



POLSKA AKADEMIA NAUK
INSTYTUT BIOCYBERNETYKI I INŻYNIERII BIOMEDYCZNEJ

Praca doktorska

Proces gojenia ścięgna Achillesa oceniany przez fuzję danych z
wykorzystaniem głębokich sieci neuronowych

Autor: mgr inż. Norbert Kapiński

Kierujący pracą: dr hab. inż. Antoni Grzanka

Promotor pomocniczy: dr Jakub Zieliński

Warszawa, wrzesień 2018

Streszczenie

The abstract will go here....

W tym miejscu można umieścić abstrakt pracy. W przeciwnym wypadku należy usunąć/zakomentować niniejszy fragment kodu.

Spis treści

1	Wstęp	1
2	Cel i przebieg pracy	2
3	Monitorowanie procesu gojenia ścięgna Achillesa	3
3.1	Ścięgno Achillesa	3
3.1.1	Anatomia	4
3.1.2	Biomechanika	4
3.1.3	Urazy i czynniki im sprzyjające	5
3.1.4	Leczenie, fazy gojenia i rehabilitacja	5
3.2	Zastosowanie rezonansu magnetycznego	5
3.3	Zastosowanie ultrasonografii	5
3.4	Zastosowanie badań biomechanicznych	5
3.5	Inne metody	5
4	Konwolucyjne sieci neuronowe	6
4.1	Zarys historyczny	9
4.2	Szkolenie głębokich sieci neuronowych	12
4.2.1	Problem nadmiernego dopasowania	17
4.2.2	Problem redukcji wymiarowości	19
4.3	Przykłady współczesnych topologii	23

4.3.1	AlexNet	25
4.3.2	GoogLeNet	28
4.3.3	ResNet	30
4.3.4	Złożenia	34
4.4	Zastosowania w medycynie	35
5	Nowa metoda oceny procesu gojenia ścięgna Achillesa	40
5.1	Metodyka	40
5.2	Rozróżnienie ścięgna zdrowego i po zerwaniu	40
5.3	Obliczanie krzywych gojenia	40
5.3.1	Topologia sieci	40
5.3.2	Redukcja wymiarowości	40
5.3.3	Miara wygojenia	40
6	Wyniki i walidacja	41
6.1	Ocena procesu gojenia z użyciem nowej metody	41
6.2	Porównanie z wynikami z rezonansu magnetycznego	41
6.3	Porównanie z wynikami ultrasonografii	41
6.4	Porównanie z wynikami badań biomechanicznych	41
7	Podsumowanie	42
	Bibliografia	43
A	AchillesDL: System komputerowego wspomaganie oceny gojenia ścię- gien i więzadeł	44

Spis rysunków

1.1	Podział przedstawiający różne rodzaje współczesnych głębokich sieci neuronowych.	1
3.1	Lokalizacja mięśnia trójgłowego łydki wraz ze ścięgnem Achillesa. . . .	3
4.1	Porównanie schematów przetwarzania danych z wykorzystaniem metod głębokiego uczenia się i innych algorytmów.	9
4.2	Topologia perceptronu.	10
4.3	Topologia perceptronu wielowarstwowego.	11
4.4	Topologia sieci LeNet.	12
4.5	Reprezentacja graficzna oceny krzyżowej.	18
4.6	Dwuwymiarowa przestrzeń cech wraz z zaznaczonymi poziomami wariancji i składowymi głównymi.	22
4.7	Topologia architektury AlexNet.	26
4.8	Topologia architektury AlexNet z podziałem na dwa akceleratory GPU.	28
4.9	Topologia architektury AlexNet z podziałem na dwa akceleratory GPU.	29
4.10	Topologia architektury GoogleNet	29
4.11	Schemat funkcjonalny pojedynczego bloku w architekturze ResNet. . .	31
4.12	Topologia architektury ResNet-18.	33
4.13	Statystyki dotyczące publikacji medycznych zawierających słowa kluczowe związane z głębokim uczeniem się.	36

4.14	Porównanie automatycznej klasyfikacji retinopatii cukrzycowej i cukrzy- cowego obrzęku plamki z oceną panelu ekspertów	37
4.15	Porównanie automatycznej klasyfikacji 3 chorób skóry z oceną ekspertów dermatologów	38

Spis tabel

4.1	Parametry architektury GoogleNet	30
-----	--	----

Rozdział 1

Wstęp

Logistic regression — 1958

Hidden Markov Model — 1960

Stochastic gradient descent — 1960

Support Vector Machine — 1963

k-nearest neighbors — 1967

Artificial Neural Networks — 1975

Expectation Maximization — 1977

Decision tree — 1986

Q-learning — 1989

Random forest — 1995

4% badań dotyczy oceny postępu w leczeniu [NVIDIA]



Rysunek 1.1: Podział przedstawiający różne rodzaje współczesnych głębokich sieci neuronowych.

Rozdział 2

Cel i przebieg pracy

Rozdział 3

Monitorowanie procesu gojenia ścięgna Achillesa

3.1 Ścięgno Achillesa

Ścięgno Achillesa, nazywane również ścięgnem piętowym, jest największym i najsilniejszym ścięgnem występującym w ciele ludzkim. Stanowi wspólne zakończenie mięśnia trójgłowego łydki, w którego skład wchodzić dwie głowy mięśnia brzuchatego i mięsień płaszczkowaty. Całość struktury zlokalizowana jest w tylnym, powierzchownym przedziale łydki, co zostało przedstawione na Rysunku 3.1. Z obu głów (brzuśców)



Rysunek 3.1: Lokalizacja mięśnia trójgłowego łydki wraz ze ścięgnem Achillesa.

mięśnia brzuchatego łydki wyrasta jedno szerokie, płaskie ścięgno, które jest początkiem części brzuchatej ścięgna Achillesa. Następnie ścięgno to łączy się z włóknami pochodzącymi od mięśnia płaszczkowatego, które układają się stycznie do wcześniej powstałej struktury. Wówczas kształt ulega stopniowemu zwężeniu i zaokrągleniu, aż do punktu o minimalnej szerokości (około 4 cm nad przyczepem dolnym [1]). W rejonie samego przyczepu dolnego znajdującego się na tylnej powierzchni kości piętowej, ścięgno ponownie jest płaskie i szerokie.

W kolejnych podsekcjach szczegółowo omówiona została anatomia ścięgna Achillesa, jego biomechanika, potencjalne urazy wraz z czynnikami im sprzyjającymi oraz proces gojenia i możliwości jego wspomagania. Wszystkie te aspekty są istotne z uwagi na możliwości monitorowania procesów fizjologicznych występujących w ścięgnie.

3.1.1 Anatomia

Średnia długość ścięgna Achillesa to 15 cm (11 - 26 cm). Średnia szerokość w rejonie początku wynosi 6.8 cm (4,5 - 8, 6 cm). Następnie, stopniowo ścięgno ulega zwężeniu do punktu o minimalnej szerokości 1.8 cm (1,2 - 2,6 cm). W rejonie samego przyczepu struktura ponownie się rozszerza i jej szerokość wynosi średnio 3.4 cm (2,0 - 4,8 cm) [2-3]. Zewnętrzną część ścięgna Achillesa stanowi ościęgno utworzone z tkanki łącznej włóknistej. Achil -Histologia -Unaczynienie (krew, nerwy)

3.1.2 Biomechanika

Zadaniem ścięgien jest transfer siły mięśniowej do układu szkieletowego.

3.1.3 Urazy i czynniki im sprzyjające

3.1.4 Leczenie, fazy gojenia i rehabilitacja

3.2 Zastosowanie rezonansu magnetycznego

3.3 Zastosowanie ultrasonografii

3.4 Zastosowanie badań biomechanicznych

3.5 Inne metody

Rozdział 4

Konwolucyjne sieci neuronowe

Konwolucyjne sieci neuronowe (ang. *Convolutional Neural Networks*, CNN) są biologicznie inspirowanymi sztucznymi sieciami neuronowymi. Tak jak opisano we wstępie, należą one do zbioru *głębokich sieci neuronowych* (ang. *Deep Neural Networks*, DNN), które są z kolei podzbiorem *systemów uczących się* (ang. *Machine Learning systems*) tj. algorytmów nie wymagających eksplisite programowania do ustalenia swoich parametrów.

Pierwsze matematyczne formalizmy dotyczące CNN zostały zaproponowane już w latach 40-tych XX wieku, natomiast podłoże do inspiracji biologicznych dały badania nad korą wzrokową kotów Hubel’a i Wiesel’a z roku 1968. Dzięki tym pracom oraz badaniom kolejnych neurofizjologów (m.in. zob. [1]) ustalono, że kora wzrokowa zawiera złożone układy komórek, które odpowiadają za przetwarzanie informacji z wybranych regionów pola widzenia, sumarycznie pokrywając je w całości. Komórki kory wzrokowej działają zatem jak lokalne filtry przestrzeni wejściowej zaprojektowane, tak aby wydobyć istotne cechy z naturalnych obrazów. Dla przykładu reagują na orientację linii, kształty i kolory.

W sieciach konwolucyjnych procesy zachodzące w korze wzrokowej są modelowane, prowadząc do utworzenia bazy filtrów, za pomocą których istotne informacje obrazowe mogą być wyekstrahowane i następnie przetworzone. Fakt ten wykorzystywany jest w problemach dotyczących przetwarzania cyfrowych obrazów medycznych pochodzących np. z MR, TK czy USG.

Cyfrowy obraz zapisywany jest w postaci macierzy punktów o współrzędnych (x,y) , gdzie x to kolumna macierzy, a y wiersz. W przypadku obrazów trójwymiarowych

dochodzi jeszcze składowa z , a zamiast macierzy użyty jest tensor. Dodatkowo dla każdego punktu kodowana jest informacja o wartości funkcji obrazu $I(x,y)$. Na tej podstawie dzielimy obrazy na:

- binarne – kodowane są jedynie dwie możliwe wartości I (0 lub 1);
- monochromatyczne – kodowana jest informacja o natężeniu jednej barwy (najczęściej są to odcienie szarości lub brązu tzw. sepia);
- kolorowe – kodowane są wartości natężenia składowych.

Do zakodowania informacji o wartości funkcji I w obrazie binarnym potrzebny jest jeden bit na punkt. Odcienie obrazu monochromatycznego i pojedyncze składowe punktu obrazu kolorowego kodowane są na 8–16 bitach, w zależności od zakresu wartości występujących w danych.

Obrazy medyczne przetwarzane w tej pracy należą do grupy obrazów monochromatycznych. Należy jednak wiedzieć, że w praktyce sygnałem wejściowym dla sieci konwolucyjnych są często obrazy kolowe, reprezentowane odpowiednim *modelem przestrzennym barw* stanowiącym zestawienie składowych np. RGB, YUV, HSV, HLS (zob. [barwy])

Podstawową operacją wykorzystywaną w sieciach konwolucyjnych do wydobywania istotnych cech obrazowych jest *splot* maski K filtru z kolejnymi fragmentami funkcji I . K jest najczęściej macierzą kwadratową o wymiarze N i (z uwagi na rosnącą wraz z N złożonością obliczeniową) ogranicza się do wymiarów $N = 1, 3, 5, 7, 9, 11$. Splot zdefiniowany jest następująco:

$$I'(x, y) = \sum_n \sum_k I(x - n, y - k) K(n, k), \quad (4.1)$$

gdzie I' jest nową funkcją obrazową powstałą po filtracji, a n i k to kolejne współrzędne maski filtru w odniesieniu do jego punktu centralnego. W realizacji splotu dla wartości brzegowych, dla współrzędnych poza sygnałem przyjmuje się z reguły wartości 0. Inne metody to: odbicie obrazu poza jego granicami; powtórzenie obrazu bez odbicia; powielenie brzegowych wartości; modyfikacji maski filtru na brzegu obrazu, tak by maska nie wychodziła poza obraz.

