



Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο

Σχολή Ηλεκτρολόγων Μηχανικών
και Μηχανικών Υπολογιστών

Τομέας Συστημάτων Μετάδοσης Πληροφορίας και
Τεχνολογίας Υλικών

**Χρήση τεχνικών βαθιάς μάθησης για την αναγνώριση της
νόσου Alzheimer από τροπικότητες δομικής μαγνητικής
τομογραφίας**

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

ΠΑΠΠΑΣ ΙΩΑΝΝΗΣ ΝΙΚΟΛΑΟΣ

Επιβλέπων : Διονύσιος - Δημήτριος Κουτσούρης
Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Αθήνα, Νοέμβριος 2019



Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο

Σχολή Ηλεκτρολόγων Μηχανικών
και Μηχανικών Υπολογιστών

Τομέας Συστημάτων Μετάδοσης Πληροφορίας και
Τεχνολογίας Υλικών

**Χρήση τεχνικών βαθιάς μάθησης για την αναγνώριση της
νόσου Alzheimer από τροπικότητες δομικής μαγνητικής
τομογραφίας**

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

ΠΑΠΠΑΣ ΙΩΑΝΝΗΣ ΝΙΚΟΛΑΟΣ

Επιβλέπων : Διονύσιος - Δημήτριος Κουτσούρης
Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Εγκρίθηκε από την τριμελή εξεταστική επιτροπή την 1η Νοεμβρίου 2019.

.....
Διονύσιος - Δημήτριος Κουτσούρης
Καθηγητής Ε.Μ.Π.

.....
Γεώργιος Ματσόπουλος
Καθηγητής Ε.Μ.Π.

.....
Παναγιώτης Τσανάκας
Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Αθήνα, Νοέμβριος 2019

.....
Παππάς Ιωάννης Νικόλαος

Διπλωματούχος Ηλεκτρολόγος Μηχανικός και Μηχανικός Υπολογιστών Ε.Μ.Π.

Copyright © Παππάς Ιωάννης Νικόλαος, 2019.

Με επιφύλαξη παντός δικαιώματος. All rights reserved.

Απαγορεύεται η αντιγραφή, αποθήκευση και διανομή της παρούσας εργασίας, εξ ολοκλήρου ή τμήματος αυτής, για εμπορικό σκοπό. Επιτρέπεται η ανατύπωση, αποθήκευση και διανομή για σκοπό μη κερδοσκοπικό, εκπαιδευτικής ή ερευνητικής φύσης, υπό την προϋπόθεση να αναφέρεται η πηγή προέλευσης και να διατηρείται το παρόν μήνυμα. Ερωτήματα που αφορούν τη χρήση της εργασίας για κερδοσκοπικό σκοπό πρέπει να απευθύνονται προς τον συγγραφέα.

Οι απόψεις και τα συμπεράσματα που περιέχονται σε αυτό το έγγραφο εκφράζουν τον συγγραφέα και δεν πρέπει να ερμηνευθεί ότι αντιπροσωπεύουν τις επίσημες θέσεις του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου.

Περίληψη

Στην παρούσα διπλωματική εργασία εξετάζεται το πρόβλημα της αναγνώρισης της νόσου Alzheimer με χρήση τεχνικών βαθιάς μηχανικής μάθησης. Ειδικότερα, γίνεται προσπάθεια να απαντηθεί το ερευνητικό ερώτημα του εντοπισμού της ασθένειας αποκλειστικά και μόνο από την απεικόνιση αυτής σε εικόνες δομικής μαγνητικής τομογραφίας.

Σκοπός μας είναι να δομήσουμε μια αυτοματοποιημένη διαδικασία σύμφωνα με την οποία θα κατηγοριοποιούμε γηραιούς ενήλικες σε δύο σύνολα υγιών ή ασθενών ατόμων. Πιο συγκεκριμένα, θεμελιώνουμε ένα πρόβλημα επιβλεπόμενης μάθησης ενός συνελκτικού νευρωνικού δικτύου της αρχιτεκτονικής Resnet34, που λαμβάνει ως είσοδο μια εικόνα δομικής μαγνητικής τομογραφίας τύπου T1 ενός γηραιού ενήλικα και αποφαινεται στο κατά πόσο αυτή αντιστοιχεί σε ασθενή ή υγιή οργανισμό. Η εκπαίδευση του δικτύου πραγματοποιείται πάνω σε εικόνες της βάσης δεδομένων OASIS Brains, ενός εγχειρήματος που αποσκοπεί στην συγκέντρωση και το διαμοιρασμό νευροαπεικονιστικών δεδομένων με στόχο την προαγωγή της έρευνας σχετικά με την εξέλιξη της νόσου Alzheimer.

Προκειμένου να διευρύνουμε την προβλεπτική ικανότητα του μοντέλου μας χρησιμοποιούμε την τεχνική της μεταφερόμενης μάθησης. Η κεντρική ιδέα της εν λόγω τεχνικής είναι η εκμετάλλευση ήδη υπάρχουσας γνώσης σε μοντέλα που έχουν εκπαιδευτεί εκ των προτέρων σε σύνολα δεδομένων μεγάλης κλίμακας. Στα πλαίσια της εργασίας χρησιμοποιούμε τη βάση δεδομένων του ImageNet, η οποία περιέχει πάνω από 14.000.000 δεδομένα εικόνων χωρισμένες σε περισσότερες από 20.000 κατηγορίες αντικειμένων και χρησιμοποιείται ευρέως στο ερευνητικό πεδίο της όρασης υπολογιστών. Άλλωστε, ένας από τους στόχους της εργασίας είναι να μελετήσει κατά πόσο η τεχνική της μεταφερόμενης μάθησης με αφετηρία το ImageNet προσφέρει ουσιαστική βελτίωση της προβλεπτικής ικανότητας του μοντέλου μας σε ένα πρόβλημα ιατρικής φύσης. Το εν λόγω ερώτημα έχει ενδιαφέρον καθώς το πρόβλημα που αντιμετωπίζουμε χρησιμοποιεί δεδομένα μαγνητικής τομογραφίας ενώ οι εικόνες του ImageNet δεν περιλαμβάνουν ιατρικές απεικονίσεις αλλά αναπαραστάσεις φυσικών αντικειμένων.

Τέλος αξίζει να σημειωθεί ότι η υλοποίηση της πειραματικής μελέτη μας βασίστηκε στην προγραμματιστική βιβλιοθήκη fastai, η οποία δομείται στα πλαίσια της γλώσσας προγραμματισμού Python και του υπολογιστικού εργαλείου PyTorch και μας επιτρέπει να δημιουργήσουμε και να εκπαιδεύσουμε αποδοτικά “state of the art” μοντέλα τεχνητών νευρωνικών δικτύων σε λίγες γραμμές κώδικα.

Λέξεις κλειδιά

Βαθιά Μάθηση, Νόσος Alzheimer, Δομική Μαγνητική Τομογραφία, Συνελκτικά Νευρωνικά Δίκτυα, Επιβλεπόμενη Μάθηση, Μεταφερόμενη Μάθηση.

Abstract

The current thesis engages with the scientific question of identifying Alzheimer's disease by utilizing deep learning techniques. Specifically, effort has been carried out to specify the existence of the disease only by its blueprint on structural magnetic resonance images.

Our goal is to create a procedure that will automatically classify elder adults into two sets of healthy and diseased individuals. Concretely, we establish a supervised learning problem for a convolutional neural network of the Resnet34 architecture. The network receives a T1 weighted structural magnetic resonance image of an elder adult and determines whether it corresponds to a healthy or diseased entity. The training of the network is conducted based on images from the OASIS Brains database, a project that aims to gather and distribute neuroimaging data in order to promote research on Alzheimer's disease.

In order to broaden the predictive abilities of our model we exploit the technique of transfer learning. The main idea behind this technique lies on taking advantage of existing knowledge stored in models that were pretrained on large scale datasets. In our project we use the ImageNet database which includes more than 14.000.000 data of images split into more than 20.000 categories of natural objects and is widely utilized in the research field of computer vision. Besides, one of our research goals is to determine whether transfer learning on ImageNet can essentially enhance the quality of our model's predictions on a problem of medical nature. This specific question has significance since our research question deals with magnetic resonance images and ImageNet does not contain representations of medical type.

Finally, for the experimental part of the thesis we utilized the fastai Python library, used on top of the PyTorch computational framework and allows us to create and train state of the art convolutional neural network models, efficiently in a few lines of code.

Key words

Deep Learning, Alzheimer's Disease, Structural Magnetic Resonance Imaging, Convolutional Neural Networks, Supervised Learning, Transfer Learning.

