Taller de Aprendizaje Automático

Implementación de redes neuronales

Instituto de Ingeniería Eléctrica
Facultad de Ingeniería

UNIVERSIDAD
DE LA REPÚBLICA
URUGUAY

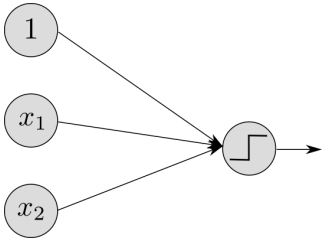
1. Perceptrón
2. Perceptrón multicapa
3. Propagación hacia atrás
4. Funciones de activación
5. Aproximación versus generalización
6. Regularización y validación
7. Implementación en Keras y TensorFlow

Perceptrón

$$h(\mathbf{x}) = \text{sign}\left(\left(\sum_{i=1}^{d} w_i x_i\right) + w_0\right)$$

$$h(\mathbf{x}) = \text{sign}\left(\sum_{i=0}^{d} w_i x_i\right)$$

$$h(\mathbf{x}) = \text{sign}(\mathbf{w}^\intercal \mathbf{x})$$

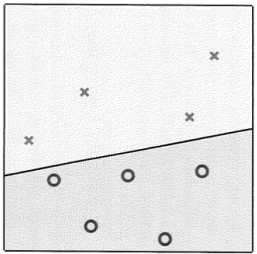


Algoritmo de aprendizaje:

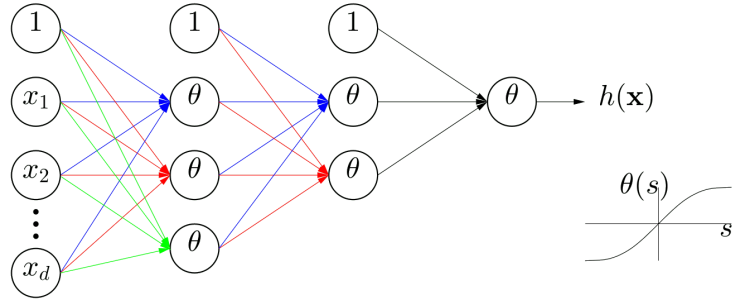
$$(\mathbf{x}_1, y_1), (\mathbf{x}_2, y_2), \ldots, (\mathbf{x}_N, y_N)$$

$$\text{sign}(\mathbf{w}^\intercal \mathbf{x}_n) \neq y_n$$

$$\mathbf{w}^{\text{new}} \leftarrow \mathbf{w} + y_n \mathbf{x}_n$$



Perceptrón multicapa



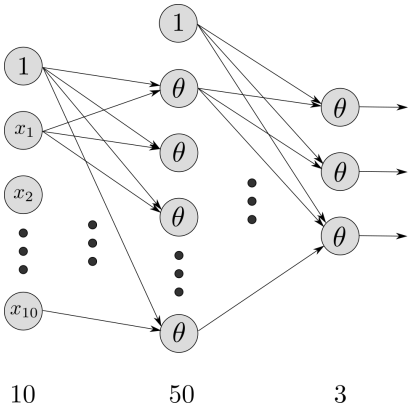
$$x_j^{(l)} = \theta(s_j^{(l)}) = \theta\left(\sum_{i=0}^{d^{(l-1)}} w_{ij}^{(l)} x_i^{(l-1)}\right)$$

$$x_1^{(0)} \dots x_{d^{(0)}}^{(0)} \to \cdots \to x_1^L = h(\mathbf{x})$$

$$w_{ij}^{(l)} = \begin{cases} 1 \leq l \leq L & \text{layers} \\ 0 \leq i \leq d^{(l-1)} & \text{inputs} \\ 1 \leq j \leq d^{(l)} & \text{outputs} \end{cases}$$

Ejercicio

Considere un perceptrón multicapa con 10 entradas, seguido de una capa oculta con 50 neuronas y una capa de salida con 3 neuronas. Sea m el tamaño del lote.



1. ¿Cuál es la dimensión de la matriz $\mathbf{X}$?
2. ¿Cuál es la dimensión de $\mathbf{W}_h$ y $\mathbf{b}_h$?
3. ¿Cuál es la dimensión de $\mathbf{W}_o$ y $\mathbf{b}_o$?
4. ¿Cuál es la dimensión de la matriz $\mathbf{Y}$?
5. Escriba la ecuación para calcular la salida.

