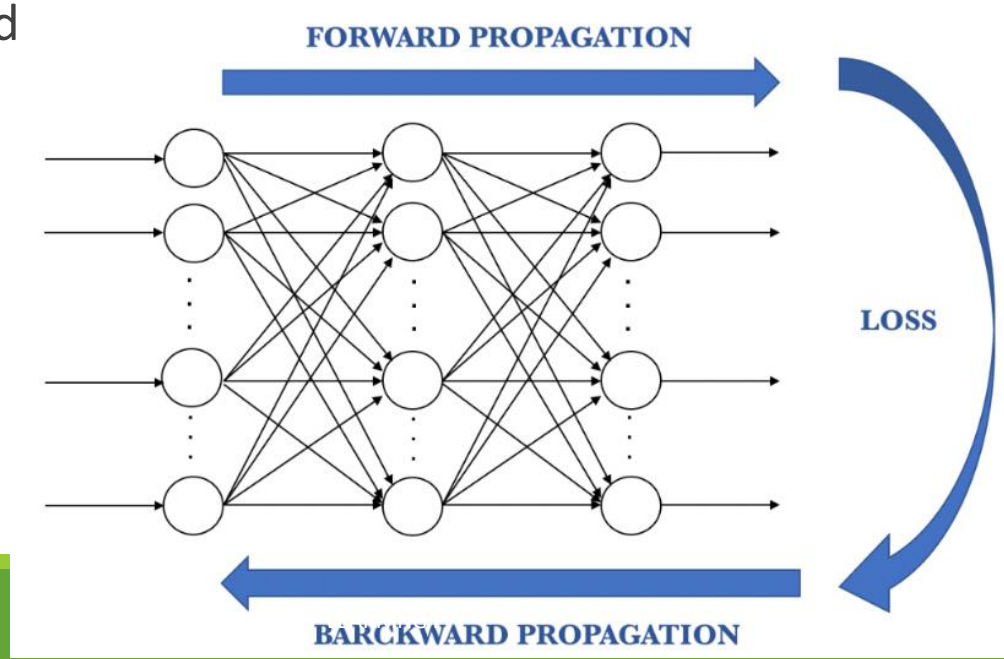


https://medium.com/@b.terryjack/deep-learning-neuroevolution-extreme-learning-machines-6b448860a72a

Retropropagación

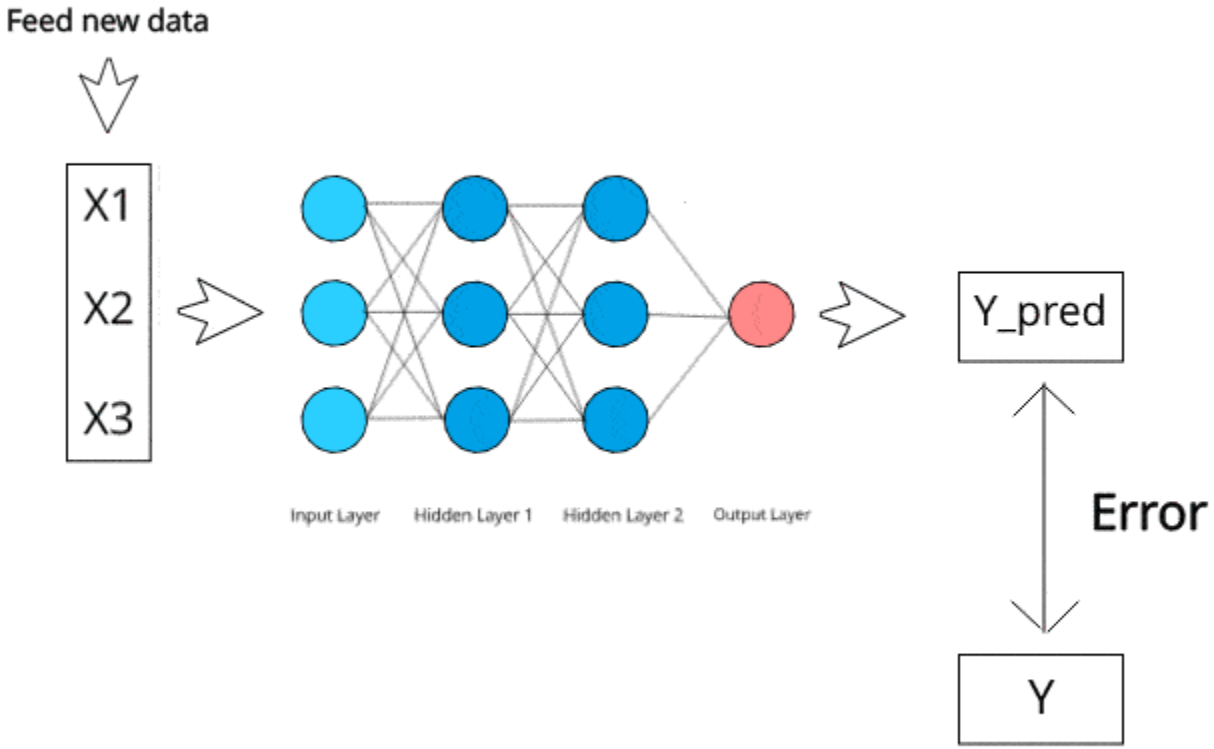
https://www.kdnuggets.com/2019/10/introduction-artificial-neural-networks.html