/*Pojedynczy splot filtru z obrazem wejściowym nazywany jest *cechą* [OTR-19]. Cechy są bardzo łatwe do wizualizacji dlatego sieci konwolucyjne mogą być łatwiejsze

do interpretacji niż inne algorytmy sztucznej inteligencji. W ostatnich latach powstało wiele algorytmów do wizualizacji wyników działania sieci konwolucyjnych np. Saliency Maps [OTR - 20], GradCam [OTR - 21] albo metody bazujące na skierowanych acyklicznych grafach [OTR - 22]. Grupy cech z wybranego obszaru obrazu wejściowego, połączone w reprezentacje na różnych warstwach konwolucyjnych tworzą *mapy cech*. Dla przykładu w LeNet każda z warstw zawierała po odpowiednio: 6, 6, 16, 16 i 120 map cech o różnych wymiarach. */

Operacje, takie jak splot maski z funkcją I polegające na modyfikacji danego piksela biorąc pod uwagę piksel i jego otoczenie nazywane są *przekształceniami kontekstowymi*. Przy ich użyciu można bardzo efektywnie wydobywać charakterystyczne cechy funkcji I , takie jak:

- *krawędzie* – ciągi punktów o gwałtownych zmianach $I(x,y)$;
- *rogi* – przecięcia dwóch krawędzi;
- *grzbiety* lub *doliny* – lokalne maksimum lub odpowiednio minimum funkcji I ;
- *skupiska* (ang. *blobs*) – obszary jednorodnych wartości funkcji I , różniących się znacząco od najbliższego otoczenia;
- *tekstury* – charakterystyczne przestrzenne ułożenie wartości funkcji I w powtarzające się wzory.

Z powyższych cech można sformułować wektor cech w , który wykorzystywany jest do wnioskowania końcowego na temat obiektów znajdujących się w obrazach. Do tego celu służą grupy metod wśród których wyszczególnić można:

- *segmentację* – podział obrazu na spójne fragmenty, najczęściej wiążące się z wyodrębnieniem *obiektu z tła* na podstawie ustalonego progu lub miary np.:

$$I(x, y) \geq T_p \Rightarrow (x, y) \in \text{"obiekt"}$$

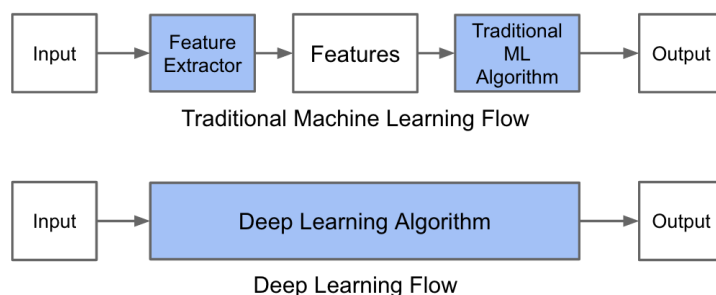
$$I(x, y) < T_p \Rightarrow (x, y) \in \text{"tło"},$$

przy czym metody ustalania wartości progowej T_p lub wielu wartości T_p^1, \dots, T_p^n są obszarem szerokich badań (zob. [Prog]).

- *klasyfikację* – przyporządkowanie obiektu do odpowiedniej klasy (np. tkanka zdrowa lub patologiczna).

- *detekcję* – binarne rozróżnienie traktujące o tym czy obiekt znajduje się w obrazie czy nie.
- *śledzenie* – detekcja lub też klasyfikacja obiektów w kolejnych krokach czasowych.

Schemat stosowany jeszcze do niedawna (zob. Rys. 4.1) w większości badań wykorzystujących uczenie się maszyn uwzględniał wyliczenie wektora cech i wnioskowanie końcowe jako oddzielne kroki¹.



Rysunek 4.1: Porównanie schematów przetwarzania danych z wykorzystaniem metod głębokiego uczenia się i innych algorytmów.

W algorytmach głębokiego uczenia, zarówno ekstrakcja cech jak i ostateczne wnioskowanie na ich podstawie realizowane jest w jednym kroku, co nazywane jest paradygmatem *end-to-end learning*. W kolejnej sekcji omówiono dokładniej jak wyglądała ewolucja tego podejścia do obecnej postaci.

4.1 Zarys historyczny

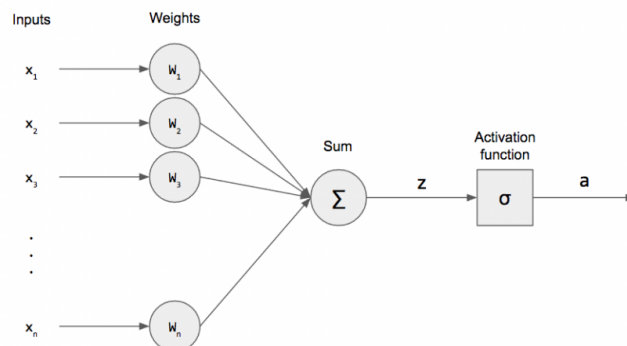
Pierwszy formalny model neuronu został zaproponowany przez Warrena McCulloch i Waltera Pitts w roku 1943 [Pitts]. Była to bramka logiczna, której wyjście stawało się aktywne w momencie, gdy liczba aktywnych wejść przekroczyła pewien zdefiniowany próg. Taka zależność sygnału wyjściowego y od sygnałów wejściowych $x_1 \dots x_n$ została potem nazwana *funkcją aktywacji neuronu*, którą zapisujemy jako:

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (4.2)$$

W modelu neuronu McCulloch-Pitts można było modyfikować parametr progu, nie

¹Wyjątki typu SVM

istniała natomiast możliwość uczenia się takiej architektury. Dlatego w 1957 zaproponowano sztuczną sieć neuronową zawierającą wiele neuronów z ważonymi połączeniami między sobą [Perc]. Sieć nazwano perceptronem, co było implikacją zamiłowania jego twórcy Franka Rosenblatta do aplikacji związanych z percepcją, zwłaszcza mowy czy pisma. Schemat sieci pokazano na Rys. 4.2.



Rysunek 4.2: Topologia perceptronu.

Zastosowanie wektora wag $w = (w_1, \dots, w_n)$ dało możliwość uczenia się poprzez adaptacyjną zmianę wartości jego elementów. W modelu Rosenblatta zastosowano ponadto progową funkcję aktywacji z progiem T_p :

$$y(z) = \begin{cases} 0, & n < T_a, \\ 1, & n \geq T_a, \end{cases} \quad (4.3)$$

gdzie z to suma ważona wyjść poszczególnych neuronów:

$$y = \sum_{i=1}^n w_i x_i \quad (4.4)$$

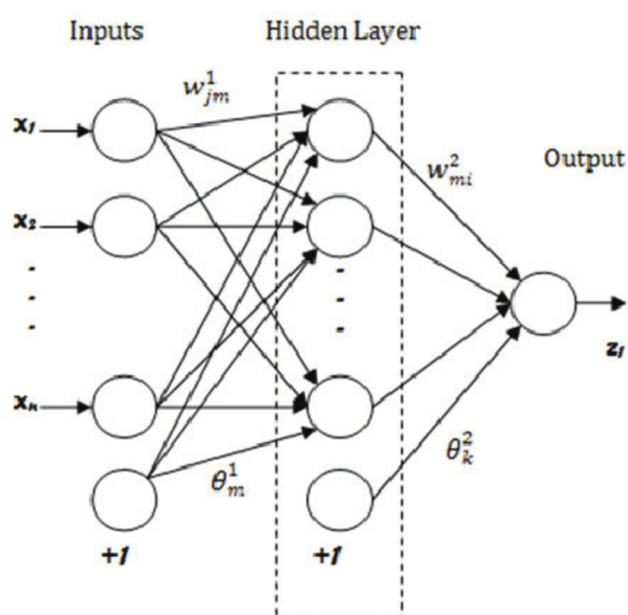
W dwuwymiarowej przestrzeni sygnałów wejściowych x_1, x_2 działanie perceptronu można opisać jako wyliczenie funkcji liniowej rozdzielającej obserwacje x_1 od x_2 . W trzech wymiarach będzie to płaszczyzna, a w n -wymiarach, hiperpłaszczyzna.

Powyżej opisane działanie jest daleko idącym uproszczeniem funkcjonowania biologicznego neuronu (opisz coś więcej o neuronie). Przez blisko dekadę nowa architektura była obiektem badań i doczekała się sukcesów na polach takich jak rozpoznawanie tekstu, czy mowy [1].

Pomimo tego, liniowy charakter perceptronu wprowadzał duże ograniczenia w moż-

liwościach jego zastosowania. W 1969 roku Marvin Minsky i Seymour Papert w książce *Perceptrons* opublikowali listę problemów, których nie można było rozwiązać z użyciem perceptronu. Do najszerzej dyskutowanych należał problem związany z brakiem możliwości modelowania funkcji XOR.

Po latach intensywnych prac, część z opisanych przez Minsky-Papert problemów udało się rozwiązać dopiero w 1986, za sprawą pracy Davida Rumelharta, Geoffa Hintona i Ronalda Williams traktującej o perceptronach wielowarstwowych. Schemat takiej sieci zaprezentowano na Rys. 4.3



Rysunek 4.3: Topologia perceptronu wielowarstwowego.

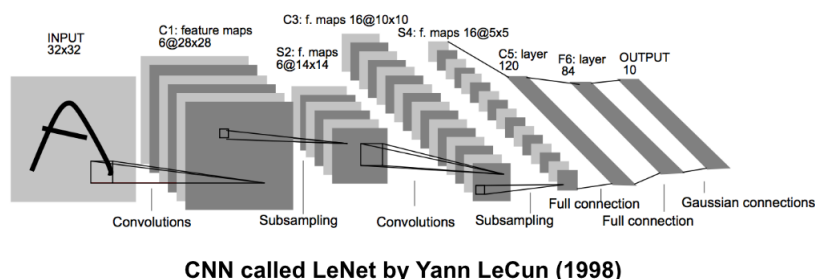
Spośród najważniejszych innowacji wprowadzonych w perceptronie wielowarstwowym wyszczególnić można zastosowanie w praktyce nowego algorytmu uczenia się sieci, który został opisany dalej w kolejnej sekcji jak również nowej, sigmoidalnej funkcji aktywacji:

$$y(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (4.5)$$

Z wykorzystaniem sieci wielowarstwowych możliwe stało się modelowanie funkcji XOR jak i innych problemów nieliniowych o praktycznym wymiarze.

Kolejny przełom nastąpił w 1989 roku kiedy to Yann LeCun, były uczeń Geoffa Hinton, zaprezentował swoje wyniki dotyczące klasyfikacji odręcznego pisma z użyciem sieci wielowarstwowych [LeCun et al., 1989a]. Finalnie, badania te doprowadziły

do przedstawienia w 1998 roku pierwszej sieci konwolucyjnej nazwanej LeNet [LeNet]. Architektura tej sieci przedstawiono na Rys. 4.4.



Rysunek 4.4: Topologia sieci LeNet.

Sieć składała się z 7 warstw i zawierała około 60,000 parametrów. Oryginalnie, sygnał wejściowy sieci stanowił obrazek o wymiarach 32×32 .

W architekturze LeNet zaobserwować można dwie podstawowe składowe współczesnych sieci konwolucyjnych wykorzystywanych do klasyfikacji obrazów tj.:

- *ekstraktor cech* – część zawierająca m.in. filtry, służące do automatycznej ekstrakcji wektora cech w .
- *klasyfikator* – część wykorzystywana do zadania wnioskowania końcowego na podstawie w .

Przy użyciu takiej architektury możliwe stało się zastosowanie paradygmatu end-to-end learning rozumiane w tym kontekście jako znalezienie możliwie dobrej transformacji, która surowe obrazy przekształca bezpośrednio w ostateczną klasyfikację. Sam proces szkolenia sieci i problemów z tym związanych wymaga dokładniejszego opisu dlatego został on przedstawiony w kolejnej sekcji.