$\mathbf{X} : (m \times 10)$, $\mathbf{W}_h : (10 \times 50)$, $\mathbf{b}_h : (50)$

$\mathbf{W}_h : (50 \times 3)$, $\mathbf{b}_o : (3)$, $\mathbf{Y} : (m \times 3)$

$\mathbf{Y}^* = \theta\left(\theta(\mathbf{X}\mathbf{W}_h + \mathbf{b}_h)\mathbf{W}_o + \mathbf{b}_o\right)$

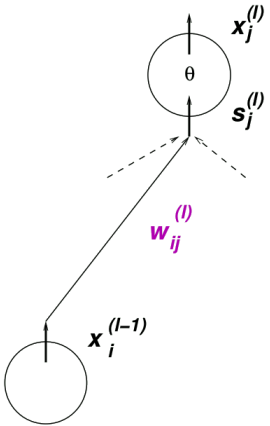
Propagación hacia atrás

Backpropagation*: gradiente descendente eficiente

$$\nabla e(\mathbf{w}) : \frac{\partial e(\mathbf{w})}{\partial w_{ij}^{(l)}} \; \forall i, j, l \qquad \frac{\partial e(\mathbf{w})}{\partial w_{ij}^{(l)}} = \frac{\partial e(\mathbf{w})}{\partial s_j^{(l)}} \times \frac{\partial s_j^{(l)}}{\partial w_{ij}^{(l)}}$$

$$\frac{\partial s_j^{(l)}}{\partial w_{ij}^{(l)}} = x_i^{(l-1)} \qquad \frac{\partial e(\mathbf{w})}{\partial s_j^{(l)}} = \delta_j^{(l)}$$

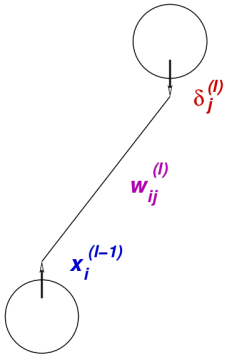
se calcula $\delta_1^{(L)}$ (última capa) y se propaga hacia atrás



*D. E. Rumelhart, G. E. Hinton, and R. J. Williams, "Learning representations by back-propagating errors," *Nature*, vol. 323, no. 6088, pp. 533–536, 1986

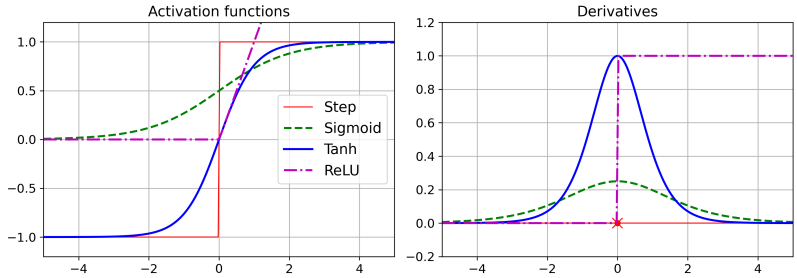
Propagación hacia atrás

1: Initialize all weights $w_{ij}^{(l)}$ at random
2: **for** $t = 0, 1, 2, \ldots$ **do**
3: Pick $n \in \{1, 2, \cdots, N\}$
4: *Forward:* Compute all $x_j^{(l)}$
5: *Backward:* Compute all $\delta_j^{(l)}$
6: Update the weights: $w_{ij}^{(l)} \leftarrow w_{ij}^{(l)} - \eta\, x_i^{(l-1)} \delta_j^{(l)}$
7: Iterate to the next step until it is time to stop
8: Return the final weights $w_{ij}^{(l)}$



Funciones de activación

- Sigmoid : $\theta(x) = \frac{1}{1+e^{-s}}$
- Tanh : $\theta(x) = \tanh(x) = \frac{e^{s}-e^{-s}}{e^{s}+e^{-s}}$
- ReLU : $\theta(x) = \max(0, x)$



Pregunta

¿Para qué necesitamos funciones de activación? ¿Sería suficiente con funciones lineales?

Aproximación versus generalización

Teorema de aproximación universal

Una red neuronal prealimentada (feed-forward) con una única capa oculta y un número finito de neuronas, puede aproximar cualquier función continua en un espacio compacto de $\mathbb{R}^n$.*†

- el ancho de la red debe ser exponencialmente grande
- aproximación universal para redes profundas de ancho acotado ‡

Generalización

Las redes neuronales tienen tendencia al sobreajuste.