- Para entrenar una red, hacemos una iteración (**época**) sobre el dataset:
  1. Pasarle una serie de ejemplos y calcular sus salidas
  2. Calcular el valor de la función de coste
  3. Calcular los errores y los gradientes en la capa de salida
  4. Propagar los errores y gradientes hacia atrás (la capa de entrada)
  5. Actualizar los pesos de la red



Retropropagación

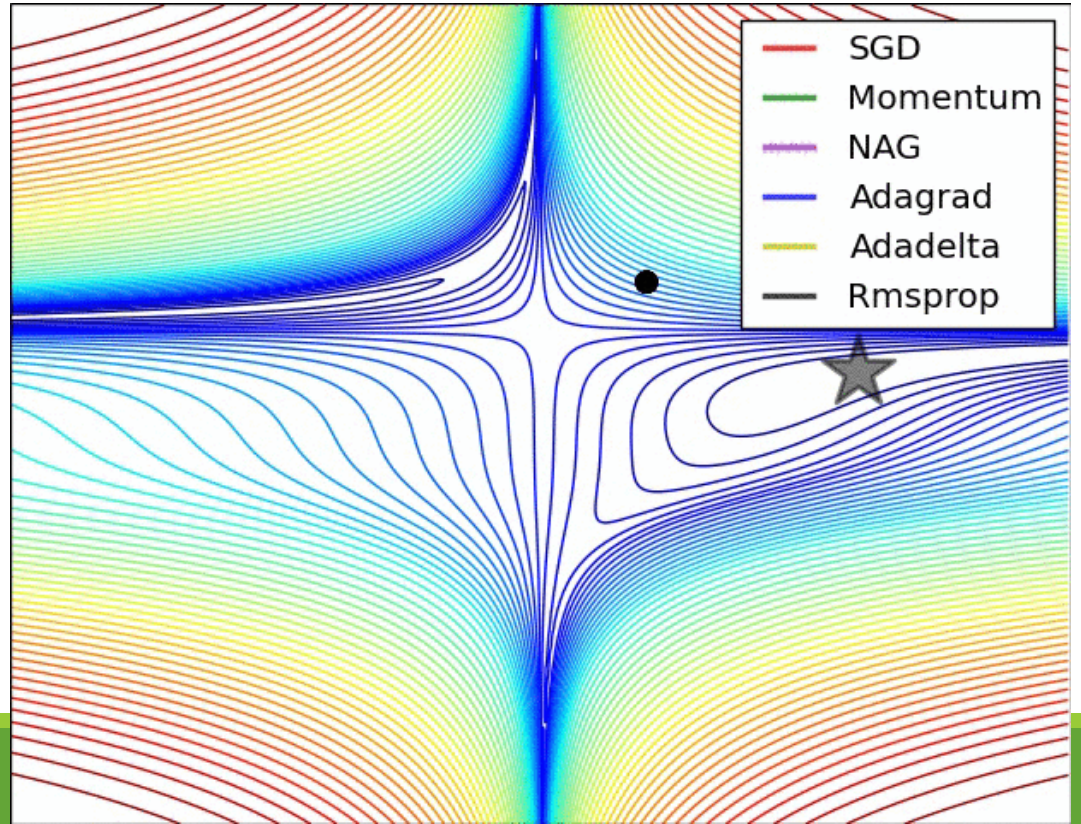
https://www.kdnuggets.com/2019/10/introduction-artificial-neural-networks.html