Ευχαριστίες

Ευχαριστώ θερμά τον επιβλέποντα καθηγητή αυτής της διατριβής, κ. Διονύσιο-Δημήτριο Κουτσούρη για την εμπιστοσύνη του. Ευχαριστώ επίσης τους κ.κ Π. Τουμπανιάρη και Π. Μπιζόπουλο για την πρόθυμη και πάντα αποτελεσματική βοήθειά τους, τις πολύτιμες συμβουλές και τις χρήσιμες συζητήσεις που είχαμε. Θέλω επιπλέον να ευχαριστήσω τον κ. Θ. Αγγελή, ο οποίος με τις συζητήσεις που είχαμε με βοήθησε να ξεπεράσω δυσκολίες και προβληματισμούς. Ιδιαίτερα ωστόσο Θα ήθελα να ευχαριστήσω την οικογένειά μου και κυρίως τους γονείς και την αδερφή μου, για την υποστήριξη που μου έδειξαν καθ' όλη τη διάρκεια των σπουδών μου. Τέλος θέλω να ευχαριστήσω τους φίλους μου, οι οποίοι με βοήθησαν, ο καθένας με τον τρόπο του καθ' όλη τη διάρκεια των φοιτητικών μου χρόνων.

Παπάς Ιωάννης Νικόλαος,
Αθήνα, 1η Νοεμβρίου 2019

Περιεχόμενα

Περίληψη	7
Abstract	9
Ευχαριστίες	11
Περιεχόμενα	13
Κατάλογος σχημάτων	15
Κατάλογος πινάκων	17
1. Εισαγωγή	19
1.1 Η Νόσος Alzheimer	19
1.2 Διάγνωση της Νόσου Alzheimer	20
1.3 Περιγραφή του Ερευνητικού Προβλήματος	20
1.4 Στόχοι και Συνεισφορά της Διπλωματικής Εργασίας	21
1.5 Διάρθρωση του Τόμου	22
2. Η Αναγνώριση της Νόσου Alzheimer ως Πρόβλημα Μάθησης	23
2.1 Ορισμός Μηχανικής Μάθησης	23
2.2 Ορισμός ενός Προβλήματος Μηχανικής Μάθησης	23
2.3 Κατηγορίες Προβλημάτων Μηχανικής Μάθησης	25
2.3.1 Επιβλεπόμενα Προβλήματα Μάθησης	25
2.4 Η Αναγνώριση της Νόσου Alzheimer ως Πρόβλημα Ταξινόμησης	29
3. Σχετική Έρευνα	31
3.1 Ερευνητικές Προσπάθειες Επιβλεπόμενης Αναγνώρισης της Νόσου Alzheimer	31
3.1.1 Μηχανές Διανυσματικής Υποστήριξης	31
3.1.2 Αλγόριθμος κ-Κοντινότερων Γειτόνων	34
3.1.3 Δέντρα Αποφάσεων	37
3.2 Ερευνητικές Εργασίες	41
4. Βαθιά Μάθηση	45
4.1 Ορισμός Βαθιάς Μάθησης	45
4.2 Εισαγωγή στα Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα	46
4.2.1 Λογιστική Παλινδρόμηση	46
4.2.2 Το Δίκτυο Perceptron	48
4.2.3 Βαθιά Δίκτυα Εμπρόσθιας Τροφοδότησης	49
4.3 Συνελκτικά Νευρωνικά Δίκτυα	52
4.3.1 Αρχή Λειτουργίας	53
4.3.2 Δομικά Επίπεδα	58

5. Εφαρμογές Βαθιάς Μάθησης στην Αναγνώριση της Νόσου Alzheimer	62
5.1 Ερευνητικές Εργασίες	62
5.2 Βάσεις Δεδομένων	65
6. Αναγνώριση της Νόσου Alzheimer με Χρήση Μεταφερόμενης Μάθησης	67
6.1 Μεταφερόμενη Μάθηση	67
6.2 Μέθοδος	68
6.3 Αποτελέσματα	71
7. Συμπεράσματα	75
7.1 Ανακεφαλαίωση και Συμβολή της Διπλωματικής Εργασίας	75
7.2 Προτάσεις για Μελλοντική Έρευνα	75

Κατάλογος σχημάτων

Σχήμα 1: Προβλεπόμενος Αριθμός Ασθενών της AD στις ΗΠΑ μεταξύ του 2010 και 2050.	20
Σχήμα 2: Εκπαίδευση, Επαλήθευση και Έλεγχος ενός Συστήματος Μηχανικής Μάθησης.	21
Σχήμα 3: Πρόβλεψη της Θερμοκρασίας με Παλινδρόμηση και Ταξινόμηση	25
Σχήμα 4: Ταξινόμηση Πολλαπλών Κλάσεων.	26
Σχήμα 5: Ταξινόμηση Πολλαπλών Ετικετών.	27
Σχήμα 6: Γραμμική Παλινδρόμηση για Μονοδιάστατα Παραδείγματα.	28
Σχήμα 7: Το Συνελκτικό Νευρωνικό Δίκτυο ως Εργαλείο Ταξινόμησης sMRI.	29
Σχήμα 8: Η Συνάρτηση $y = \text{sign}(x)$	32
Σχήμα 9: Μοντέλο SVM για Διανύσματα Χαρακτηριστικών Δύο Διαστάσεων.	33
Σχήμα 10: Αλγόριθμος kNN με $k = 3$ (μαύρη γραμμή) και $k = 5$ (διακεκομμένη γραμμή).	34
Σχήμα 11: Συστατικά Στοιχεία ενός Δέντρου Απόφασης	37
Σχήμα 12: Παράδειγμα Συλλογιστικής ενός Δέντρου Απόφασης	38
Σχήμα 13: DT Σταθερού Μοντέλου ID3.	39
Σχήμα 14: Διαδικασία Διαχωρισμού ενός DT.	39
Σχήμα 15: Ένα Σύστημα Βαθιάς Μάθησης.	46
Σχήμα 16: Σιγμοειδής Συνάρτηση	47
Σχήμα 17: Τρεις Συνδεδεμένοι Βιολογικοί Νευρώνες.	48
Σχήμα 18: Σύγκριση Βιολογικού και Τεχνητού Νευρώνα.	49
Σχήμα 19: Νευρωνικό Δίκτυο 3 Στρωμάτων.	50
Σχήμα 20: Γραφικές Παραστάσεις Συναρτήσεων Ενεργοποίησης.	51
Σχήμα 21: Ο Αλγόριθμος Κατάβασης Κλίσης.	52
Σχήμα 22: Συνέλιξη για Εξόρυξη Χαρακτηριστικών.	54
Σχήμα 23: Συνέλιξη Φίλτρου με Όγκο Βάθους 3.	55
Σχήμα 24: Συνέλιξη με Βήμα Φιλτραρίσματος 2.	56
Σχήμα 25: Συνέλιξη με Βήμα Φιλτραρίσματος 2 και Επέκταση 1	57
Σχήμα 26: Συγκέντρωση Μεγίστου με Βήμα Φιλτραρίσματος 2.	57
Σχήμα 27: Η Αρχιτεκτονική ενός Συνελκτικού Νευρωνικού Δικτύου.	58
Σχήμα 28: Παράδειγμα Χωρικής Τοπικότητας και Πληρότητας Βάθους.	59
Σχήμα 29: Επισκόπηση της Πειραματικής Εφαρμογής	68
Σχήμα 30: Η Αρχιτεκτονική ResNet34.	69
Σχήμα 31: Εκπαίδευση Δικτύου για 6 Εποχές με $lr = 0.003$	70
Σχήμα 32: Συνέχιση Εκπαίδευσης για 6 Εποχές με $lr = (1e - 05, 1e - 03)$	70
Σχήμα 33: Εκπαίδευση για 6 Εποχές με $wd = 0.5$ και $lr = 0.003$	71
Σχήμα 34: Συνέχιση Εκπαίδευσης για 6 Εποχές με $wd = 0.5$ και $lr = (0.001, 0.01)$	71
Σχήμα 35: Εκπαίδευση για 4 Εποχές με $ps = 0.01$, $wd = 0.5$ και $lr = 0.003$	72
Σχήμα 36: Συνέχιση Εκπαίδευσης για 4 Εποχές με $ps = 0.01$, $wd = 0.5$ και $lr = (0.001, 0.01)$	72
Σχήμα 37: Συχνότερα Λάθη	73
Σχήμα 38: Πίνακας Σύγκρισης	74

Κατάλογος πινάκων

Πίνακας 1: Στατιστικά Στοιχεία Θνησιμότητας λόγω AD ΗΠΑ 2017 με Βάση την Ηλικία. . .	19
Πίνακας 2: Συναρτήσεις Απόστασης για τον Αλγόριθμο kNN με βάση την D_{Mink}	35
Πίνακας 3: Συναρτήσεις Απόστασης για τον Αλγόριθμο kNN με Βάση το Εσωτερικό Γινόμενο.	36
Πίνακας 4: Έρευνητικές Εργασίες Ταξινόμησης Alzheimer με SVM.	42
Πίνακας 5: Κυριότερες Συναρτήσεις Ενεργοποίησης Νευρώνων.	51
Πίνακας 6: Οι Παράμετροι και Υπερπαραμέτροι ενός Συνελκτικού Νευρωνικού Δικτύου. .	60
Πίνακας 7: Αρχιτεκτονικές Συνελκτικών Νευρωνικών Δικτύων.	61
Πίνακας 8: Σύγκριση Εργασιών Ταξινόμησης χωρίς Πληροφοριακή Διαρροή.	63
Πίνακας 9: Σύγκριση Εργασιών Ταξινόμησης με Πληροφοριακή Διαρροή.	64