- resultados teóricos sobre error de generalización (d_{VC})
- validación y regularización para prevenir sobreajuste

*G. Cybenko, "Approximation by superpositions of a sigmoidal function," *Mathematics of Control, Signals and Systems*, vol. 2, no. 4, pp. 303–314, 1989

†K. Hornik, "Approximation capabilities of multilayer feedforward networks," *Neural Networks*, vol. 4, no. 2, pp. 251–257, 1991

‡Z. Lu, H. Pu, F. Wang, Z. Hu, and L. Wang, "The expressive power of neural networks: A view from the width," in *Advances in NIPS*, vol. 30, 2017

Regularización y validación

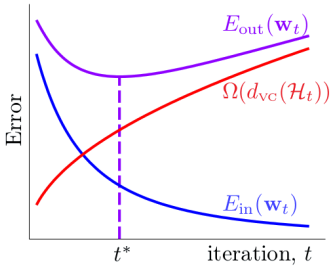
- Ridge (weight decay):

  Error con penalización sobre la complejidad del modelo.

$$E_{aug}(\mathbf{w}) = E_{in}(\mathbf{w}) + \frac{\lambda}{N}\sum_{i,j,l}(w_{ij}^{(l)})^2$$

- Early stopping:

  Se detiene el entrenamiento antes de sobreajustar, evaluando en validación.



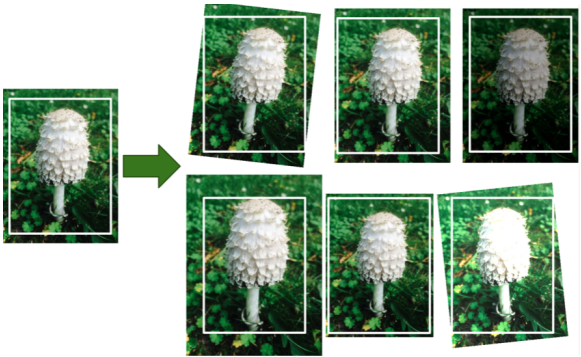
Regularización y validación

- **Dropout**

  Ignorar aleatoriamente algunas neuronas (10 a 50%) en cada paso de entrenamiento. Se obtiene una red menos sensible a cambios en la entrada y menos sobreajustada.

- **Data augmentation**

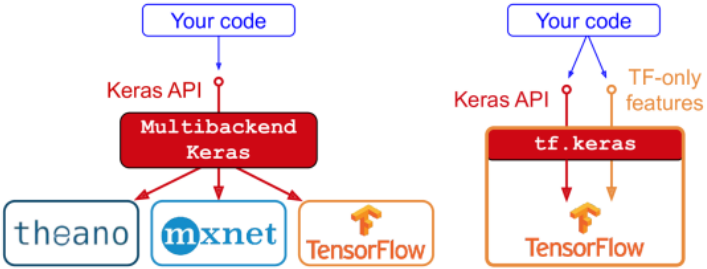
  Aumentar artificialmente los datos de entrenamiento mediante transformaciones (realistas).



Keras y TensorFlow

Keras API de alto nivel para aprendizaje profundo

TensorFlow biblioteca para aprendizaje profundo




```
>>> import tensorflow as tf
>>> from tensorflow import keras
```

Clasificación de imágenes

```
fashion_mnist = keras.datasets.fashion_mnist
(X_train_full, y_train_full), (X_test, y_test) = fashion_mnist.load_data()

X_valid, X_train = X_train_full[:5000] / 255., X_train_full[5000:] / 255.
y_valid, y_train = y_train_full[:5000], y_train_full[5000:]
X_test = X_test / 255.
```

Definición del modelo

```
model = keras.models.Sequential([
    keras.layers.Flatten(input_shape=[28, 28]),
    keras.layers.Dense(300, activation="relu"),
    keras.layers.Dense(100, activation="relu"),
    keras.layers.Dense(10, activation="softmax")
])

model.summary()
```

```
Model: "sequential"
_________________________________________________________________
Layer (type)                 Output Shape              Param #
=================================================================
flatten (Flatten)            (None, 784)               0
_________________________________________________________________
dense (Dense)                (None, 300)               235500
_________________________________________________________________
dense_1 (Dense)              (None, 100)               30100
_________________________________________________________________
dense_2 (Dense)              (None, 10)                1010
=================================================================
Total params: 266,610
```

softmax

regresión logística multiclase

$$\sigma(\mathbf{s}(\mathbf{x}))_k = \frac{e^{s_k(\mathbf{x})}}{\sum_{j=1}^{K} e^{s_j(\mathbf{x})}}$$