4.2 Szkolenie głębokich sieci neuronowych

Większość algorytmów szkolenia głębokich sieci neuronowych obejmuje zadanie *optymalizacji*, rozumiane jako minimalizację, bądź maksymalizację *funkcji celu* $f(x)$ przez zmianę x . W literaturze można też znaleźć inne nazwy funkcji celu takie jak *kryterium*, *funkcja kosztów*, *funkcja strat*, *funkcja błędów* (za [DL-IANGoodfellow]).

/*wprowadzenie do algebry liniowej - skalar, wektor, macierz, tensor*/

Podczas zadania optymalizacji bardzo często wykorzystuje się *pochodną funkcji* oznaczaną jako $f'(x)$ lub $\frac{\partial y}{\partial x}$, gdyż niesie ona informacje o nachyleniu funkcji w punkcie x . W praktyce funkcje celu są wielowymiarowe dlatego wykorzystywane są *pochodne cząstkowe* informujące o nachyleniu w poszczególnych wymiarach. Wektor zawierający pochodne cząstkowe funkcji nazywany jest *gradientem* i oznaczany jest jako $\nabla f(x)$. Z kolei macierz pochodnych cząstkowych funkcji nosi nazwę *macierzy Jacobiego*, a macierz *drugich pochodnych* cząstkowych (tj. pochodnych pochodnych) *macierzą Hessego*. Macierze te są w praktyce bardzo często wykorzystywane w implementacjach poszczególnych algorytmów szkolenia się sieci.

Szereg metod optymalizacyjnych niegradientowych zostało opracowanych (zob. []). Jednak z uwagi na szybkie znajdowanie lokalnych minimów, to właśnie metody optymalizacji bazujące na wartości gradientu są najczęściej używane w szkoleniu głębokich sieci neuronowych. Lokalne minimum przeważnie nie jest najlepszym możliwym rozwiązaniem, ale wiele badań wykazało następujące fakty (por. [WhyGradientMethodsoinDL]):

1. Dla sieci neuronowych o dużych rozmiarach większość lokalnych minimów charakteryzuje się podobnymi wartościami, przekładającymi się na porównywalny efekt wnioskowania końcowego.
2. Prawdopodobieństwo znalezienia lokalnego minimum, którego implikacją będą niezadawalające rezultaty sieci maleje wraz ze wzrostem rozmiaru sieci.
3. Próba znalezienia globalnego minimum bardzo często prowadzi do problemu nadmiarowego dopasowania, omówionego dokładniej w kolejnej sekcji.

Podsumowując, metody gradientowe są wydajne obliczeniowo i prowadzą do znalezienia wielu satysfakcjonujących rozwiązań, które mogą być wykorzystane do rozwiązania praktycznych problemów. Metody gradientowe w kolejnych krokach iteracji obierają kolejne wartości funkcji f przesuając się w kierunku spadku gradientu:

$$x' = x - \epsilon \nabla f(x), \quad (4.6)$$

gdzie ϵ to *szybkość uczenia się*, parametr określający wielkość kroku.

Funkcja celu w przypadku praktycznych zadań optymalizacyjnych, wykorzystujących głębokie uczenie się jest *funkcją złożoną*, a zatem efekt jej działania jest rów-

noważny operacji wykonywanym przez kilka lub więcej funkcji po kolei. Do obliczeń pochodnych funkcji złożonych z funkcji, których pochodne są znane stosuje się tzw. *regułę łańcuchową*. Przypuśćmy, że $y = g(x)$ i $z = f(g(x)) = f(y)$, gdzie x i y to wektory. Wówczas regułę łańcuchową można zapisać jako:

$$\frac{\delta z}{\delta x_i} = \sum_j \delta z / \delta y_j \delta y_j / \delta x_i, \quad (4.7)$$

co w zapisie wektorowym równoważne jest z równaniem:

$$\nabla_x z = (\delta y / \delta x)^T \nabla_y z, \quad (4.8)$$

gdzie $\frac{\delta y}{\delta x}$ to macierz Jacobiego.

Regułę łańcuchową zapisaną w 4.8 prosto uogólnia się do zmiennych tensorowych (zob. IanGoodf-205) i stosuje w różnych meta-algorytmach służących do szkolenia sieci. Przykładem jest *algorytm propagacji wstecznej*, który oblicza regułę łańcuchową w wydajnej kolejności stosując działania w grafie takim jak topologia perceptronu wielowarstwowego. Przykład takiego działania można znaleźć w [Goodfellow].

Proces szkolenia się sieci ma na celu najlepsze możliwe przybliżenie docelowej klasyfikacji bazując na danych przykładach, czyli *zbiorze uczącym* U . Algorytmy optymalizacyjne używane do szkolenia głębokich sieci neuronowych zazwyczaj działają pośrednio, optymalizując pewną miarę wydajności P , która jest zdefiniowana na *zbiorze testowym*, zawierającym przykłady inne niż w U . Często bierze się również pod uwagę jeszcze dodatkowy podzbiór, rozłączny z U i T - *zbiór walidacyjny*, który ma pomóc w wyborze najlepszej architektury sieci oraz najlepszych algorytmów i wartości parametrów odpowiedzialnych za jej szkolenie.

W procesie szkolenia zmniejszana jest funkcja kosztów f w oparciu o U , a celem jest poprawa P . Algorytmy optymalizacyjne wykorzystujące cały zbiór U do liczenia wartości gradientu nazywane są *pakietowymi* lub *deterministycznymi*, gdyż przetwarzają jednocześnie wszystkie przykłady szkoleniowe. Te, które używają jednego przykładu na raz są nazywane *stochastycznymi*. W praktyce przy szkoleniu głębokich sieci stosowane są algorytmy *minipakietowe*, wykorzystujące więcej niż jeden przykład, ale mniej niż cały zbiór. Z reguły są to liczby z przedziału 8-256. Takie podejście zapewnia kompromis między szybkością obliczeń i dokładnością esymacji wartości gradientu.

Przykładem algorytmu minipakietowego jest *stochastyczny spadek gradientu* (ang.

stochastic gradient descent, SGD). Bazuje on na założeniu, że estymację gradientu można otrzymać wyciągając średnią gradientu na minipakiecie m przykładów. Kolejne kroki algorytmu można zapisać następująco:

1. Wybierz wartość parametru szybkości uczenia się ϵ_k .
2. Próbuj minipakiet złożony z m przykładów ze zbioru szkoleniowego.
3. Oblicz estymację gradientu $g = \frac{1}{m} \nabla \sum_{i=1}^m L(x_i, y_i, f)$, gdzie L to funkcja strat na jeden przykład o wejściowej wartości próbki x_i i oczekiwanym wyjściu y_i .
4. Zastosuj aktualizację wartości funkcji celu równą $\epsilon_k g$.
5. Jeżeli kryterium stopu nie zostało spełnione wróć do kroku 2.

Kryterium stopu jest najczęściej określone liczbą iteracji lub satysfakcjonującą wartością funkcji f . Kwestia optymalnego wyboru parametru ϵ_k zależy od problemu i najczęściej stosowane są metody empiryczne, przy czym zazwyczaj ϵ_k maleje wraz ze zbliżaniem się do satysfakcjonującego rozwiązania.

Parametry algorytmów szkoleniowych nazywane są *hiperparametrami*, gdyż nie są wyznaczane bezpośrednio w procedurze uczenia. Strategia nadawania hiperparametrom wartości początkowych jest silnie dyskutowana w literaturze (zob. []) i jej kompleksowy opis wykracza poza zakres tej pracy. Warto jednak wspomnieć o algorytmach z adaptacyjną szybkością uczenia się, gdyż jest to jeden z najtrudniejszych do ustawienia hiperparametrów, a jednocześnie bardzo istotny. Są to m.in.:

- Adaptive Gradient Algorithm (AdaGrad) [] – wykorzystywany do indywidualnej adaptacji szybkości uczenia się wszystkich parametrów modelu, skalując je odwrotnie proporcjonalnie do pierwiastka kwadratowego sumy wszystkich historycznych kwadratów gradientów.
- Root Mean Square Propagation (RMSProp) [] – modyfikacja AdaGrad, w której zamiast akumulacji gradientu wykorzystuje się wykładniczo ważoną ruchomą średnią z gradientu.
- Adaptive moments algorithm (Adam) [] – W porównaniu z RMSProp, Adam poza momentem pierwszego rzędu (tj. średnią) wykorzystuje również moment drugiego rzędu (tj. *wariancję*). Dokładniej rzecz biorąc, w algorytmie liczona jest

wykładnicza ruchoma średnia gradientu i kwadrat z gradientu oraz parametry β_1 i β_2 , które kontrolują zakres liczenia średnich.

W momencie pisania tej pracy algorytm Adam jest najczęściej rekomendowanym jako domyślna metoda szkolenia głębokich sieci neuronowych dlatego poniżej zamieszczono jego dokładny opis:

1. Wybierz wartość początkową ϵ , β_1 , β_2 oraz ustaw początkowe wartości zmiennych momentu 1 i 2 stopnia $s = 0$ i $r = 0$, wartość kroku czasowego $t = 0$ i stałą σ używaną do stabilizacji numerycznej.
2. Próbuj minipakiet złożony z m przykładów ze zbioru szkoleniowego.
3. Oblicz estymację gradientu $g = \frac{1}{m} \nabla \sum_{i=1}^m L(x_i, y_i, f)$ i zwiększ t o 1
4. aktualizuj estymację pierwszego momentu. $s = \beta_1 s + (1 - \beta_1)g$
5. aktualizuj estymację drugiego momentu. $r = \beta_2 r + (1 - \beta_2)g \odot g$
6. skoryguj obciążenie momentu pierwszego rzędu $s = \frac{s}{1 - \beta_1^t}$
7. skoryguj obciążenie momentu drugiego rzędu $r = \frac{r}{1 - \beta_2^t}$
8. Zastosuj aktualizację wartości funkcji celu równą $-\epsilon \frac{s}{\sqrt{r + \sigma}}$.
9. Jeżeli kryterium stopu nie zostało spełnione wróć do kroku 2.

Ocena procesu szkolenia się sieci polega na obliczeniu odpowiednich miar i współczynników odzwierciedlających przybliżenie zbioru T lub/i W przez znalezione rozwiązanie. W powszechnym problemie klasyfikacji binarnej, występującym również w tej pracy, w kontekście oceny efektywności algorytmów można wyszczególnić następujące parametry:

- *Fałszywie pozytywna klasyfikacja* (FP od ang. *False Positive*) – liczba obserwacji zaklasyfikowanych jako pozytywne, a należących do klasy obserwacji negatywnych.
- *Fałszywie negatywna klasyfikacja* (FN od ang. *False Negative*) – liczba obserwacji zaklasyfikowanych jako fałszywie negatywne, a należących do klasy obserwacji pozytywnych.

- *Prawdziwie pozytywna klasyfikacja* (TP od ang. *True Positive*) – liczba wyników poprawnie zaklasyfikowanych jako pozytywne.
- *Prawdziwie negatywna klasyfikacja* (TN od ang. *True Negative*) – liczba wyników poprawnie zaklasyfikowanych jako negatywne,

oraz miary:

- *Dokładność klasyfikacji* (ang. *Accuracy*) – $ACC = \frac{TP+TN}{TP+TN+FP+FN}$.
- *Czułość klasyfikacji* (ang. *Sensitivity*) – $TPR = \frac{TP}{TP+FN}$.
- *Swoistość klasyfikacji* (ang. *Specificity*) – $TNR = \frac{TN}{TN+FP}$.
- *Precyzja klasyfikacji* (ang. *Precision*) – $PPV = \frac{TP}{TP+FP}$.

W problemach empirycznych dąży się do maksymalizowania bądź minimalizowania powyższych współczynników. Prawidłowe podejście polega również na wybraniu możliwie efektywnej architektury sieci. W dalszej części zostaną omówione problemy związane z uczeniem się poprawnej klasyfikacji danych potrzebne do zrozumienia badań wykonanych w pracy.