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

1.1 Η Νόσος Alzheimer

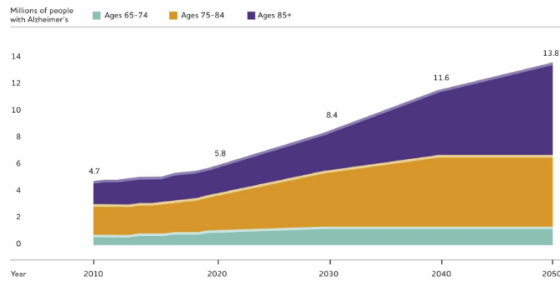
Η νόσος Alzheimer (Alzheimer's Disease) είναι νευροεκφυλιστική ασθένεια που συνδέεται με γνωσιακό και μνημονικό έλλειμμα και αποτελεί τον κύριο πρόδρομο της άνοιας [1]. Χαρακτηριστικό στοιχείο της νόσου είναι η σταδιακή έκπτωση των γνωστικών λειτουργιών του ατόμου με δυσκολίες να παρατηρούνται στη μνήμη, την συγκέντρωση, τη δυνατότητα γλωσσικής έκφρασης και επίλυσης προβλημάτων γεγονός που περιορίζει δραματικά την ικανότητα του ασθενή να επιτελέσει καθημερινές λειτουργίες. Η εν λόγω γνωσιακή έκπτωση οφείλεται σε μερική ή ολική βλάβη νευρικών κυττάρων σε περιοχές του εγκεφάλου σχετικές με τη νοητική λειτουργία. Στο τελικό της στάδιο, η επιρροή της νόσου στην μη ομαλή λειτουργία του εγκεφάλου είναι τόσο δριμεία, με αποτέλεσμα ο ασθενής να χρήζει παρακολούθησης καθ' όλη τη διάρκεια της μέρας με συνήθη κατάληξη το θάνατο [2].

Αλλωστε, σύμφωνα με τη μελέτη [3], η νόσος του Alzheimer αποτέλεσε την έκτη επικρατέστερη αιτία θανάτου στις ΗΠΑ για το έτος 2017. Συγκεκριμένα, σε ένα σύνολο 2.813.503 θανάτων ήταν υπαίτια για 121.404 με αναλυτικότερα στοιχεία σχετικά με τις ηλικιακές ομάδες που προσέβαλε να παρουσιάζονται στον Πίνακα 1.

Cause of death (based on International Classification of Diseases, 10th Revision)	Age group in years												
	All Ages	Under 1	1-4	5-14	15-24	25-34	35-44	45-54	55-64	65-74	75-84	85 and over	Age not stated
All causes	2.813.503	22.335	3.880	5.571	32.025	60.215	79.796	170.142	372.006	531.610	657.759	878.035	129
Alzheimer's Disease	121.404	-	-	-	-	-	11	95	1.189	7.281	32.309	80.517	2

Πίνακας 1: Στατιστικά Στοιχεία Θνησιμότητας λόγω AD ΗΠΑ 2017 με Βάση την Ηλικία.[3]

Αναλύοντας τα στοιχεία του Πίνακα 1 αντιλαμβανόμαστε ότι το Alzheimer εμφανίζεται σε άτομα που ανήκουν στις γηραιότερες ηλικιακές ομάδες του πληθυσμού. Συμπληρωματικά με τον Πίνακα 1 μπορεί να εξεταστεί το Σχήμα 1, η οποία δημιουργήθηκε από δεδομένα της [4]. Τα στοιχεία του Σχήματος 1 αναδεικνύουν ενδεχόμενη αύξηση του γηραιού πληθυσμού των ΗΠΑ που θα προσβληθεί από τη νόσο Alzheimer και σε συνδυασμό με τον υψηλό βαθμό θνησιμότητας που έχει να επιδείξει η νόσος σε αυτές τις ηλικιακές ομάδες κρίνεται σημαντική η έγκαιρη αντιμετώπιση της από την επιστημονική και ιατρική κοινότητα.



Σχήμα 1: Προβλεπόμενος Αριθμός Ασθενών της AD στις ΗΠΑ μεταξύ του 2010 και 2050.[2]

1.2 Διάγνωση της Νόσου Alzheimer

Μία από τις μεγαλύτερες επιστημονικές προκλήσεις που σχετίζεται με την έρευνα της νόσου Alzheimer αφορά την διαδικασία της διάγνωσης της. Παρά την εκτενή έρευνα σχετικά με τη φυσιολογία της νόσου και την νευροπαθολογία της, δεν έχει αναπτυχθεί ακόμα ένα ενιαίο εργαλείο αναφορικά με τη διάγνωση της [2]. Αντ' αυτού, η διαδικασία διάγνωσης προϋποθέτει την ολοκλήρωση ενός πρωτοκόλλου, σύμφωνα με το οποίο, ο υπεύθυνος νευρολόγος ιατρός συνεργάζεται με άτομα διαφορετικών ειδικοτήτων όπως νοσηλευτές, ψυχιάτρους και ακτινολόγους για την δόμηση του προφίλ του ασθενή. Συνήθως το πρωτόκολλο αυτό περιλαμβάνει τις εξής διαδικασίες :

- Λήψη ιατρικού και οικογενειακού ιστορικού, συμπεριλαμβανομένων ψυχιατρικών και συμπεριφορικών παθήσεων στο συγγενικό περιβάλλον του ασθενή.
- Διερώτηση συγγενικών προσώπων για την παροχή πληροφοριών αναφορικά με αλλαγές στη συμπεριφορά, στον τρόπο σκέψης και στις δεξιότητες του ασθενή.
- Ολοκλήρωση γνωσιακών και νευρολογικών εξετάσεων τύπου Mini Mental State Examination [5].
- Υποβολή του ασθενή σε αιματολογικές εξετάσεις καθώς επίσης και σε απεικονιστικές μετρήσεις του εγκεφάλου για να αποκλειστούν άλλοι πιθανοί λόγοι που προκαλούν συμπτώματα όμοια με την νόσο του Alzheimer όπως για παράδειγμα έλλειψη βιταμινών ή κάποιος όγκος.

Όπως γίνεται εύκολα αντιληπτό, η τυπική διαδικασία της διάγνωσης μπορεί να διαρκέσει αρκετές μέρες προκειμένου να ολοκληρωθεί και ενδεχομένως να είναι αρκετά κοστοβόρα για τον ασθενή, ειδικά αν χρειάζεται να υποβληθεί σε απεικονιστικές εξετάσεις. Ωστόσο ακόμα και με την ολοκλήρωση της, η ακριβής αιτία ανάπτυξης της νόσου μπορεί να παραμείνει άγνωστη και δυστυχώς μέχρι σήμερα, η ακριβέστερη διαδικασία που συνεπάγεται την εγκυρότερη διάγνωση είναι η αυτοψία [6].

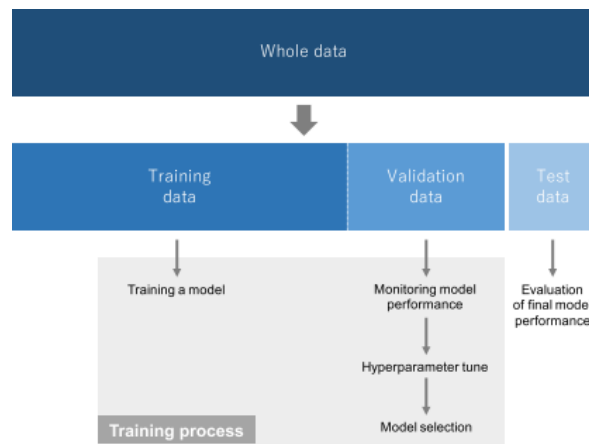
1.3 Περιγραφή του Ερευνητικού Προβλήματος

Με βάση την ανάλυση στις παραγράφους που προηγήθηκαν, συμπεραίνουμε ότι δεν υπάρχει ένα καθολικό εργαλείο διάγνωσης της νόσου Alzheimer στηριζόμενο αποκλειστικά στην νευροφυσιολογική της απεικόνιση. Στη παρούσα διπλωματική εργασία ερευνούμε τις προϋποθέσεις ανάπτυξης ενός τέτοιου απλοποιημένου μέσου πρόβλεψης, επιλύοντας ένα πρόβλημα επιβλεπόμενης μάθησης (supervised learning), όπως αυτό θεμελιώνεται στο [7].