- convierte K valores reales a que sumen 1
- para clases excluyentes

$$\hat{y} = \underset{k}{\operatorname{argmax}}\ \sigma(\mathbf{s}(\mathbf{x}))_k$$

Inicialización de pesos

```
hidden1 = model.layers[1]
weights, biases = hidden1.get_weights()

>>> weights
array([[ 0.02448617, -0.00877795, -0.02189048, ..., -0.02766046,
         0.03859074, -0.06889391],
       ...,
       [-0.06022581,  0.01577859, -0.02585464, ..., -0.00527829,
         0.00272203, -0.06793761]], dtype=float32)

>>> weights.shape
(784, 300)

>>> biases
array([0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0.,
       0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0.,
       ...,
       0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0.,
       0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0.], dtype=float32)

biases.shape
(300,)
```

Compilación del modelo

```
model.compile(loss="sparse_categorical_crossentropy",
              optimizer="sgd",
              metrics=["accuracy"])
```

cross-entropy loss

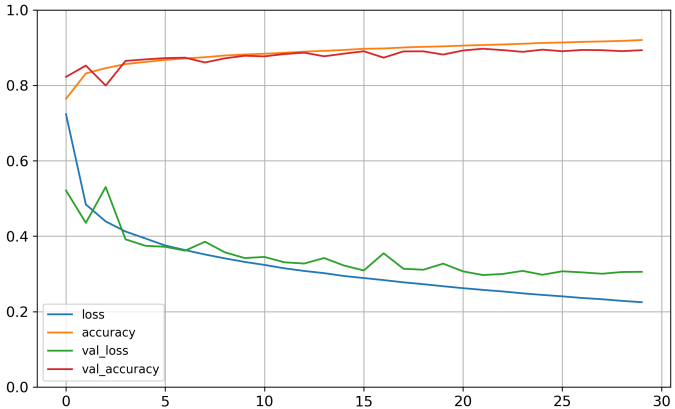
- `binary_crossentropy`
- `categorical_crossentropy`
- `sparse_categorical_crossentropy`

$$J(\mathbf{w}) = -\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}[y_n \log \hat{y}_n + (1-y_n)\log(1-\hat{y}_n)]$$

$$J(\mathbf{w}) = -\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\sum_{k=1}^{K} y_n^k \log \hat{y}_n^k$$

Entrenamiento del modelo

```
history = model.fit(X_train, y_train, epochs=30,
                    validation_data=(X_valid, y_valid))
```



Evaluación del modelo

```
>>> model.evaluate(X_test, y_test)
313/313 [==============================] - 1s 2ms/step - loss: 0.3382 - accuracy: 0.8822
[0.3381877839565277, 0.8822000026702881]

>>> y_pred = np.argmax(model.predict(X_new), axis=-1)
>>> y_pred
array([9, 2, 1])
```

Ankle boot

Pullover

Trouser

Guardando y cargando el modelo

```
model = keras.models.Sequential([...])
model.compile(...)
history = model.fit(..)

model.save("my_keras_model.h5")

model = keras.models.load_model("my_keras_model.h5")
model.predict(X_new)
```

Ejercicios

Estudie la implementación de un MLP aplicado al problema de `california_housing`.

Pregunta de salida

¿Cuáles son los hiperparámetros de un perceptrón multicapa? ¿Cómo elegiría sus valores?

Referencias


D. E. Rumelhart, G. E. Hinton, and R. J. Williams, "Learning representations by back-propagating errors," *Nature*, vol. 323, no. 6088, pp. 533–536, 1986.


G. Cybenko, "Approximation by superpositions of a sigmoidal function," *Mathematics of Control, Signals and Systems*, vol. 2, no. 4, pp. 303–314, 1989.


K. Hornik, "Approximation capabilities of multilayer feedforward networks," *Neural Networks*, vol. 4, no. 2, pp. 251–257, 1991.


Z. Lu, H. Pu, F. Wang, Z. Hu, and L. Wang, "The expressive power of neural networks: A view from the width," in *Advances in NIPS*, vol. 30, 2017.


A. Géron, *Hands-On Machine Learning with Scikit-Learn, Keras, and TensorFlow, 3rd Edition*. O'Reilly Media, Inc., 2022.