4.2.1 Problem nadmiernego dopasowania

Dążenie do najlepszego możliwego przybliżenia zbioru U wprowadza niepożądane zjawisko zwane *nadmiernym dopasowaniem*. Wtedy to dokładność klasyfikacji zbioru U jest wysoka lub nawet bezbłędna, natomiast znacznie niższa jest dokładność klasyfikacji zbioru testowego T i walidacyjnego W . W praktyce oznacza to, że model staje się mało użyteczny, gdyż wnioski na nowych danych charakteryzują się niską dokładnością.

Z uwagi na ten fakt ogólnym dążeniem w procesie uczenia się sieci jest osiągnięcie *maksymalnej generalizacji* klasyfikacji. Sieć o wysokim współczynniku generalizacji lepiej klasyfikują ogół zadanych wektorów wejściowych niż sieć, która ma niski współczynnik generalizacji i jest nadmiernie dopasowana do zbioru U .

W celu uzyskania generalizacji należy wybrać taki model klasyfikatora, który wystarczy do zachowania poprawnej klasyfikacji. W tym celu empirycznie ustalane są maksymalnie ogólne, dostateczne warunki poprawnej klasyfikacji. Dzięki generalizacji

wzrasta prawdopodobieństwo, że przykład z poza zbioru U będzie poprawnie klasyfikowany przez algorytm sieci.

W celu osiągnięcia kompromisu pomiędzy maksymalnie dobrą klasyfikacją zbioru U i wysoką generalizacją sieci neuronowej można zastosować *metodę oceny krzyżowej* (ang. *cross-validation*). Metoda ta polega na podziale zbioru uczącego na s segmentów D , z których każdy w innej iteracji służy jako zbiór testujący i walidacyjny, a pozostałe segmenty pełnią rolę zbioru uczącego. Podział zobrazowany jest na Rysunku 4.5.



Rysunek 4.5: Reprezentacja graficzna oceny krzyżowej.

Stosując metodę oceny krzyżowej dla różnych modeli sieci można stwierdzić, który z nich spełnia najlepiej kompromis między dobrą klasyfikacją zbioru U i wysoką generalizacją.

Kombinacja predykcji wielu różnych modeli jest bardzo wydajną metodą do polepszenia generalizacji i zmniejszenia błędu klasyfikacji na zbiorach testowych oraz walidacyjnych (zob. [AlexNet 1, 3]). Jednak współczesne sieci neuronowe, których przykłady zostały opisane w dalszych sekcjach mogą zawierać miliony parametrów i ich optymalizacja jest wymagająca obliczeniowo. Z uwagi na ten fakt w praktyce ogranicza się liczbę s segmentów najczęściej wybierając $s \in (5; 10)$.

Innym podejściem zaproponowanym w 2012 w [AlexNet-10] jest technika *dropout*, której główna idea bazuje na zerowaniu wyjścia neuronów sieci z prawdopodobieństwem 0,5 przy każdej iteracji treningu sieci. Neurony, które są w ten sposób tymczasowo dezaktywowane nie mają wpływu w danej iteracji na predykcję sieci i nie są uwzględniane przy wstecznej propagacji gradientu. Podejście to można porównać do treningu w każdej iteracji różnych modeli sieci. Dla przykładu w [AlexNet] wykazano, że metoda dropout wymaga jedynie 2 razy więcej iteracji do przybliżenia zbioru U , przy tym uzyskuje znacznie lepszą generalizację.

Kluczowym składnikiem potrzebnym do treningu sieci i maksymalizacji generalizacji jest odpowiedni rozmiar zbioru danych. W praktyce jest to problem szeroko dyskutowany, gdyż zwłaszcza w danych medycznych istnieje szereg ograniczeń związanych z dostępem i akwizycją odpowiedniego materiału badawczego (np. ograniczenia: prawne, związane z prywatnością, czy z etyką). W przypadku, gdy zgromadzenie odpowiedniego zbioru danych jest niemożliwe pewnym rozwiązaniem problemu jest zastosowanie metod jego sztucznego powiększania (ang. *data augmentation*).

W przypadku obrazów stosuje się metody *afinicznych przekształceń* zgodne z definicją algebraiczną:

$$\mathbf{x} \mapsto \mathbf{Ax} + \mathbf{b}, \quad (4.9)$$

gdzie A jest macierzą przekształcenia liniowego, a \mathbf{b} wektorem przesunięcia. Jako przykłady takich przekształceń dla dwuwymiarowych obrazów można wymienić:

- *rotację* – obrót obrazu o kąt θ , gdzie:

$$A = \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \quad (4.10)$$

- *odbicie lustrzane* – odwrócenie kolejności pikseli w każdym wierszu, gdzie:

$$A = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.11)$$

- *skalowanie* – zmiana rozmiaru obrazu o S , gdzie:

$$A = \begin{bmatrix} S_x & 0 \\ 0 & S_y \end{bmatrix} \quad (4.12)$$

- *translację* – przesunięcie punktów obrazu o wektor \mathbf{b} .

Analogiczne równania istnieją dla obrazów trójwymiarowych (zob. []). W określonych przypadkach używane są również nieafiniczne przekształcenia. Np. w [Ronneberger et al., arXiv:1505.04597v1, 2015] wykorzystano m.in. deformacje do powiększenia zbioru zaledwie 30 obrazów mikroskopowych przedstawiających macierz komórkową i uzyskano znacząco lepsze wyniki niż istniejące w 2015 algorytmy typu state-of-the-art.

W przypadku danych medycznych należy szczególnie zwrócić uwagę, aby powięk-

szony zbiór zawierał dane przypominające w rzeczywistości występujące przypadki np. nieduże obroty występujące u pacjentów skanowanych rezonansem magnetycznym lub niewielkie skalowania rozmiaru kości widocznych w TK. Szeroką dyskusję prowadzi się również na temat wykorzystania sztucznie generowanych zbiorów danych o czym więcej można przeczytać w pracach [Sztuczna generacja danych medycznych].

4.2.2 Problem redukcji wymiarowości

Rozmiar wektora cech wejściowych w we współczesnych problemach rozwiązywanych przez algorytmy sztucznej inteligencji osiąga liczby liczone w tysiącach (zob. [przykłady dużych problemów FB, Google]). Duży rozmiar wektora cech wejściowych prowadzi do problemu nazwanego *przekleństwem wymiarowości* (ang. *curse of dimensionality*). Określenie zostało poraz pierwszy sformułowane przez Richarda Bellmana w latach 50-tych XX wieku. Naukowiec ten zajmował się teorią sterowania (zob. [teoria sterowania]) i podczas swojej pracy obserwował algorytmy doskonale działające w 3 wymiarach, a prezentujące znacząco gorsze wyniki w hiperprzestrzeni.

Problem przekleństwa wymiarowości ma dwie główne przyczyny: (1) w miarę wzrostu rozmiaru w , liczba obserwacji w zbiorze uczącym potrzebnych do wiarygodnego oszacowania funkcji wyjściowej rośnie wykładniczo; (2) nie wszystkie cechy są jednako znaczące w kontekście rozróżnienia danych.

Problem (2) jest szczególnie istotny w dość prostych algorytmach takich jak algorytm K najbliższych sąsiadów, gdzie do poprawnego działania należy policzyć dystans pomiędzy sąsiednimi obserwacjami. Uwzględniając dużą liczbę nieistotnych cech jako argumenty funkcji dystansu uzyskuje się wyniki utrudniające lub nawet uniemożliwiające poprawną klasyfikację zbioru.

W przypadku głębokich sieci neuronowych problem (2) ma mniejsze znaczenie, gdyż wpływ poszczególnych cech może być regulowany poprzez wartości wag. Natomiast w kontekście problemów wynikających z (1) można wyróżnić dwa stosowane podejścia:

- wybór podzbioru istotnych cech o liczności $n' \ll n$,
- przekształcenie oryginalnych n zmiennych na nowy zbiór n' cech, gdzie ponownie $n' \ll n$.

W pierwszym przypadku, wybór podzbioru istotnych cech polega na określeniu minimalnego podzbioru, dla którego rozkład prawdopodobieństwa różnych klas obiektów

jest jak najbliższy oryginalnemu rozkładowi uzyskanemu z wykorzystaniem wszystkich cech. Do tych zagadnień wykorzystywane są metody takie jak:

- *miary siły związku* – określające podobieństwo między rozkładami zmiennych losowych. Najczęściej stosowana jest *korelacji Pearsona*, której współczynnik r dla dwóch zmiennych losowych X i Y zapisywany jest następującym wzorem:

$$r_{XY} = \frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})(Y_i - \bar{Y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2}}, \quad (4.13)$$

gdzie X_i, Y_i to wartości kolejnych obserwacji, a \bar{X} i \bar{Y} to ich średnie. Innymi słowy tak zapisany współczynnik r_{XY} jest ilorazem *kowariancji* i iloczynu *odchyleń standardowych* zmiennych X i Y .

- *miary entropii względnej* – określające rozbieżności między rozkładami zmiennych losowych. Najczęściej stosowana jest *dywergencja Kullbacka-Leiblera*, której współczynnik d_{KL} dla dwóch rozkładów prawdopodobieństwa p i q zapisany jest wzorem:

$$d_{KL}(p, q) = \sum_i p(i) \log_2 \frac{p(i)}{q(i)} \quad (4.14)$$

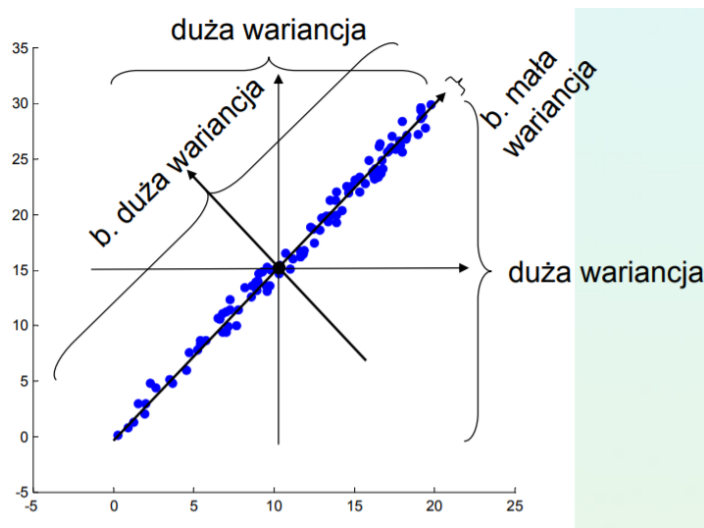
- *teoria zbiorów przybliżonych* – wykorzystująca informacje o elementach zbioru i klasyczną teorię zbiorów do porównywania rozkładów (zob. []).

Podobieństwo rozkładów ocenione na podstawie powyższych miar daje możliwość skutecznej redukcji wymiarowości z zachowaniem efektywności algorytmu.

W drugim przypadku, gdy zaistnieje potrzeba przekształcenia przestrzeni cech i wyliczenia nowego zbioru, metodą state-of-the-art jest algorytm *analizy składowych głównych* (ang. *Principal Component Analysis*, w skr. PCA) opracowany przez Karla Pearsona w 1901 r (zob. [Pearson1901]).

Istotą PCA jest przekształcenie początkowych, skorelowanych cech w nowy zbiór nieskorelowanych zmiennych. Nowe zmienne, tzw. *składowe główne*, powstają z przekształcenia oryginalnych zmiennych skorelowanych, w taki sposób aby w maksymalnym stopniu wyjaśniać całkowitą wariancję w próbie cech oryginalnych. Wariancje składowych głównych są *wartościami własnymi* macierzy kowariancji oryginalnych zmiennych. Innymi słowy są to wartości skalarne opisujące poziom wariancji w danych w stosunku do zadanych *ortogonalnych wektorów*, tj. gdzie kąt w przestrzeni euklidesowskiej pomiędzy wektorami równy jest 90deg. Dla przykładu pierwsza składowa główna

redukuje największą część zróżnicowania, druga kolejną, której nie redukowała poprzednia itd. Składowych głównych jest zawsze tyle ile wymiarów danych. Przykład dwuwymiarowy został przedstawiony na Rys. 4.6. Na rysunku można zaobserwować,



Rysunek 4.6: Dwuwymiarowa przestrzeń cech wraz z zaznaczonymi poziomami wariancji i składowymi głównymi.