Ειδικότερα, επιθυμούμε να δημιουργήσουμε ένα σύστημα, το οποίο θα είναι σε θέση να διαχωρίζει υγιή και νοσούντα άτομα με βάση την εικόνα δομικής μαγνητικής τομογραφίας τους. Προκειμένου να πετύχουμε το σκοπό μας οφείλουμε να ακολουθήσουμε μια συγκεκριμένη σειρά βημάτων :

1. Συλλογή ενός σετ δεδομένων μεγάλης κλίμακας από δομικές μαγνητικές τομογραφίες ασθενών με Alzheimer και υγιών ατόμων.
2. Καθορισμός των ετικετών κατηγοριοποίησης του προβλήματος.
3. Διαχωρισμός των δεδομένων σε σετ εκπαίδευσης, επαλήθευσης και ελέγχου.
4. Τέλεση της εκπαίδευσης του συστήματος κατά την διάρκεια της οποίας το σύστημα εκτίθεται στα δεδομένα εκπαίδευσης.
5. Διενέργεια προβλέψεων στα δεδομένα επαλήθευσης.
6. Ρύθμιση των παραμέτρων του συστήματος και επανεκπαίδευση του στα δεδομένα εκπαίδευσης.
7. Έλεγχος της απόδοσης του συστήματος στα δεδομένα ελέγχου, τα οποία είναι κρυφά κατά τη διάρκεια των βημάτων εκπαίδευσης και επαλήθευσης.

Τα παραπάνω βήματα συνοψίζονται κομψά στο Σχήμα 2 από το [8] :



Σχήμα 2: Εκπαίδευση, Επαλήθευση και Έλεγχος ενός Συστήματος Μηχανικής Μάθησης.[8]

1.4 Στόχοι και Συνεισφορά της Διπλωματικής Εργασίας

Οι στόχοι καθώς και η συνεισφορά της συγκεκριμένης διπλωματικής εργασίας μπορούν να περιγραφούν συνοπτικά σε δύο σημεία :

- Συνοπτική παρουσίαση με σαφήνεια των σύγχρονων επιστημονικών εξελίξεων και τάσεων σχετικά με την χρησιμοποίηση της βαθιάς μάθησης για την έρευνα γύρω από τη νόσο Alzheimer. Η συγκεντρωτική αποτύπωση των state of the art προσεγγίσεων αναφορικά με την έρευνα της ασθένειας, με εργαλεία μηχανικής μάθησης, ευελπιστούμε να αποτελέσει ένα χρήσιμο οδηγό για κάθε ενδιαφερόμενο που επιθυμεί να ασχοληθεί με τη σύμπραξη της βαθιάς μάθησης και της έρευνας νευρολογικών ασθενειών.
- Περιγραφή και εξέταση των μέχρι τώρα ερευνητικών εργασιών αναφορικά με το πρόβλημα κατηγοριοποίησης της νόσου Alzheimer με τεχνητά νευρωνικά δίκτυα ή με άλλες μεθόδους μηχανικής μάθησης. Η αξιολόγηση των εν λόγω εργασιών δεν είναι εύκολη διαδικασία καθώς τα αποτελέσματα που παρουσιάζουν είναι δύσκολο να αναπαραχθούν εκ νέου. Για αυτό το σκοπό προσπαθούμε να αποτυπώσουμε τις συνεισφορές και προτάσεις της κάθε εργασίας και να χρησιμοποιήσουμε τις τεχνικές γνώσεις που μας παρέχουν για τη δόμηση του δικού μας προβλεπτικού μοντέλου.

1.5 Διάρθρωση του Τόμου

Στο κεφάλαιο 1 πραγματοποιείται μια σύντομη εισαγωγή στο ερευνητικό ερώτημα με το οποίο καταπιάνεται η παρούσα διπλωματική εργασία και αναφέρονται οι στόχοι και η συνεισφορά της στην ερευνητική κοινότητα.

Στο κεφάλαιο 2 θεμελιώνεται η διαδικασία αναγνώρισης της νόσου Alzheimer ως πρόβλημα μάθησης με παρουσίαση εισαγωγικών εννοιών και ορολογίας.

Στο κεφάλαιο 3 παρατίθενται οι σχετικές με το πρόβλημα ερευνητικές εργασίες από το χώρο της κλασικής μηχανικής μάθησης, με εξαίρεση του τομέα της βαθιάς μάθησης.

Στο κεφάλαιο 4 εισάγονται θεμελιώδεις θεωρητικές έννοιες σχετικές με τον τομέα της βαθιάς μάθησης. Κύριο άξονα αναφοράς αποτελούν τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα και ειδικότερα η υποκατηγορία των συνελκτικών νευρωνικών δικτύων.

Στο κεφάλαιο 5 αναλύονται ερευνητικές εργασίες, ορμώμενες από τη βαθιά μάθηση, σχετικές με την ταξινόμηση της νόσου Alzheimer. Επιπλέον παρουσιάζονται οι κυριότερες βάσεις δεδομένων που χρησιμοποιούνται ερευνητικά σε προβλήματα βαθιάς μάθησης.

Στο κεφάλαιο 6 παρουσιάζεται η πειραματική εφαρμογή της εργασίας, η οποία στηρίχθηκε στη μέθοδο της μεταφερόμενης μάθησης.

Τέλος, στο κεφάλαιο 7 καταγράφονται οι τελικές συνεισφορές της διπλωματικής εργασίας και προτείνονται κατευθύνσεις για μελλοντική έρευνα.

Κεφάλαιο 2

Η Αναγνώριση της Νόσου Alzheimer ως Πρόβλημα Μάθησης

Στόχος του συγκεκριμένου κεφαλαίου είναι να εισάγει τον αναγνώστη στις έννοιες και στους όρους που θεμελιώνουν ένα πρόβλημα μηχανικής μάθησης. Αρχικά οριοθετείται το γενικότερο θεωρητικό πλαίσιο σύμφωνα με το οποίο ορίζεται ένα πρόβλημα μηχανικής μάθησης. Επιπλέον γίνεται αναφορά στις κατηγορίες των προβλημάτων μηχανικής μάθησης και στους κανόνες που πρέπει να πληρούνται για να ενταχθεί ένα πρόβλημα μάθησης στις εν λόγω κατηγορίες. Τέλος, με κριτήριο την παραπάνω ανάλυση, εξετάζουμε σε ποια ομάδα προβλήματος μάθησης ανήκει η διαδικασία αναγνώρισης της νόσου Alzheimer από εικόνες δομικής μαγνητικής τομογραφίας.

2.1 Ορισμός Μηχανικής Μάθησης

Ο πιο κλασικός ορισμός της διαδικασίας της μηχανικής μάθησης έχει δοθεί από τον T.Mitchell στο [9] με την ακόλουθη φράση :

”Ένα υπολογιστικό πρόγραμμα **μαθαίνει** από την εμπειρία E που αναπτύσσει από ένα σύνολο εργασιών T αναφορικά με ένα μέτρο απόδοσης P , εάν η απόδοση του στις εν λόγω εργασίες T , η οποία μετριέται από την P , βελτιώνεται μέσω της εμπειρίας E που αποκτά.”

Ένας εναλλακτικός ορισμός δίνεται στο [10]. Εδώ η μηχανική μάθηση ορίζεται ως ένα σύνολο τεχνικών ικανό να ανιχνεύει πρότυπα ή μοτίβα σε δεδομένα με σκοπό να χρησιμοποιήσει αυτά τα ευρήματα για να προβλέψει μελλοντικά δεδομένα ή να λάβει αποφάσεις υπό συνθήκες αβεβαιότητας.

2.2 Ορισμός ενός Προβλήματος Μηχανικής Μάθησης

Προκειμένου να ορίσουμε τις απαραίτητες διαδικασίες και τα στοιχεία που συνθέτουν ένα πρόβλημα μηχανικής μάθησης μπορούμε να στραφούμε στο μοντέλο που παρουσιάζεται στο [7]. Πιο συγκεκριμένα το φορμαλιστικό αυτό μοντέλο περιλαμβάνει τα εξής στοιχεία:

1. Η Είσοδος του Μηχανισμού Μάθησης

(a) Σύνολο Δεδομένων (Domain Set):

Πρόκειται για ένα τυχαία σύνολο X που περιέχει στοιχεία στα οποία θέλουμε να αποδώσουμε κάποια ετικέτα. Συνήθως τα στοιχεία του συνόλου δεδομένων αναπαρίστανται από ένα διάνυσμα χαρακτηριστικών (vector of features). Άλλωστε μπορούμε να αναφερθούμε στα στοιχεία του συνόλου δεδομένων ως δείγματα (instances) και στο σύνολο ως χώρο δειγμάτων (instance space).