Descenso por gradiente: métodos

http://cs231n.github.io/neural-networks-3/

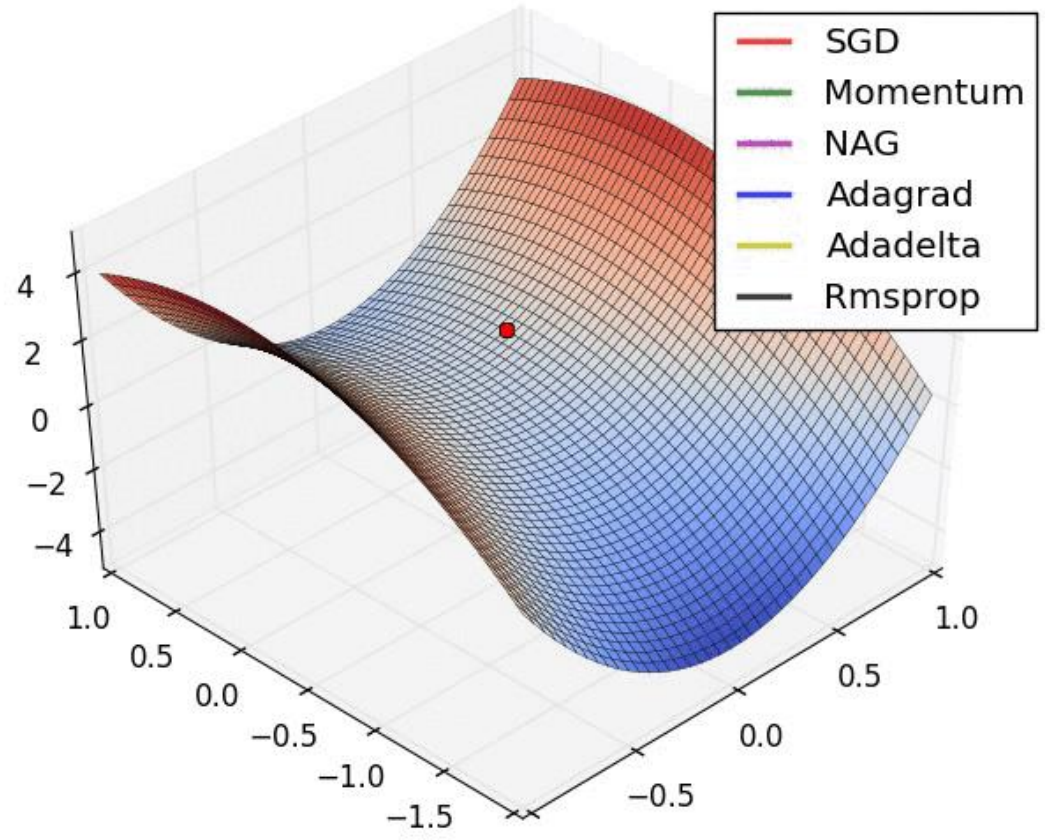
- Métodos varían según actualización de parámetros
- Uso de mini-batch (**batch**)
- **Adam**



Descenso por gradiente: métodos

http://cs231n.github.io/neural-networks-3/

- Métodos varían según actualización de parámetros
- Uso de mini-batch (**batch**)
- **Adam**



Demo

Comprobemos la potencia representacional de una red con https://playground.tensorflow.org