że nowa przestrzeń charakteryzuje się znacznie większym zróżnicowaniem poziomu wariancji niż przestrzeń oryginalna. Wybierając zatem tylko pierwszą składową uzyskana zostanie reprezentacja *skomprymowana stratnie* (tzn. taka która nie daje gwarancji odtworzenia oryginalnych wartości), ale za to zachowująca znaczną część wariancji.

Szczegółową procedurę PCA można zapisać następująco:

1. oblicz macierz kowariancji: $S_x = X^T X$, gdzie X to macierz danych zawierająca obserwacje w wierszach. Macierz S_x jest symetryczna i pozwala ocenić: (1) wariancje zmiennych (elementy na głównej przekątnej); (2) zależności pomiędzy zmiennymi (elementy poza główną przekątną).
2. dokonaj diagonalizacji: $S_x = K L K^T$, gdzie L to macierz diagonalna, a K to macierz odwracalna składająca się z wektorów własnych odpowiadających kolejnym wartościom własnym.
3. utwórz macierz nowych zmiennych wykonując operację: $Y = X K$

Oprócz PCA, w kontekście redukcji wymiarowości można również wyróżnić następujące algorytmy:

1. *Multidimensional scaling*, MDS – bazuje na wyliczeniu odpowiednio zdefiniowanego dystansu między wartościami cech w oryginalnej przestrzeni i próbie zachowania tego dystansu w zredukowanej wymiarowości [1].
2. *t-distributed stochastic neighbor embedding*, t-SNE – stosowany do wizualizacji struktur cech w różnych skalach [2].
3. *Isomap* – algorytm nieliniowej redukcji wymiarowości pozwalający na gwarantowane znalezienie globalnego minimum [3].
4. *Independent Component Analysis*, ICA – stosowany do znalezienia reprezentacji danych składających się z niezależnych elementów [4].
5. *Latent Semantic Analysis*, LSA – stosowany głównie w problemach dotyczących przetwarzania języka naturalnego, zwłaszcza do znalezienia kontekstu użycia danego słowa poprzez analizę statystyczną dużych bloków tekstów [5].
6. *Self Organizing Maps*, SOM – bazuje na zachowaniu własności topologicznych przestrzeni cech oryginalnych w zredukowanej wymiarowości [6].

Zarówno przekleństwo wymiarowości, jak i wcześniej opisany problem nadmiernego dopasowania są zjawiskami bardzo często występującymi w praktycznych zastosowaniach algorytmów głębokiego uczenia się. Szereg kolejnych wyzwań i rozwiązań został opisany w kolejnej sekcji przy okazji przedstawienia współczesnych topologii.

4.3 Przykłady współczesnych topologii

Współczesne sieci konwolucyjne służące do klasyfikacji obrazów, podobnie jak u protoplasty tj architektury LeNet, składają się z dwóch głównych części: ekstraktora cech i klasyfikatora. W porównaniu jednak do pierwszych topologii, różnorodność warstw i ich funkcji uległa zwiększeniu. Do najczęściej stosowanych komponentów współczesnych sieci konwolucyjnych można zaliczyć:

- *warstwy konwolucyjne* – w których pogrupowane są filtry używane do ekstrakcji cech obrazowych różnego poziomu (np. krawędzie, kształty, obiekty);

- *warstwy max-pool* – stosowana do nieliniowej redukcji wymiarowości. Z obszaru $n \times n$ w obrazie wyliczana jest największa wartość ² $I(x, y)$. W praktyce obszar jest zazwyczaj wymiarów 2×2 , a *krok* (tj. odstęp pomiędzy kolejnymi próbkowaniami funkcji I) jest ustawiany na 2.
- *warstwy aktywacji* – warstwa zawierająca funkcje aktywacji neuronów. We współczesnych architekturach zamiast funkcji sigmoidalnych stosuje się najczęściej funkcję ReLU:

$$f(x) = \max(0, x), \quad (4.15)$$

która jest mniej wymagająca obliczeniowo niż funkcja sigmoid. Przy czym dla współczesnych topologii o dużej liczbie parametrów testy empiryczne wykazały wyniki dokładności na podobnym poziomie bez względu na rodzaj użytej aktywacji (zob. []).

- *warstwy fully connected*, FC – warstwa składająca się z neuronów, z których każdy jest połączony z każdym neuronem kolejnej warstwy. Występują zazwyczaj w ostatniej części sieci konwolucyjnych tj. w klasyfikatorze.
- *warstwy normalizacji* – warstwa normalizująca wyjście poprzedzającej warstwy do znormalizowanego przedziału. Wykorzystywana w celu zrównoważenia poziomu wpływu poszczególnych neuronów na wynik końcowy. Bardzo często stosuje się tzw. *Local Response Normalization* zadaną wzorem:

$$b_{x,y}^i = a_{x,y}^i / \left(k + \alpha \sum_{j=\max(0, i-n/2)}^{\min(N-1, i+n/2)} (a_{x,y}^j)^2 \right)^\beta, \quad (4.16)$$

gdzie $a_{x,y}^i$ jest aktywacją danego neuronu, a k , α , n i β to stałe dobierane empirycznie na podstawie zbioru walidacyjnego (zob. [AlexNet]). ³

Wprowadzenie w ostatnich latach dedykowanych dla głębokiego uczenia się rozwiązań zarówno w warstwie sprzętowej jak i oprogramowania umożliwiło tworzenie architektur o wysokim stopniu komplikacji. W głównej mierze rozwiązania te umożliwiły optymalizacji fazy szkolenia omówionej w poprzedniej sekcji jak również *fazy wnioskowania*, gdzie wytrenowana sieć użyta jest do przetwarzania kolejnych obserwacji.

²W uzasadnionych przypadkach stosuje się również obliczanie średniej, normy L2 i innych współczynników

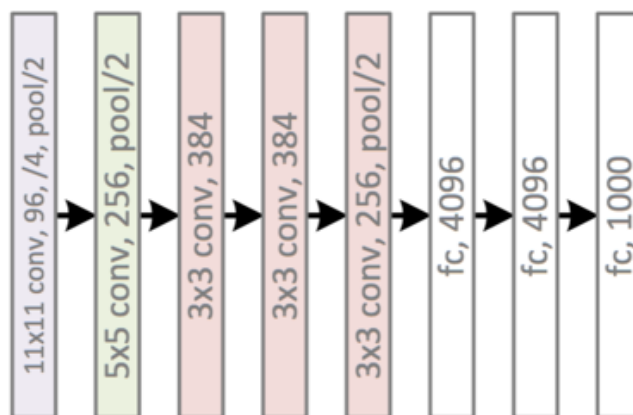
³warstwa coraz rzadziej stosowana w praktyce z uwagi na znikomy wpływ na rezultaty.

Przed wszystkim można wyróżnić dedykowane akceleratory do operacji macierzowych takie jak *NVIDIA Tensor Processing Unit* (w skr. *TPU*) [] czy *Intel Lakecrest* [] oraz rozwiązania takie jak [24-TTCF] minimalizują czasy przetwarzania sygnału przez wy-trenowaną sieć np. stosując optymalizację reprezentacji liczb zmiennoprzecinkowych lub przetwarzanych macierzy.

Dodatkowo zostało również opracowanych wiele framework'ów do obliczeń z udziałem głębokich sieci neuronowych takich jak: Caffe, Caffe2, TensorFlow, Theano, PyTorch czy MXNet (zob. [porównania]). W kolejnych podsekcjach opisano szczegółowo wybrane architektury, które znajdują się w implementacjach powyższych framework'ów i charakteryzują się wprowadzeniem pewnych innowacyjnych rozwiązań.

4.3.1 AlexNet

Sieć AlexNet, której nazwa pochodzi od imienia głównego twórcy tej architektury Alexa Krizhevsky, zawiera blisko 60 milionów parametrów i 650 tysięcy neuronów. Architekturę zaprezentowano na Rys. 4.7



Rysunek 4.7: Topologia architektury AlexNet.

W skład topologii wchodzi pięć warstw konwolucyjnych i trzy typu fully-connected. Po pierwszej, drugiej i piątej warstwie konwolucyjnej występują operacje typu max-pool z jądrem o wymiarach 2×2 ⁴.

Pierwsza warstwa konwolucyjna przyjmuje na wejściu dane o wymiarze $227 \times 227 \times 3$, na których wykonywana jest operacja splotu z 96 filtrami z jądrem splotu o wymiarach

⁴autorzy pracy podają też przykłady użycia jąder o wymiarze 2×3 , które nakładają się w przestrzeni funkcji obrazowej

$11 \times 11 \times 3$ i krokiem 4. W rezultacie (uwzględniając również operację max-pool) objętość wynikowa przekazywana do kolejnej warstwy ma wymiar $27 \times 27 \times 96$. W drugiej warstwie konwolucyjnej wykonywana jest operacja splotu z 256 filtrami z jądrem o wymiarach $5 \times 5 \times 96$. Wymiar objętości wynikowej zostaje ponownie zredukowany poprzez operację max-pool do $13 \times 13 \times 256$. Kolejne 3 warstwy konwolucyjne są połączone bezpośrednio ze sobą. Trzecia warstwa zawiera 384 filtry o wymiarze $3 \times 3 \times 256$, w skład czwartej wchodzi 384 filtry o wymiarze $3 \times 3 \times 384$, a w piątej znajdują się 256 filtry ponownie o wymiarze $3 \times 3 \times 384$. Końcowe dwie warstwy typu FC zawierają po 4096 neuronów, a ostatnia zawiera tyle neuronów ile klas występuje w ostatecznym podziale - w oryginalnej pracy było to 1000 [AlexNet].

W celu lepszego zrozumienia przetwarzania sygnału wejściowego przez sieć poniżej przedstawiono przykład algorytmu wykorzystywanego dla pierwszej warstwy konwolucyjnej opisywanej topologii:

1. Z danych wejściowych o wymiarze $[227 \times 227 \times 3]$ wybierany jest co czwarty blok (zarówno wzdłuż wysokości jak i szerokości) o wymiarach $[11 \times 11 \times 3]$. Punkty krawędziowe, które stanowią margines potrzebny do wyliczenia splotu są zazwyczaj pomijane. W rezultacie otrzymywanych jest 217 punktów w każdym rzędzie i w kolumnie, w których mieści się $[55 \times 55]$ tj. 3025 bloków.
2. Zarówno $11 \times 11 \times 3 = 363$ wagi znajdujące się w 96 filtrach jak i wartości 363 punktów obrazowych znajdujących się 3025 blokach są przedstawiane w postaci macierzy A o wymiarach $[96 \times 363]$ i B o wymiarach $[363 \times 3025]$.
3. liczony jest iloczyn skalarny w postaci $A^T B = C$, gdzie nowa, wyjściowa macierz C ma wymiar $[96 \times 3025]$.
4. Resultat w postaci macierzy C ponownie przewymiarowywany jest na postać $[55 \times 55 \times 96]$.

W architekturze jako funkcję aktywacji neuronów wykorzystano ReLU, co znacząco przyspieszyło trening sieci. Dla przykładu uzyskano 6-krotne przyspieszenie treningu dla danych CIFAR-10 [CIFAR] w stosunku do tej samej topologii wykorzystującej funkcję aktywacji tanh.