(b) Σύνολο Ετικετών (Label Set):

Πρόκειται για ένα σύνολο Y που περιέχει τις πιθανές ετικέτες (labels) που μπορούν να αποδοθούν στα στοιχεία του συνόλου δειγμάτων. Ανάλογα με το είδος του προβλήματος που καλούμαστε να επιλύσουμε οι τιμές που λαμβάνουν τα στοιχεία του συνόλου μπορεί να είναι:

- i. Διακριτές όπου π.χ $Y = \{0, 1, \dots, y\}$ (πρόβλημα ταξινόμησης - classification problem)
 - ii. Συνεχή Διαστήματα όπου π.χ $Y = \mathcal{R}$ (πρόβλημα παλινδρόμησης - regression problem)
- (c) Σύνολο Εκπαίδευσης (Training Set):

Πρόκειται για ένα σύνολο $S = ((\mathbf{x}_1, y_1), \dots, (\mathbf{x}_m, y_m))$ από μία πεπερασμένη ακολουθία ζευγών στο $\mathbf{X} \times Y$. Κάθε ζεύγος αποτελείται από ένα διάνυσμα χαρακτηριστικών \mathbf{x} μεγέθους d και την αντίστοιχη ετικέτα y που του αποδίδεται. Το ζεύγος (\mathbf{x}, y) ονομάζεται παράδειγμα εκπαίδευσης. Στο προκείμενο λέμε πως το σύνολο εκπαίδευσης έχει μέγεθος m καθώς αποτελείται από m το πλήθος παραδείγματα εκπαίδευσης.

2. Η Έξοδος του Μηχανισμού Μάθησης

Ο μηχανισμός μάθησης οφείλει να παράξει ένα κανόνα πρόβλεψης (prediction rule) που λαμβάνει τη μορφή μιας συνάρτησης $h : X \rightarrow Y$. Αυτή η συνάρτηση μπορεί να φέρει τα εξής ονόματα :

- (a) Συνάρτηση Πρόβλεψης (predictor)
- (b) Συνάρτηση Υπόθεσης (hypothesis)
- (c) Συνάρτηση Ταξινόμησης (classifier)

Η χρησιμότητα της h έγκειται στην ικανότητα της να αποδίδει ετικέτες σε νέα στοιχεία δεδομένων. Επιπλέον χρησιμοποιούμε το συμβολισμό $A(S)$ για να δηλώσουμε την συνάρτηση υπόθεσης που επιστρέφει ένας αλγόριθμος μάθησης A αφού εκπαιδευτεί μέσω της ακολουθίας εκπαίδευσης S .

3. Το Μοντέλο Παραγωγής Δεδομένων

Το παραπάνω εργαλείο προσομοιώνει το περιβάλλον του προβλήματος και εξηγεί πώς παράγονται τα δεδομένα εκπαίδευσης. Αρχικά υποθέτουμε ότι τα δείγματα που συναντάμε προέρχονται από μια κατανομή πιθανότητας. Αυτή η κατανομή πιθανότητας ενεργεί πάνω στο σύνολο και συμβολίζεται με D . Είναι σημαντικό να τονίσουμε ότι δεν υποθέτουμε ότι ο μηχανισμός μάθησης έχει κάποια γνώση αναφορικά με την κατανομή ενώ αυτή μπορεί να λάβει τη μορφή οποιασδήποτε τυχαίας κατανομής πιθανότητας. Όσον αφορά τις ετικέτες, θεωρούμε ότι υπάρχει κάποια “ορθή” συνάρτηση ετικετών $f : X \rightarrow Y$ και ότι $y_i = f(x_i)$ για κάθε i . Αυτή η συνάρτηση είναι άγνωστη στον μηχανισμό μάθησης και πρόκειται ουσιαστικά για το ζητούμενο του προβλήματος. Συνοψίζοντας, κάθε ζεύγος στην ακολουθία εκπαίδευσης S παράγεται δειγματοληπτώντας ένα στοιχείο x_i σύμφωνα με την κατανομή πιθανότητας D και αποδίδοντας του μια ετικέτα σύμφωνα με την f .

4. Μετρική Σφάλματος

Ορίζουμε το σφάλμα του ταξινομητή (error of a classifier) να αντιστοιχεί στην πιθανότητα, η ετικέτα $h(x)$ που προβλέπει ο ταξινομητής h , για ένα τυχαίο στοιχείο δεδομένων x που παράγεται από την προαναφερθείσα κατανομή D , να μην ισούται με την “ορθή” ετικέτα $f(x)$. Συμβολίζουμε το εν λόγω σφάλμα του κανόνα πρόβλεψης $h : X \rightarrow Y$ ως :

$$L_{D,f}(h) = \mathbb{P}_{x \sim D}[h(\mathbf{x}) \neq f(\mathbf{x})] = D(\{\mathbf{x} : h(\mathbf{x}) \neq f(\mathbf{x})\})$$

Στόχος κάθε μηχανισμού μάθησης είναι να ελαχιστοποιήσει το παραπάνω σφάλμα προσδιορίζοντας τη κατάλληλη συνάρτηση h . Ωστόσο δεδομένης της άγνοιας του μηχανισμού τόσο για την κατανομή D όσο και για την συνάρτηση f η παραπάνω ποσότητα δεν δίνεται να προσδιοριστεί άμεσα από το μηχανισμό μάθησης. Ως εκ τούτου, στη πράξη προσπαθούμε να ποσοτικοποιήσουμε το σφάλμα με άλλα μεγέθη, τα οποία μας είναι γνωστά από τα δεδομένα του προβλήματος και μέσω των οποίων μπορούμε να προσεγγίσουμε τη ζητούμενη συνάρτηση f .

2.3 Κατηγορίες Προβλημάτων Μηχανικής Μάθησης

Με βάση το [10] τα προβλήματα μηχανικής μάθησης συνήθως χωρίζονται σε τρεις κατηγορίες :

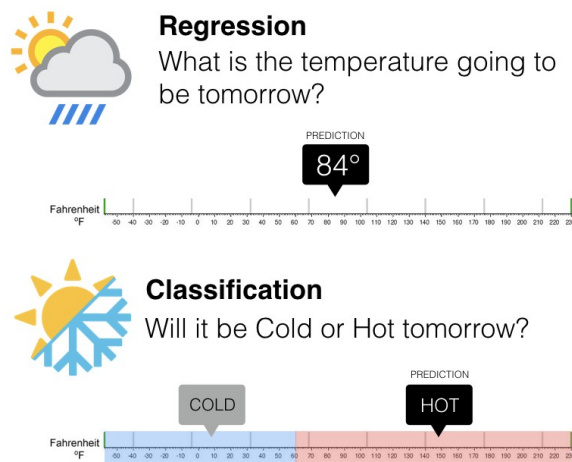
1. Τα προβλεπτικά ή επιβλεπόμενα προβλήματα μάθησης (predictive or supervised learning problems)
2. Τα περιγραφικά ή μη επιβλεπόμενα προβλήματα μάθησης (descriptive or unsupervised learning problems)
3. Τα προβλήματα ενισχυμένης μάθησης (reinforcement learning problems)

Στο εν λόγω κεφάλαιο θα αναπτύξουμε περαιτέρω τα είδη των προβλημάτων επιβλεπόμενης μάθησης μιας και το ερευνητικό ερώτημα της εργασίας μας θεμελιώνεται στη λογική των συγκεκριμένων προβλημάτων.

2.3.1 Επιβλεπόμενα Προβλήματα Μάθησης

Τα προβλήματα πλήρους επίβλεψης αποτελούν τον πλέον διαδεδομένο τύπο προβλήματος μηχανικής μάθησης. Όπως είδαμε στην παράγραφο 2.2 όπου ορίσαμε την κλασική δομή ενός προβλήματος μάθησης, ο στόχος ενός προβλήματος μάθησης είναι η εκμάθηση μιας απεικόνισης f από τα στοιχεία εισόδου του x χώρου δειγμάτων, στα στοιχεία εξόδου y του χώρου ετικετών. Το κριτήριο με βάση το οποίο κατηγοριοποιούνται τα προβλήματα επιβλεπόμενης μάθησης στις υποκατηγορίες τους είναι το είδος των τιμών που μπορεί να λάβει το σύνολο του χώρου ετικετών Y . Έτσι, αν τα στοιχεία του συνόλου ετικετών παίρνουν διακριτές τιμές, δηλαδή $y \in \{1, \dots, C\}$, τότε μιλάμε για ένα πρόβλημα ταξινόμησης των δειγμάτων x σε C κλάσεις. Ωστόσο, αν τα στοιχεία του συνόλου εξόδου δύνανται να λάβουν τιμές από ένα συνεχές σύνολο για παράδειγμα $y = \mathbb{R}$ τότε επιλύουμε ένα πρόβλημα παλινδρόμησης.