Índice

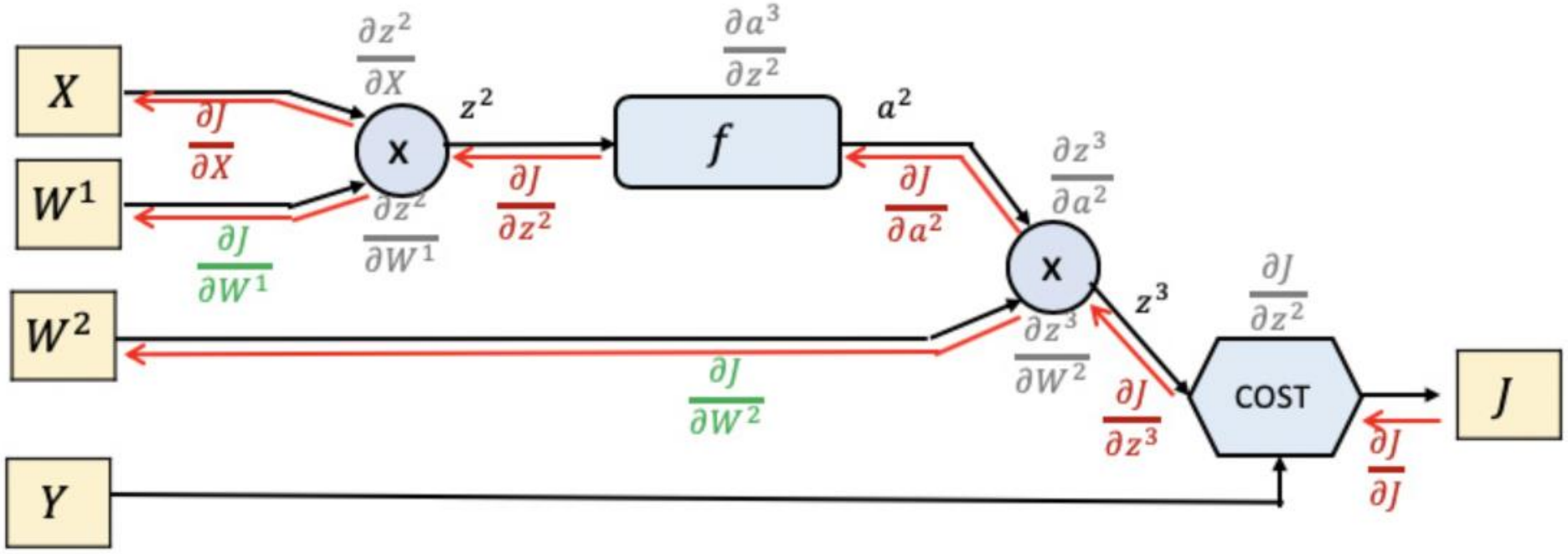
Niveles de programación

- **Programación a nivel 0:**
  - Podemos elegir el lenguaje de nuestra elección, una buena tarde e implementar los conceptos.
  - ¿Qué pasa si quiero cambiar la arquitectura de la red? Si no lo he hecho bien, tendría que re-programarla desde cero, sobre todo para ajustar la propagación del gradiente.

```
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
from scipy.special import expit

def sigmoid(eval):
    return expit(eval)


def Neural_Training(Y01, Labels01 , eta , Epochs):

    d,samplenumb = Y01.shape

    # Random [-1,1] init from Haykin
    WIH = 2*np.mat(np.random.rand(2*d,d)) -1.0
    WHO = 2*np.mat(np.random.rand(1,2*d)) -1.0
    difft =  Labels01.astype(np.float64)

    for i in xrange(1,Epochs):

        #Get the input to the output layer
        y_j_temp = sigmoid(WIH*Y01)
        netk = WHO*y_j_temp
        zk = sigmoid(netk)

        # Creating Delta Wk
        diff1 = difft - zk
        tDeltaWk = eta*np.multiply(diff1,np.multiply(sigmoid(netk),1.0-sigmoid(netk)))
        tDeltaWk = np.tile(tDeltaWk,(2*d,1))
        DeltaWk = np.multiply( y_j_temp,tDeltaWk)
        DeltaWk = np.transpose(np.sum(DeltaWk,1))

        # New Weights
        WHO = WHO + DeltaWk

        #Creating Delta Wj
        dnetj = np.multiply(y_j_temp,1.0-y_j_temp)
        tprodsumk = np.multiply(np.transpose(DeltaWk),np.transpose(WHO))
        tprodsumk = np.tile(tprodsumk, (1,samplenumb) )
        tprodsumk = eta*np.multiply(tprodsumk,dnetj)
        DeltaWj = tprodsumk * np.transpose(Y01)

        # New Weights
        WIH = WIH + DeltaWj


    return WIH, WHO

# Number of samples
N= 60000

#Number of Epochs
Epochs = 20

#Learning Rate
eta = 0.001

# opening images for [r]eading as [b]inary
in_file = open("train-images.idx3-ubyte", "rb")
in_file.read(16)
Data = in_file.read()
in_file.close()

# Transform the data stream
X = np.fromstring(Data, dtype=np.uint8)
X = X.astype(np.float64)
X = np.mat(X)
```