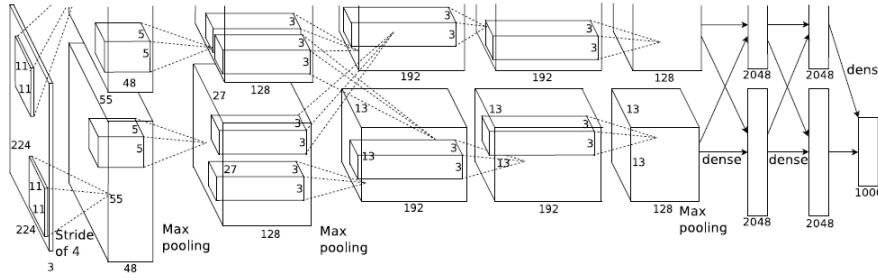
Ponieważ funkcja ReLU nie posiada górnego ograniczenia neurony teoretycznie mogą posiadać nieograniczone wartości funkcji aktywacji. W celu polepszenia kontrastu

między neuronami i wydobycia tych, które na tle innych się wyróżniają, zastosowano normalizację:

$$b_{x,y}^i = a_{x,y}^i / \left(k + \alpha \sum_{j=\max(0, i-n/2)}^{\min(N-1, i+n/2)} (a_{x,y}^j)^2 \right)^\beta \quad (4.17)$$

gdzie n to liczba filtrów znajdujących się w tej samej przestrzennej lokalizacji, N to suma wszystkich filtrów w warstwie, $a_{x,y}^i$ to wartość funkcji aktywacji neuronu po splocie funkcji obrazowej na pozycji (x, y) z filtrem i , a b to wynik normalizacji. Po zastosowaniu tej techniki autorom pracy udało się zredukować błąd klasyfikacji top-5 o wartość 1,2 punkta procentowego.

W kontekście zwiększenia efektywności treningu zastosowano powiększenie rozmiaru danych poprzez rotacje i modyfikacje funkcji obrazowej z wykorzystaniem czynników głównych (zob [AlexNet]), co zmniejszyło błąd top-1 o 1%. Zastosowano również technikę dropout opisaną w 4.2.1. Ostatecznie wprowadzono także trening z wykorzystaniem wielu GPU (zob. Rys. 4.8).



Rysunek 4.8: Topologia architektury AlexNet z podziałem na dwa akceleratory GPU.

Topologia z podziałem na 2 karty zwiększyła dwukrotnie sumaryczną pamięć i pozwoliła na koalokację parametrów sieci.

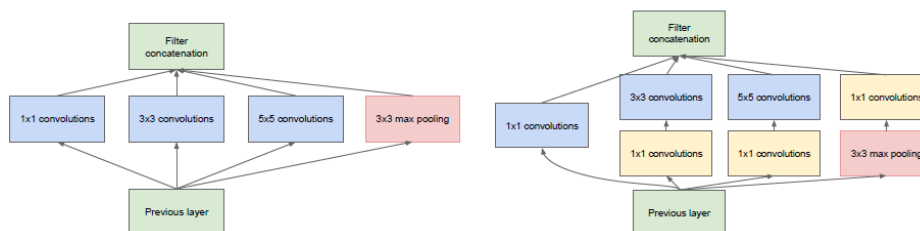
Praca Alexa Krizhevsky, Ilya Sutskever i Geoffrey'a Hinton zapoczątkowała wzrost zainteresowania technikami głębokiego uczenia się, co doprowadziło do publikacji kolejnych podobnych architektur. Do najbardziej znanych należą ZFNet z 2013 roku [ZFNet], gdzie m.in. zastosowano zmniejszenie wymiaru jądra stosowanego w filtrach pierwszej warstwy konwolucyjnej do 7×7 oraz VGGNet z 2014 roku, gdzie zastosowano większą liczbę warstw konwolucyjnych z mniejszym wymiarem jądra splotu. Innym pomysłem, który został zaprezentowany również w 2014 było pojawienie się nowych modułów w sieci GoogleNet, która dokładniej została opisana w kolejnej podsekcji.

4.3.2 GoogLeNet

Architekturę o nazwie GoogLeNet zaprezentowano w 2014 r. w pracy [GoogLeNet]. Nazwa architektury pochodzi od nazwy zwycięzkiego zespołu startującego w ILSVRC14, składającego się z pracowników firmy Google. Oryginalnie topologia składała się z 22 warstw i zawierała około 5 mln parametrów (12 razy mniej niż w przypadku sieci AlexNet).

Redukcję liczby parametrów przy jednoczesnym podwyższeniu dokładności klasyfikacji i lokalizacji obiektów (zob. [ILSCV]) udało się uzyskać poprzez poszukiwania konstrukcji optymalnych lokalnych topologii i ich połączeń. Mianowicie, wiadomo że duża część funkcji aktywacji neuronów przyjmuje wartość 0 lub jest redundatna z powodu wysokiej korelacji między sobą (zob. [Arora z GoogLeNet]). Matematyka dotycząca przetwarzania *macierzy rzadkich*, tj. gdzie przeważająca liczba elementów przyjmuje wartość 0, jest dobrze znana np. [3-GoogLeNet]. Jednak implementacje bibliotek do obliczeń związanych z algebrą liniową są zoptymalizowane pod kątem *macierzy gęstych*, gdzie przeważająca liczba elementów przyjmuje wartości różne od 0 (zob. [16, 9 googLeNet]).

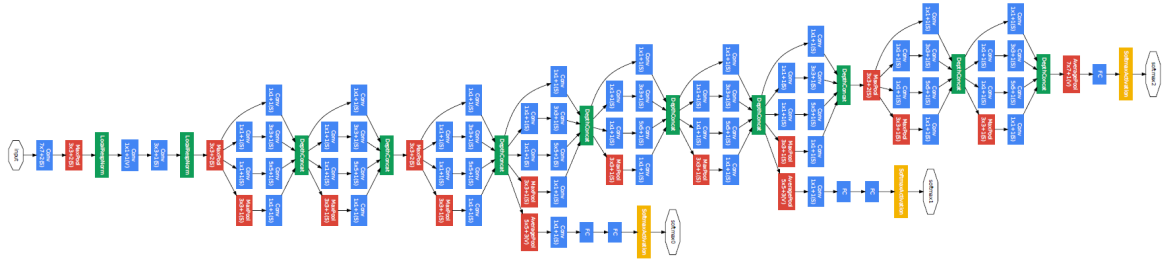
Ideą modułu iniepcji zaproponowanego przez twórców GoogLeNet jest aproksymacja rzadkich macierzy z użyciem komponentów o gęstej strukturze. Takie komponenty nazwano *modułami iniepcji* (ang. *inception modules*). Przykłady modułów iniepcji pokazano na Rys. 4.9



Rysunek 4.9: Topologia architektury AlexNet z podziałem na dwa akceleratory GPU.

Rys. 4.9 (a) przedstawia najwną formę modułu iniepcji, gdzie grupowane są operacje filtrów z jądrem o wymiarach 5×5 , 3×3 , 1×1 oraz operacja max-pool. Rys. 4.9 (b) prezentuje koncepcję zoptymalizowaną obliczeniowo gdzie filtry 1×1 służą do redukcji wymiarowości i używane są bezpośrednio przed splotami z bardziej wymagającymi obliczeniowo splotami z jądrami o wymiarach 5×5 i 3×3 .

Złożenie różnego rodzaju modułów dało topologię zaprezentowaną na Rys.



Rysunek 4.10: Topologia architektury GoogleNet

Dokładne zestawienie parametrów znajduje się w Tabeli 4.1

type	patch size/ stride	output size	depth	# 1×1	# 3×3 reduce	# 3×3	# 5×5 reduce	# 5×5	pool proj	params	ops
convolution	7×7/2	112×112×64	1							2.7K	34M
max pool	3×3/2	56×56×64	0								
convolution	3×3/1	56×56×192	2		64	192				112K	360M
max pool	3×3/2	28×28×192	0								
inception (3a)		28×28×256	2	64	96	128	16	32	32	159K	128M
inception (3b)		28×28×480	2	128	128	192	32	96	64	380K	304M
max pool	3×3/2	14×14×480	0								
inception (4a)		14×14×512	2	192	96	208	16	48	64	364K	73M
inception (4b)		14×14×512	2	160	112	224	24	64	64	437K	88M
inception (4c)		14×14×512	2	128	128	256	24	64	64	463K	100M
inception (4d)		14×14×528	2	112	144	288	32	64	64	580K	119M
inception (4e)		14×14×832	2	256	160	320	32	128	128	840K	170M
max pool	3×3/2	7×7×832	0								
inception (5a)		7×7×832	2	256	160	320	32	128	128	1072K	54M
inception (5b)		7×7×1024	2	384	192	384	48	128	128	1388K	71M
avg pool	7×7/1	1×1×1024	0								
dropout (40%)		1×1×1024	0								
linear		1×1×1000	1							1000K	1M
softmax		1×1×1000	0								

Tabela 4.1: Parametry architektury GoogleNet

Ważną cechą sieci GoogleNet jest brak warstw typu FC na zakończeniu, gdzie w przypadku sieci AlexNet znajdowało się około 90% parametrów. Końcowe wnioskowanie jest realizowane na podstawie wartości średniej z dwuwymiarowych map cech.

Dla lepszego zrozumienia idei redukcji wymiarowości realizowanej przez moduły iniepcji, podobnie jak w przypadku sieci AlexNet, przeanalizowane zostanie działanie pierwszego modułu w topologii z Rys. 4.10. Moduł zawiera 128 filtrów z jądrami o wymiarach 3×3 i 32 filtry z jądrami o wymiarach 5×5. Dane na wejściu modułu mają 192 kanały (zob. Tabela 4.1). Dla przykładu, rząd wielkości obliczeń operacji splotów 32 filtrów 5×5 wynosi $25 \times 32 \times 192 = 153\,600$ i dalej wzrastałby z głębokością sieci. W celu zapobiegnięcia nadmiarowi obliczeń stosowana jest redukcja z użyciem 16 filtrów

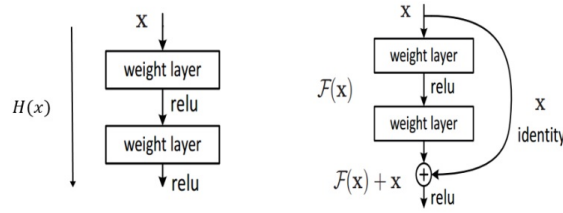
z jądrem o wymiarach 1×1 . W efekcie rząd wielkości obliczeń spada do $16 \times 192 + 25 \times 32 \times 16 = 15\,876$, co pozwala na dalsze budowanie wielowarstwowych struktur.

Topologia GoogLeNet jest wciąż rozwijana. Po pierwszej prezentacji pojawiły się kolejne modernizacje wprowadzające dodatkowe faktoryzacje modułów jak w Inception-v2 [Inception-v2], lub normalizacje wartości wynikowych poszczególnych warstw jak w Inception-v3 [Inception-v3]. Kolejny innowacyjny pomysł, bazujący na dodatkowych połączeniach między blokami, został wprowadzony w 2015 roku w sieci ResNet, która została opisana w kolejnej podsekcji.

4.3.3 ResNet

Jednym z najbardziej oczywistych pomysłów na polepszenie dokładności działania sieci neuronowych jest zwiększenie liczby warstw. Jednak wraz ze wzrostem liczby warstw, trening takich architektur z użyciem tradycyjnych metod gradientowych (takich jak algorytm wstecznej propagacji błędów) staje się mniej wydajny. Problem wynika z faktu, że zmiana wartości sygnału na wyjściu sieci w odpowiedzi na sygnał wejściowy jest mniejsza wraz ze wzrostem liczby warstw [ResNet]. W takiej sytuacji gradient wyliczany na podstawie sygnału będącego różnicą pomiędzy sygnałem wejściowym a wyjściowym może przyjmować wartości bliskie 0 uniemożliwiając progres uczenia się. Problem zanikającego gradientu (ang. *vanishing gradient problem*) rozwiązywany jest poprzez zastosowanie normalizacji oraz nieliniowych funkcji aktywacji, których przykłady zostały opisane w sekcji 4.3.1 oraz szeroko w literaturze np. w [ResNet 2,3,4]. Dzięki tym mechanizmom algorytm treningu głębokich sieci neuronowych w większej liczbie przypadków zbiega do użytecznego minimum lokalnego.