Ο διαχωρισμός στις δύο αυτές κατηγορίες μπορεί εύκολα να εξηγηθεί μέσω ενός παραδείγματος πρόβλεψης της θερμοκρασίας, όπως αυτό παρουσιάζεται στο Σχήμα 3. Στη περίπτωση του προβλήματος παλινδρόμησης καλούμαστε να προβλέψουμε την ακριβή τιμή που μπορεί να λάβει η αυριανή θερμοκρασία σε ένα συνεχές διάστημα τιμών από -60 έως 230 βαθμούς OF. Από την άλλη, στην περίπτωση του προβλήματος ταξινόμησης, έχουμε χωρίσει το συνεχές διάστημα πιθανών τιμών της θερμοκρασίας σε δύο κλάσεις, δύο σύνολα τιμών δηλαδή με ετικέτες COLD, HOT και καλούμαστε να προβλέψουμε αν αύριο θα έχουμε κρύα ή ζεστή μέρα.



Σχήμα 3: Πρόβλεψη της Θερμοκρασίας με Παλινδρόμηση και Ταξινόμηση¹

¹ <https://towardsdatascience.com/regression-or-classification-linear-or-logistic-f093e8757b9c>

Το Πρόβλημα της Ταξινόμησης

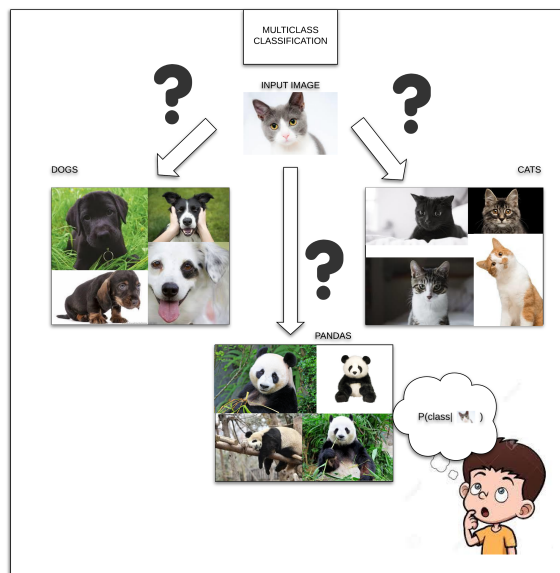
Όπως ήδη αναφέραμε στη παράγραφο 2.3.1, ένα πρόβλημα ταξινόμησης έχει στόχο την εκμάθηση μιας απεικόνισης f από τον χώρο δειγμάτων εισόδου x στον χώρο ετικετών y όπου $y \in \{1, \dots, C\}$ με το C να αποτελεί τον αριθμό των κλάσεων του προβλήματος [10]. Ανάλογα με το πλήθος των κλάσεων ενός προβλήματος ταξινόμησης παρατηρούνται οι εξής διαχωρισμοί :

1. Αν $C = 2$ τότε μιλάμε για πρόβλημα δυαδικής ταξινόμησης (binary classification) και συχνά αναθέτουμε τιμές στο με βάση τον κανόνα $y \in \{0, 1\}$.
2. Αν $C > 2$ τότε αντιμετωπίζουμε πρόβλημα ταξινόμησης πολλαπλών κλάσεων (multiclass classification).
3. Στη περίπτωση που οι ετικέτες των κλάσεων δεν είναι αμοιβαίως αποκλειόμενες, αν δηλαδή ένα δείγμα εισόδου μπορεί να κατηγοριοποιηθεί ταυτόχρονα με παραπάνω από μία ετικέτα, τότε μιλάμε για ένα πρόβλημα ταξινόμησης πολλαπλών ετικετών (multi-label classification) και το μοντέλο πρόβλεψης ονομάζεται μοντέλο πολλαπλών εξόδων (multiple output model).

Θα αναφερθούμε λίγο παραπάνω στη διαφορά μεταξύ των προβλημάτων της ταξινόμησης πολλαπλών κλάσεων και της ταξινόμησης πολλαπλών ετικετών και θα την εξηγήσουμε στο παράδειγμα που ακολουθεί.

Ταξινόμηση Πολλαπλών Κλάσεων

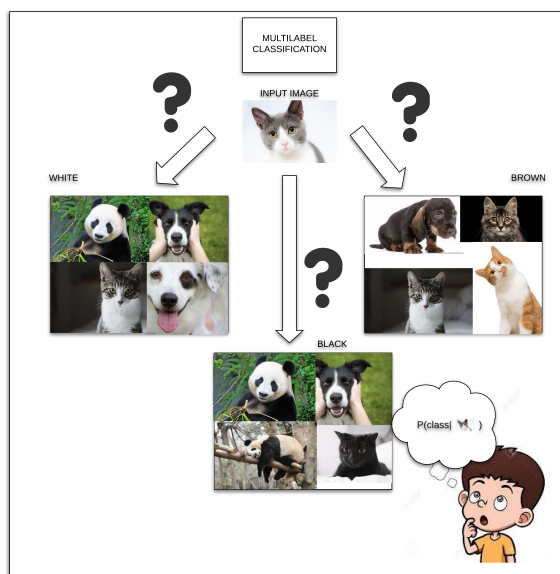
Ως παράδειγμα ταξινόμησης πολλαπλών κλάσεων μπορεί να θεωρηθεί η διαδικασία κατηγοριοποίησης εικόνων από ζώα σε 3 κλάσεις. Στο προκείμενο, σκοπός μας είναι να εξετάσουμε με ποια πιθανότητα αντιστοιχίζεται η εικόνα εισόδου στις κλάσεις ΓΑΤΑ, ΣΚΥΛΟΣ ή ΠΑΝΤΑ όπως φαίνεται στο Σχήμα 4 :



Σχήμα 4: Ταξινόμηση Πολλαπλών Κλάσεων.

Ταξινόμηση Πολλαπλών Ετικετών

Ως παράδειγμα ταξινόμησης πολλαπλών ετικετών μπορεί να θεωρηθεί η διαδικασία κατηγοριοποίησης εικόνων ζώων με βάση το χρώμα τους. Στο εν λόγω παράδειγμα θεωρούμε τις κλάσεις BLACK, WHITE, BROWN όπως φαίνεται στο Σχήμα 5. Σε αντίθεση με τη διαδικασία ταξινόμησης πολλαπλών κλάσεων παρατηρούμε ότι σε μία εικόνα μπορεί να αντιστοιχεί παραπάνω από μία ετικέτα ταυτόχρονα. Έτσι η εικόνα εισόδου στο Σχήμα 5 κατηγοριοποιείται ταυτόχρονα τόσο με την ετικέτα WHITE όσο και με την BROWN.



Σχήμα 5: Ταξινόμηση Πολλαπλών Ετικετών.

Το Πρόβλημα της Παλινδρόμησης

Ένα από τα πιο διαδεδομένα και συγχρόνως απλά μοντέλα για την επίλυση προβλημάτων παλινδρόμησης είναι η γραμμική παλινδρόμηση [11]. Στηριζόμενοι στην ανάλυση των [7] και [12], η γραμμική παλινδρόμηση μπορεί να θεωρηθεί ένα πρόβλημα μάθησης με τα εξής χαρακτηριστικά :

- Το σύνολο δεδομένων X είναι υποσύνολο του χώρου \mathbb{R}^d για κάποιο πλήθος d χαρακτηριστικών. Ένα τυχαίο διάνυσμα εισόδου \mathbf{x} μπορεί να γραφτεί στη μορφή :

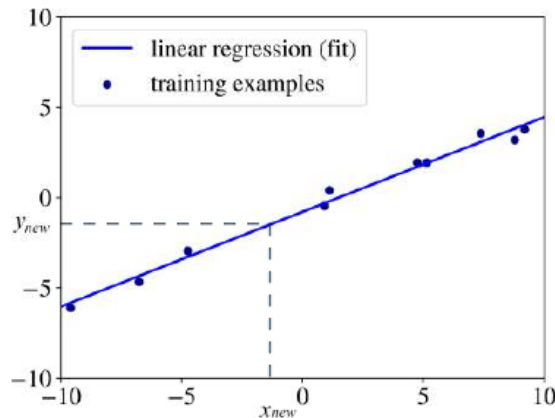
$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x^{(1)} \\ x^{(2)} \\ \dots \\ x^{(d)} \end{pmatrix}$$

- Το σύνολο ετικετών ή στόχων Y ταυτίζεται με το σύνολο \mathbb{R} των πραγματικών αριθμών.
- Η συνάρτηση πρόβλεψης $h : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ είναι γραμμική της μορφής $h_{\mathbf{w},\mathbf{b}}(\mathbf{x}) = \mathbf{w}\mathbf{x} + \mathbf{b}$, όπου το \mathbf{w} είναι ένα διάνυσμα παραμέτρων d διαστάσεων και το \mathbf{b} είναι ένας πραγματικός αριθμός. Η εξίσωση $\mathbf{w}\mathbf{x} - \mathbf{b} = 0$ εκφράζει ένα υπερεπίπεδο όπου η σχέση $\mathbf{w}\mathbf{x}$ μπορεί να γραφεί και ως $w^{(1)}x^{(1)} + w^{(2)}x^{(2)} + \dots + w^{(d)}x^{(d)}$ με το d να είναι το πλήθος των χαρακτηριστικών του διανύσματος εισόδου \mathbf{x} .