Niveles de programación

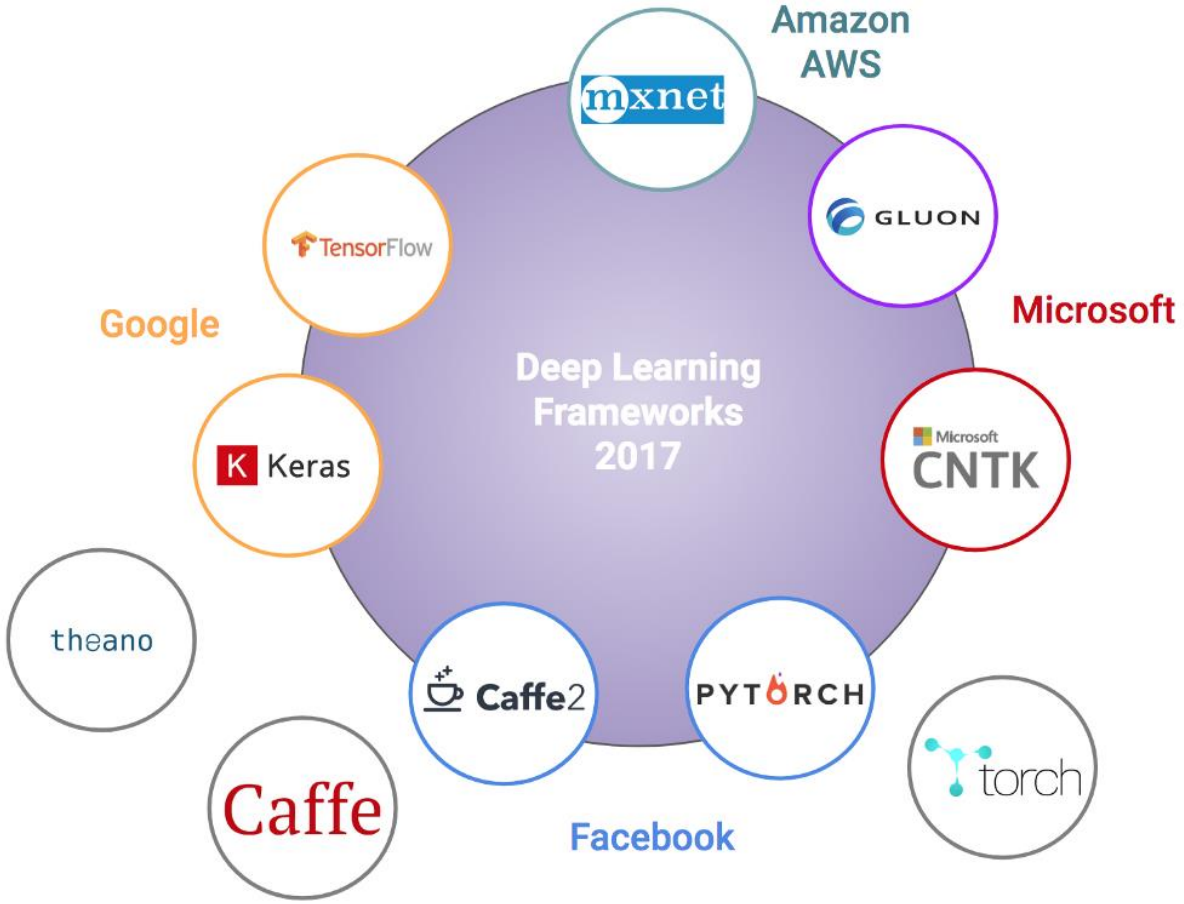
- **Programación a nivel 1**:
  - APIs con bloques reutilizables y **diferenciación automática**.
  - **TensorFlow y PyTorch**



Niveles de programación

- **Programación a nivel 2**:
  - APIs que proveen una capa de abstracción sobre los detalles de modelo.
  - **Encajamos bloques** que representan partes de la arquitectura que queremos montar.
  - **Keras, Caffe, Fast.ai**

Ecosistema actual



https://towardsdatascience.com/battle-of-the-deep-learning-frameworks-part-i-cff0e3841750

Índice

Bibliografía recomendada

- Libro "**Deep Learning with Python**", de F. Chollet (y su versión para **R**)
  - Para comenzar a trabajar sin formulación matemática y mucho código Python.
- Libro "**Hands-On Machine Learning with Scikit-Learn and TensorFlow**", de A. Géron
  - Buen libro con muchos conceptos, algo de formulación básica y Código.
- Libro "**Dive into Deep Learning**", de A. Zhang et al.
  - Es nuevo y tiene buena pinta, con mucho código y además formulación matemática.
- Libro "**Deep Learning**", de I. Goodfellow et al.
  - La biblia del Deep Learning, con toda la formulación matemática necesaria.
- Hay libros especializados, como "Deep Learning for Life Sciences", …
- Canales de **Youtube**: dotCSV, Two Minute Papers