W momencie znalezienia takiego minimum dodanie kolejnych warstw i parametrów sieci jest redundatne, a nawet prowadzi do pogorszenia wyników treningu sieci, co związane jest z trudnościami optymalizacji przestrzeni wieloparametrycznych [Opt]. Zjawisko to nosi nazwę degradacji treningu (ang. *degradation problem*). Twórcy architektury ResNet zaproponowali rozwiązanie tego problemu poprzez implementację bloków rezydualnych (ang. *Residuum Units*) zawierających dodatkowe, skrótowe połączenia (ang. *skip connections*) pomiędzy wejściem a wyjściem bloków. Porównanie schematów funkcjonalnych nowych bloków i wcześniej istniejącego rozwiązania stosowanego np. w AlexNet został przedstawiony na Rys. 4.12.



Rysunek 4.11: Schemat funkcjonalny pojedynczego bloku w architekturze ResNet.

Ogólną postać równania bloku rezydualnego można zapisać następująco:

$$\begin{aligned} y_l &= h(x_l) + F(x_l, W_l), \\ x_{l+1} &= f(y_l), \end{aligned} \quad (4.18)$$

gdzie x_l i x_{l+1} stanowią sygnał wejściowy i wyjściowy l -tego bloku. F stanowi funkcję rezydualną optymalizowaną podczas treningu sieci, $h(x_l)$ stanowi funkcję przekształcenia sygnału x_l przekazywanego skrótowym połączeniem, f jest funkcją ReLU, a W stanowi macierz wag.

Funkcja $h(x_l)$ jest funkcją tożsamościową, a zatem $h(x_l) = x_l$. Żeby uzasadnić ten wybór należy rozważyć propagację gradientu wewnątrz sieci składającej się z bloków rezydualnych. Dla każdego L -tego bloku zachodzi równanie:

$$x_L = x_l + \sum_{i=l}^{L-1} F(x_i, W_i) \quad (4.19)$$

Korzystając z reguły łańcuchowej [ResNet-wyj-9] można zapisać równanie na gradient funkcji kosztu ε :

$$?? \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_L} \frac{\partial x_L}{\partial x_l} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_L} \left(1 + \frac{\partial}{\partial x_l} \sum_{i=l}^{L-1} F(x_i, W_i) \right) \quad (4.20)$$

z czego wynika, że gradient może być podzielony na dwie addytywne składowe: (1) $w = \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_L}$ propagowaną bez wpływu na warstwy zawierające wagi i (2) $\lambda = \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_L} \frac{\partial}{\partial x_l} \sum_{i=l}^{L-1} F(x_i, W_i)$ propagowaną przez nie.

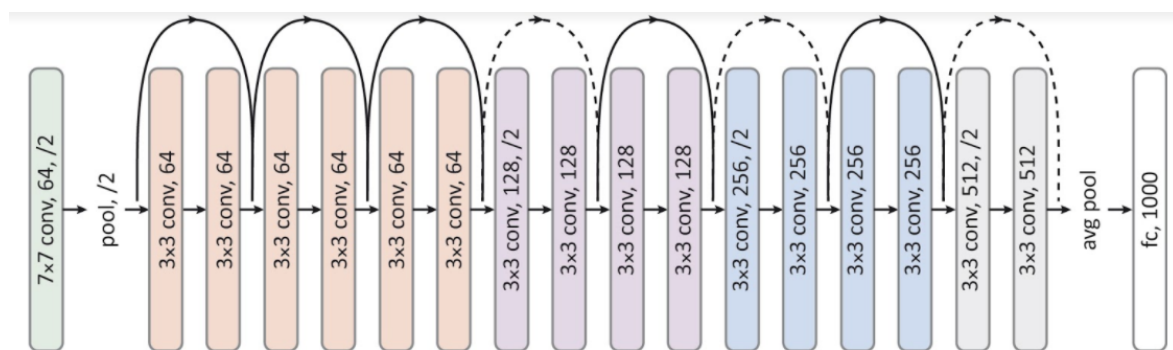
Przykład propagacji gradientu w sieci składającej się z trzech bloków wyglądałby następująco:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_0} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_3} * (w_2 + \lambda_2) * (w_1 + \lambda_1) * (w_0 + \lambda_0) \quad (4.21)$$

Przyjmując, że wartości w są zazwyczaj znormalizowane do przedziału $(-1;1)$ można rozważyć 4 istotne przypadki:

1. $\lambda = 0$ – nie ma skrótowych połączeń, co odpowiada płaskiej strukturze sieci. Ponieważ wartości w są z przedziału $(-1;1)$ dodawanie kolejnych warstw wzmacnia wcześniej omówiony efekt zanikającego gradientu.
2. $\lambda > 1$ – z każdą warstwą, sumaryczna wartość gradientu zwiększa się inkrementalnie, co nazywane jest *problemem eksplozji gradientu* (ang. *exploding gradient problem*).
3. $\lambda < 1$ – przy założeniu, że $w + \lambda < 1$, dla sieci składających się z wielu warstw występuje problem zaniku gradientu, jak w przypadku 1. Natomiast, gdy $w + \lambda > 1$ podobnie jak w przypadku 2 może występować problem eksplozji gradientu.
4. $\lambda = 1$ – wartości w są inkrementowane dokładnie o 1, co eliminuje problemy podane w przypadkach 1, 2 i 3 i stanowiło motywację dla twórców architektury ResNet dla wyboru funkcji tożsamościowej $h(x_l)$.

Dokładny opis matematyczny funkcjonowania bloków rezydualnych wraz z dowodami znajduje się w [ResNet-wyj]. Przykład topologii sieci składającej się z 8 bloków i łącznie 18 warstw tzw. ResNet-18, przedstawiono na Rys.



Rysunek 4.12: Topologia architektury ResNet-18.

Pierwsza warstwa konwolucyjna zawiera filtry z jądrem splotu o wymiarach 7×7 . W kolejnych zastosowano wymiar 3×3 . Zastosowanie mniejszych wymiarów jąder splotu niż w AlexNet oraz podobnie jak w przypadku sieci GoogLeNet wyliczenie na końcu wartości średniej z dwuwymiarowych map cech zredukowało liczbę parametrów.

Architektura ResNet-18 jest najmniejszą z pojawiających się w literaturze przykładów. W praktyce, z powodzeniem wykorzystywano topologie składające się nawet z 1202 warstw [ResNet]. W 2016 roku zaprezentowano hybrydę sieci GoogleNet i ResNet [InceptionResNet]. Pracowano również nad bardziej złożonymi blokami, co w konsekwencji doprowadziło w 2017 roku do zaprezentowania architektury ResNetX, która w wielu testach klasyfikacji różnych zbiorów okazała się być lepsza niż poprzednicy [ResNetX]. Ciekawy przegląd dotyczący historii tych prac można znaleźć w [<https://towardsdatascience.com/an-overview-of-resnet-and-its-variants-5281e2f56035>].

Sieć ResNet i jej warianty dla wielu testowych zbiorów danych takich jak ImageNet, CIFAR czy COCO osiągnęły dokładność klasyfikacji porównywalną z możliwościami ludzkiego obserwatora. Dalszy progres był możliwy m.in. dzięki zastosowaniu synergii wielu modeli, co zostało opisane w kolejnej podsekcji.

4.3.4 Złożenia

Uczenie złożenia sieci (ang. *ensemble learning*) polega na wykorzystywaniu kilku modeli bazowych i wybranej metody ich synergii. Koncepcja nie jest nowa i stosowana była już przed etapem kiedy to metody głębokiego uczenia się zyskały na popularności. Dobry przegląd wcześniejszych prac bazujących na tradycyjnym podejściu do uczenia maszynowego można znaleźć w [Ensemble 1-3].

W kontekście głębokiego uczenia się stosowane są różne metody kombinacji modeli bazowych [Ensemble]. Jako często stosowane przykłady można podać: uśrednianie, głosowanie, klasyfikacja Bayesa, generalizację stosów. Zostaną one omówione w kolejnych paragrafach:

Uśrednianie

Uśrednianie jest prostą metodą kombinacji wyników predykcji. Najczęściej stosowane jest uśrednianie bez wag, gdzie suma wyników predykcji modeli bazowych podzielona jest przez liczbę tych modeli. Uśredniać można bezpośrednio wyniki finalnej predykcji jak również prawdopodobieństwa przynależności do odpowiednich klas, które są np. wynikiem funkcji softmax.

Główną zaletą uśredniania jest redukcja wariancji. Jest ona tym większa im bardziej

niekorelowane są wyniki predykcji modeli bazowych. Pomimo prostoty tego rodzaju koncepcja odnosiła już sukcesy m.in. w lasach losowych (Breiman, 2001).

Zastosowanie uśredniania przy silnie odstających od średniej najgorszych predykcjach znacząco obniża dokładność całego złożenia. Dlatego przy silnie nieheterogenicznych modelach bazowych dających bardzo różne wyniki często poszukiwane są inne metody.

Głosowanie

W głosowaniu stosuje się mechanizm zliczania przewidzianych przez modele bazowe etykiet. Etykieta, która została wybrana przez największą liczbę modeli bazowych jest obierana jako wynik ostatecznej predykcji. Jest to tzw. *głosowanie większościowe*.

W porównaniu do uśredniania, głosowanie jest mniej czułe na predykcje pojedynczych modeli. Wykorzystuje jednak jedynie informacje o przewidzianych etykietach, co utrudnia konstrukcje bardziej wyszukanych rozwiązań.

Klasyfikacja Bayesa

W przypadku tej metody, każdy model bazowy j postrzegany jest jako hipoteza h_j . Każda z hipotez posiada wagę proporcjonalną do prawdopodobieństwa zdarzenia, w którym dany zbiór danych trenujących zostałby wybrany z ogółu danych gdyby dana hipoteza była prawdziwa. Jest to tzw. optymalna klasyfikacja Bayesa, którą można zapisać następującym równaniem:

$$y = \underset{c_j \in C}{\operatorname{argmax}} \sum_{h_i \in H} P(c_j | h_i) P(T | h_i) P(h_i) \quad (4.22)$$

gdzie y to przewidziana etykieta, C jest zbiorem wszystkich możliwych klas, H to przestrzeń hipotez, a T to zbiór danych trenujących.

W praktyce z uwagi na dużą złożoność obliczeniową optymalną klasyfikację Bayesa wykorzystuje się rzadko. Częściej stosowane są techniki BPA (od ang. *Bayesian parameter averaging*), BMA (od ang. *Bayesian model averaging*), czy też BMC (od ang. *Bayesian model combination*) (zob. [BPA, BMA, BMC]), które aproksymują optymalną metodę.

Generalizacja stosów

Idea generalizacji stosów oryginalnie została zaproponowana w [Wolpert, 1992]. Wykorzystana została koncepcja meta-uczenia, a zatem konstrukcja nadrzędnego klasyfikatora, którego zadaniem jest wybór optymalnego wektora wag a dla stosu s predykcji dla danych x :

$$s(x) = \sum_{i=1}^m a_i s_i(x) \quad (4.23)$$

W praktyce predykcje z modeli bazowych składowane są na stosie, a następnie klasyfikator nadrzędny wykorzystuje je jako dane do swojego treningu poprawnych wartości a wykorzystując jako odniesienie znane, poprawne etykiety.