Με το συμβολισμό $h_{w,b}$ εννοούμε ότι η συνάρτηση πρόβλεψης h παραμετροποιείται από τις δύο ποσότητες w και b . Δύο συναρτήσεις πρόβλεψης που παραμετροποιούνται από διαφορετικά ζεύγη (w, b) πιθανότατα θα παράγουν διαφορετικές προβλέψεις αν εφαρμοστούν στο ίδιο παράδειγμα εισόδου. Θέλουμε να βρούμε τις βέλτιστες τιμές (w^*, b^*) για τις παραμέτρους w και b καθώς μέσω αυτών η συνάρτηση h παράγει τις πιο ακριβείς προβλέψεις.

Η βασική προϋπόθεση που πρέπει να πληρείτε για να βρεθούν οι τιμές (w^*, b^*) είναι πώς το υπερεπίπεδο που εκφράζει η συνάρτηση πρόβλεψης πρέπει να βρίσκεται όσο πιο κοντά γίνεται στα παραδείγματα εκπαίδευσης $\{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1}^m$. Μπορούμε να καταλάβουμε τη σημασία της παραπάνω προϋπόθεσης αναλύοντας το Σχήμα 6. Σε αυτό αναπαρίσταται η γραμμή παλινδρόμησης (μπλε γραμμή) για μονοδιάστατα παραδείγματα εισόδου x . Έχουμε τη δυνατότητα να χρησιμοποιήσουμε τη γραμμή παλινδρόμησης για να προβλέψουμε την τιμή μιας μεταβλητής στόχου y_{new} για κάποια νέο μη αναγνωρισμένο δείγμα εισόδου x_{new} .

Άλλωστε, αν τα δεδομένα εισόδου είναι διανύσματα χαρακτηριστικών d διαστάσεων, η μόνη διαφορά σε σχέση με την παραπάνω ανάλυση που αφορά δεδομένα μιας διάστασης είναι ότι το μοντέλο της παλινδρόμησης δεν θα είναι γραμμή αλλά επίπεδο για $d = 2$ ή υπερεπίπεδο για $d > 2$.



Σχήμα 6: Γραμμική Παλινδρόμηση για Μονοδιάστατα Παραδείγματα.[12]

Προκειμένου να ικανοποιήσουμε την προϋπόθεση το γραμμικό μοντέλο μας να βρίσκεται όσο πιο κοντά γίνεται στα σημεία εκπαίδευσης πρέπει να φέρουμε σε πέρας μια διαδικασία βελτιστοποίησης (optimization procedure). Αυτή η διαδικασία περιλαμβάνει την εύρεση των βέλτιστων τιμών (w^*, b^*) για τις παραμέτρους (w, b) ελαχιστοποιώντας την ακόλουθη σχέση:

$$\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (h_{w,b}(\mathbf{x}_i) - y_i)^2$$

Η παραπάνω σχέση ονομάζεται αντικειμενική συνάρτηση (objective function) ενώ η έκφραση $(h_{w,b}(\mathbf{x}_i) - y_i)^2$ είναι γνωστή σαν συνάρτηση απωλειών (loss function). Εν γένει η συνάρτηση απωλειών αποτελεί ένα μέτρο ποιότητας αναφορικά με την μη ορθή ταξινόμηση του παραδείγματος i . Η συγκεκριμένη συνάρτηση απωλειών ονομάζεται συνάρτηση απωλειών τετραγωνισμένου σφάλματος (squared error loss). Όλοι οι αλγόριθμοι μάθησης που βασίζονται σε μοντελοποίηση διαθέτουν μια συνάρτηση απωλειών. Η διαδικασία που ακολουθείται για να βρεθεί το βέλτιστο από τα μοντέλα είναι να προσπαθήσουμε να ελαχιστοποιήσουμε τις απώλειες για κάθε παράδειγμα. Η ποσότητα που εκφράζει το σύνολο των απωλειών για κάθε παράδειγμα ονομάζεται συνάρτηση κόστους και αυτή καλούμαστε να ελαχιστοποιήσουμε με κάποια διαδικασία βελτιστοποίησης.

Στη περίπτωση της γραμμικής παλινδρόμησης, η συνάρτηση κόστους προκύπτει από το μέσο όρο των απωλειών που ονομάζεται εμπειρικό ρίσκο (empirical risk). Άλλωστε το εμπειρικό ρίσκο για ένα

μοντέλο προκύπτει από το μέσο όρο όλων των ποινών που προέκυψαν με την εφαρμογή του μοντέλου στα δεδομένα εκπαίδευσης.

2.4 Η Αναγνώριση της Νόσου Alzheimer ως Πρόβλημα Ταξινόμησης

Με βάση την ως τώρα ανάλυση έχουμε τη δυνατότητα να κατηγοριοποιήσουμε το ερευνητικό ερώτημα της εργασίας ως ένα πρόβλημα επιβλεπόμενης δυαδικής ταξινόμησης. Πιο συγκεκριμένα το πρόβλημα δομείται πάνω στις εξής παραδοχές:

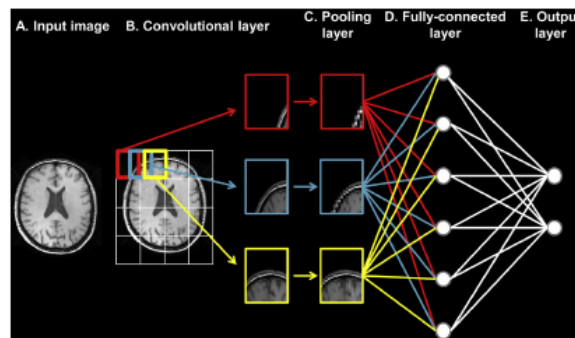
- Τα δεδομένα εισόδου x είναι διανυσματικές απεικονίσεις από τροπικότητες δομικής μαγνητικής τομογραφίας (structural magnetic resonance images).
- Οι κλάσεις και ταυτόχρονα ετικέτες της δυαδικής ταξινόμησης είναι οι υγιείς και ασθενείς οργανισμοί.
- Η διαδικασία βελτιστοποίησης περιλαμβάνει την ελαχιστοποίηση της συνάρτησης κόστους διεντροπίας (CrossEntropy)

$$CE = -y \ln(h) - (1 - y) \ln(1 - h)$$

με χρήση του αλγορίθμου βελτιστοποίησης Adam [13].

- Η εύρεση των βέλτιστων παραμέτρων του μοντέλου πραγματοποιείται μέσω της διαδικασίας εκπαίδευσης ενός συνελκτικού νευρωνικού δικτύου.

Μια απλή αναπαράσταση της διαδικασίας που θα ακολουθηθεί για την επίλυση του του προβλήματος φαίνεται στο Σχήμα 7. Η εικόνα μαγνητικής τομογραφίας εισάγεται στο συνελκτικό νευρωνικό δίκτυο, το οποίο την επεξεργάζεται και δίνει μια εκτίμηση για την κλάση στην οποία ανήκει.



Σχήμα 7: Το Συνελκτικό Νευρωνικό Δίκτυο ως Εργαλείο Ταξινόμησης sMRI.[14]

Κεφάλαιο 3

Σχετική Έρευνα

Στο συγκεκριμένο κεφάλαιο παρουσιάζονται συνοπτικά οι ερευνητικές εργασίες που σχετίζονται με την διαδικασία αναγνώρισης της νόσου Alzheimer. Ειδικότερα εξετάζονται εργασίες που χρησιμοποιούν σαν τεχνικές αναγνώρισης της νόσου, κλασικές μεθόδους επιβλεπόμενης μηχανικής μάθησης όπως οι Μηχανές Διανυσματικής Υποστήριξης (Support Vector Machines), ο αλγόριθμος κ-Κοντινότερων Γειτόνων (k-Nearest Neighbors Algorithm) και τα Δέντρα Απόφασης (Decision Trees).

3.1 Ερευνητικές Προσπάθειες Επιβλεπόμενης Αναγνώρισης της Νόσου Alzheimer

Στο παρόν κεφάλαιο παρατίθενται συνοπτικά οι ερευνητικές εργασίες που σχετίζονται με την επιβλεπόμενη αναγνώριση της νόσου Alzheimer με χρήση παραδοσιακών αλγορίθμων μηχανικής μάθησης εξαιρουμένων αυτών της βαθιάς μάθησης που αναλύονται στο 5. Μια επιγραμματική επεξήγηση του τρόπου λειτουργίας κάθε αλγορίθμου προηγείται της παρουσίασης των εργασιών.