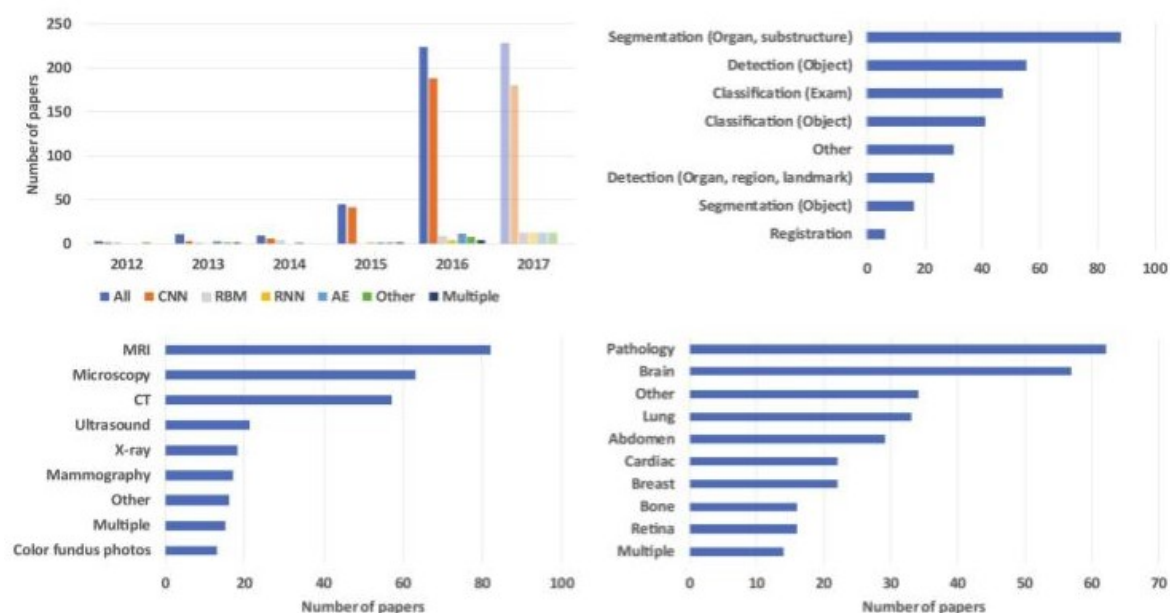
4.4 Zastosowania w medycynie

W 1994 roku ukazała się pierwsza praca, która w praktyce wykorzystywała mechanizmy związane z głębokim uczeniem do przetwarzania obrazów medycznych [Zhang, 1994]. Użyte wówczas sieci nazywano sieciami typu *shift-invariant*. Zastosowanie ich pozwoliło na eliminację 55% FP otrzymywanych przy wcześniejszych metodach stosowanych do detekcji skupisk mikrozwapnień w mammografiach. *Shift-invariant* oznaczało, że przesunięcie obrazu wejściowego nie powodowało zmian w klasyfikacji, co jest istotną cechą z uwagi na implementację toru akwizycji danych w praktyce radiologicznej.

Po roku 2012 nastąpił znaczący wzrost zainteresowania metodami głębokiego uczenia się w medycynie. Obrazuje to praca z 2017, w której przytoczono statystyki medycznych publikacji zawierających słowa kluczowe związane z głębokim uczeniem się [arXiv:1702.05747v2]. Najważniejsze dane przedstawiono a Rys. 4.13.

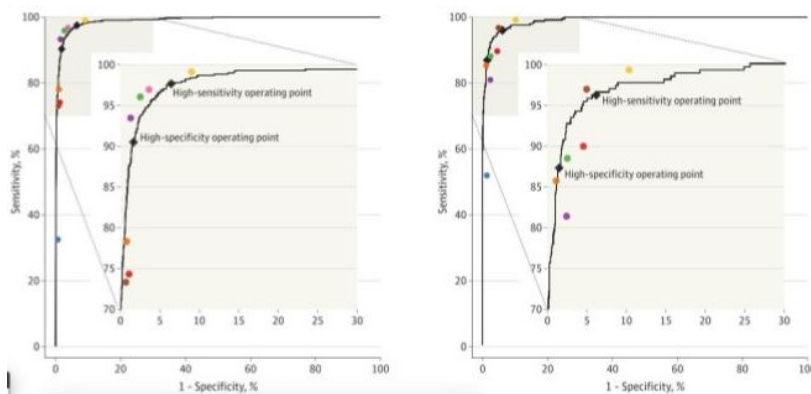
Widoczny wzrost liczby publikacji nastąpił począwszy od 2015, co związane było z kilkuletnią adaptacją nowych metod w dziedzinie przetwarzania obrazów medycznych i gromadzeniem odpowiednich danych. Rok 2016 i 2017 były pod pewnym względem przełomowe gdyż pojawiało się coraz więcej prac naukowych, w których przedstawiano rezultaty dokładności klasyfikacji medycznych zbiorów danych na poziomie dorównującym ekspertom dziedzinowym.

Dla przykładu, w Listopadzie 2016 ukazał się praca grupy Google Research, Mountain View, Kalifornia [https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/27898976], gdzie zastosowano sieć GoogLeNet w wersji inception-v3 do zautomatyzowanej detekcji retinopatii



Rysunek 4.13: Statystyki dotyczące publikacji medycznych zawierających słowa kluczowe związane z głębokim uczeniem się.

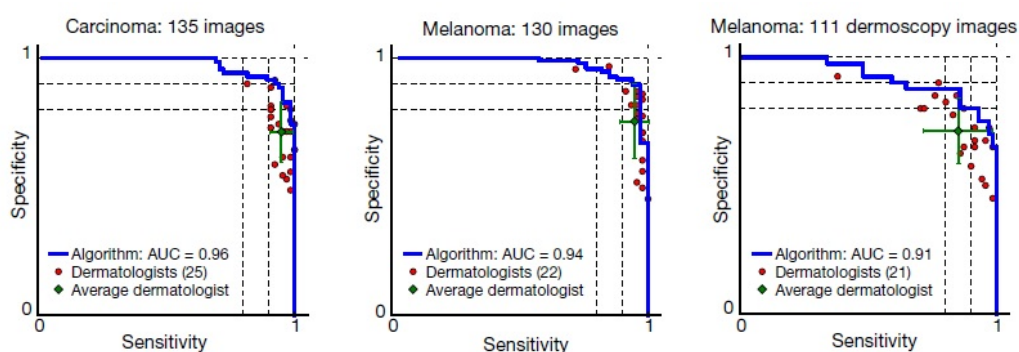
cukrzycowej i cukrzycowego obrzęku plamki w obrazach dna oka. Wyniki porównano z panelem składającym się z 7 ekspertów, okulistów. Porównanie przedstawiono na Rys. 4.14.



Rysunek 4.14: Porównanie automatycznej klasyfikacji retinopatii cukrzycowej i cukrzycowego obrzęku plamki z oceną panelu ekspertów

Na wykresach dla dwóch zadań klasyfikacyjnych umieszczono krzywe reprezentujące zależność swoistości od czułości dla algorytmu automatycznego oraz 7 punktów oznaczających wynik oceny każdego z ekspertów-okulistów. Ogółem mniej niż połowa ekspertów uzyskała lepszy wynik niż algorytm sztucznej inteligencji.

Kolejna ciekawa praca pojawiła się w czasopiśmie *nature* w styczniu 2017 i traktowała o automatycznej detekcji raka skóry na zdjęciach [Esteva, 2017]. Autorzy wykorzystali dane składające się z 129,450 obrazów klinicznych, na których zobrazowano 2,032 różne schorzenia skóry. Ponownie do klasyfikacji wykorzystano sieć GoogleNet w wersji inception-v3. Wyniki klasyfikacji automatycznej porównano z oceną przeprowadzoną przez 21 certyfikowanych dermatologów. Przykład porównania zaprezentowano na Rys. 4.15.



Rysunek 4.15: Porównanie automatycznej klasyfikacji 3 chorób skóry z oceną ekspertów dermatologów

Tym razem umieszczono odwrotną zależność (tj. czułość od swoistości), czerwonymi punktami oznaczono wynik oceny ekspertów, a zielonym krzyżykiem wynik uśrednienia oceny eksperckiej. W każdym przypadku średnia ocena była gorsza od automatycznej klasyfikacji.

Obrazy medyczne nie są jedynymi danymi, które z powodzeniem są przetwarzane za pomocą metod głębokiego uczenia się. W lipcu 2017, przez grupę ze Stanford University została opublikowana praca dotycząca klasyfikacji arytmii na podstawie szeregów czasowych zapisanych na elektrokardiogramach [Rajpurkar, 2017]. Autorzy wykorzystali dane z 64,121 elektrokardiogramów, próbkowanych z częstotliwością 200 Hz, pochodzących od 29,163 pacjentów. Zaprojektowano dedykowaną, 34-warstwową sieć konwolucyjną do detekcji 12 różnych dysfunkcji pracy serca, pracy prawidłowej i szumów (łącznie 14 klas). Wyniki klasyfikacji porównano z oceną prowadzoną przez 3 kardiologów. Średnia dokładność klasyfikacji automatycznej wyniosła 80% , natomiast manualnej 72%.

Naturalnie, podobnych przykładów zostało opublikowanych dużo więcej. Architektura AlexNet z sukcesem była użyta do detekcji polipów w kolonoskopii [AlexNet-kolo, 2017]. Sieć ResNet sprawdziła się w badaniach w Mayo Clinic Rotschester, doty-

czących radiogenomiki i rozróżnienia zmian w mózgu bez konieczności biopsji [Mayo]. Złożenia natomiast z sukcesem zostały zaaplikowane w pracach dotyczących detekcji raka płuc, gdzie modele bazowe analizowały różne skale problemu [LungChallenge]. W wielu pracach raportuje się dokładność klasyfikacji automatycznej znacząco przewyższającą możliwości dziedzinowych ekspertów np. [<https://doi.org/10.1016/j.cell.2018.03.040>, FNP].

Przytoczone prace pokazują, że dla szczególnych przypadków pewien element pracy eksperta zajmującego się danymi medycznymi (np. radiologa) może być z sukcesem wspomagany przez algorytmy głębokiego uczenia się. Należy jednak podkreślić, że jest również szereg problemów wiążących się z wykorzystaniem sztucznej inteligencji w medycynie. Do najważniejszych należą:

1. Gromadzenie dużych zbiorów danych z odpowiednimi etykietami.
2. Wykorzystanie heterogenicznych danych pochodzących np. z wielu urządzeń lub modalności.
3. Kalibracja i szacowanie niepewności wyników modelu.
4. Unifikacja modeli wykonujących podobne zadania.
5. Minimalizacja liczby parametrów modelu przy zachowaniu satysfakcjonującego poziomu dokładności.

Dyskusja na temat tych problemów wciąż jest tematem wielu paneli dyskusyjnych i debat konferencyjnych np. [NVIDIA 1-2]. Najbardziej zaawansowane prace dotyczą problemu gromadzenia dużych zbiorów danych medycznych, co wymaga bliskiej współpracy ekspertów medycznych z ekspertami od uczenia maszynowego. Często konieczna jest również modyfikacja bądź tworzenie dedykowanych programów do akwizycji danych medycznych. Jako przykłady takich inicjatyw można wymienić programy Stanford Medicine [MedicalImageNet], Harvard School of Medicine [10 mln images] czy Massachusetts Hospital [NVIDIA 2018]. Ponadto w roku 2018 na konferencji NVIDIA GTC w San Jose (Kalifornia) Amerykańskie Stowarzyszenie Radiologii i stowarzyszenie MICCAI (od ang. *Medical Image Computing and Computer Assisted Intervention*) ogłosiły porozumienie, co do wspólnej współpracy mającej na celu eliminację barier legislacyjnych związanych ze współpracą przy pozyskiwaniu odpowiednich danych dla wykorzystania algorytmów uczenia maszynowego.

Autor tej rozprawy jest świadom ograniczeń jakie są związane z wykorzystaniem algorytmów głębokiego uczenia się. Jednocześnie, duża liczba sukcesów, które pojawiły się w ostatnich latach w aplikacjach medycznych stanowi silną motywację dla autora do przeprowadzenia własnych badań zaprezentowanych w następnym rozdziale.

Rozdział 5

Nowa metoda oceny procesu gojenia ścięgna Achillesa

5.1 Metodyka

5.2 Rozróżnienie ścięgna zdrowego i po zerwaniu

5.3 Obliczanie krzywych gojenia

5.3.1 Topologia sieci

5.3.2 Redukcja wymiarowości

5.3.3 Miara wygojenia

Rozdział 6

Wyniki i walidacja

- 6.1 Ocena procesu gojenia z użyciem nowej metody
- 6.2 Porównanie z wynikami z rezonansu magnetycznego
- 6.3 Porównanie z wynikami ultrasonografii
- 6.4 Porównanie z wynikami badań biomechanicznych

Rozdział 7

Podsumowanie

Bibliografia

- [1] Witold Pokorski and Graham G. Ross. Flat directions, string compactification and three generation models. 1998.

Dodatek A

AchillesDL: System komputerowego wspomagania oceny gojenia ścięgien i więzadeł