3.1.1 Μηχανές Διανυσματικής Υποστήριξης

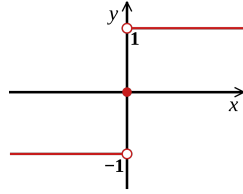
Οι μηχανές διανυσματικής υποστήριξης (support vector machines) αποτελούν εργαλεία μάθησης, τα οποία εισήγαγε στην επιστημονική κοινότητα ο V. Vapnik το 1998 [15]. Η ευρεία χρήση τους στο χώρο της μηχανικής μάθησης οφείλεται σε τρεις βασικούς παράγοντες [16]:

1. Στη δυνατότητά τους να επιδεικνύουν ικανοποιητικά αποτελέσματα μαθαίνοντας από διανύσματα εισόδου \mathbf{x} με μικρό πλήθος χαρακτηριστικών.
2. Στην ανθεκτικότητα που επιδεικνύουν στη πραγματοποίηση λαθών
3. Στη μικρή υπολογιστική επιβάρυνση που επιφέρουν συγκριτικά με άλλα εργαλεία όπως τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα.

Ο αλγόριθμος των μηχανών διανυσματικής υποστήριξης στηρίζει την λειτουργία του στην αποτύπωση των χαρακτηριστικών του διανύσματος εισόδου \mathbf{x} σε ένα χώρο διάστασης ίσης με το πλήθος των χαρακτηριστικών. Λαμβάνοντας υπόψιν την αναπαράσταση αυτή, ο αλγόριθμος προσπαθεί να διαχωρίσει τα διανύσματα χαρακτηριστικών, μέσω ενός υπερεπιπέδου, σε δύο χωρία που αντιστοιχίζονται στις κλάσεις ενδιαφέροντος. Αυτό το διαχωριστικό υπερεπίπεδο μεταξύ των εμπλεκόμενων κλάσεων ονομάζεται σύνορο απόφασης (decision boundary) [17].

Η εξίσωση του υπερεπιπέδου εκφράζεται μέσω δύο παραμέτρων, ενός διανύσματος πραγματικών τιμών \mathbf{w} , ίσης διάστασης με το διάνυσμα χαρακτηριστικών εισόδου \mathbf{x} και ενός πραγματικού αριθμού b από τη σχέση $\mathbf{w}\mathbf{x} - b = 0$.

Επιπλέον, η εκτιμώμενη ετικέτα y για ένα διάνυσμα χαρακτηριστικών \mathbf{w} δίνεται από τον τύπο $y = \text{sign}(\mathbf{w}\mathbf{x} - b)$ και λαμβάνει τις τιμές -1 και 1 σύμφωνα με το γράφημα της συνάρτησης που φαίνεται στο Σχήμα 8:



Σχήμα 8: Η Συνάρτηση $y = \text{sign}(x)$.¹

Σκοπός κάθε αλγορίθμου μάθησης και των μηχανών διανυσματικής υποστήριξης εν προκειμένω είναι να εκμεταλλευτούν το σετ δεδομένων ώστε να προσδιορίσουν τις βέλτιστες τιμές (\mathbf{w}^*, b^*) για τις παραμέτρους (\mathbf{w}, b) . Μόλις ο αλγόριθμος μάθησης εντοπίσει αυτές τις τιμές για τις παραμέτρους, τότε το μοντέλο $h(\mathbf{x})$ ορίζεται ως :

$$h(\mathbf{x}) = \text{sign}(\mathbf{w}^* \mathbf{x} - b^*)$$

Πώς όμως βρίσκει ο αλγόριθμος μάθησης τις τιμές (\mathbf{w}^*, b^*) ? Όπως αναφέραμε και στο 2 ουσιαστικά προσπαθεί να λύσει ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης, το οποίο δομείται υπό περιορισμούς. Υπενθυμίζουμε πως κάθε παράδειγμα εκπαίδευσης i δίνεται από το ζεύγος $(\mathbf{x}_i), y_i$ με το \mathbf{x}_i να είναι το διάνυσμα χαρακτηριστικών για το παράδειγμα i και το y_i να είναι η ετικέτα για το εν λόγω παράδειγμα που στην προκειμένη περίπτωση λαμβάνει τις τιμές -1 ή $+1$. Οπότε είναι λογικό να θεωρήσουμε τους περιορισμούς του προβλήματος ως :

- $\mathbf{w}\mathbf{x}_i - b \geq 1$ εάν $y_i = +1$
- $\mathbf{w}\mathbf{x}_i - b \leq -1$ εάν $y_i = -1$

Επιπλέον επιθυμούμε το υπερεπίπεδο που διαχωρίζει τα θετικά από τα αρνητικά παραδείγματα να είναι αυτό με το μεγαλύτερο περιθώριο (margin) μεταξύ των κλάσεων. Με τον όρο περιθώριο αναφερόμαστε στην απόσταση μεταξύ των δύο κοντινότερων παραδειγμάτων των δύο κλάσεων όπως αυτές διαχωρίζονται από το σύνορο απόστασης. Ένα μεγάλο περιθώριο συνεισφέρει στην καλύτερη δυνατότητα του μοντέλου για γενίκευση (generalization) της λειτουργίας του, κατηγοριοποιώντας αποτελεσματικά μελλοντικά παραδείγματα εισόδου. Για να επιτευχθεί κάτι τέτοιο χρειάζεται να ελαχιστοποιήσουμε τη λεγόμενη Ευκλείδεια νόρμα του \mathbf{w} :

$$\|\mathbf{w}\| = \sqrt{\sum_{j=1}^d (w^{(j)})^2}.$$

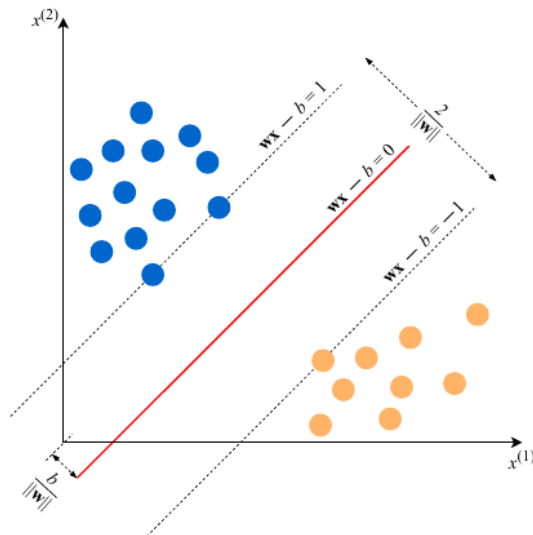
Τελικά το πρόβλημα βελτιστοποίησης, το οποίο καλείται να επιλύσει το υπολογιστικό σύστημα συνοψίζεται στην εξής πρόταση :

$$\text{Ελαχιστοποίηση } \|\mathbf{w}\| \text{ με την εξάρτηση } y_i(\mathbf{w}\mathbf{x}_i - b) \geq +1 \text{ για } i = 1, \dots, m.$$

Η λύση του παραπάνω προβλήματος που όπως είπαμε δίνεται από το ζεύγος (\mathbf{w}^*, b^*) ονομάζεται στατιστικό μοντέλο (statistical model) ή απλά μοντέλο (model). Η διαδικασία εύρεσης της λύσης και δημιουργίας του μοντέλου ονομάζεται εκπαίδευση (training).

¹ https://en.wikipedia.org/wiki/Sign_function

Για διανύσματα χαρακτηριστικών δύο διαστάσεων, το πρόβλημα και η λύση οπτικοποιούνται στο Σχήμα 9. Οι μπλε και πορτοκαλί κύκλοι αναπαριστούν αντίστοιχα τα θετικά και αρνητικά παραδείγματα και η γραμμή που δίνεται από την εξίσωση $\mathbf{w}\mathbf{x} - \mathbf{b} = 0$ αποτελεί το σύνορο απόφασης. Ειδικότερα, μπορούμε και γεωμετρικά να δούμε γιατί ελαχιστοποιώντας την νόρμα του \mathbf{w} βρίσκουμε το υπερεπίπεδο που μεγιστοποιεί το περιθώριο μεταξύ των δύο κλάσεων. Οι εξισώσεις $\mathbf{w}\mathbf{x} - \mathbf{b} = +1$ και $\mathbf{w}\mathbf{x} - \mathbf{b} = -1$ ορίζουν δύο παράλληλα υπερεπίπεδα με τη μεταξύ τους απόσταση να είναι $\frac{2}{\|\mathbf{w}\|}$ οπότε όσο μικρότερη η νόρμα $\|\mathbf{w}\|$ τόσο μεγαλύτερη και η απόσταση μεταξύ των δύο υπερεπιπέδων.

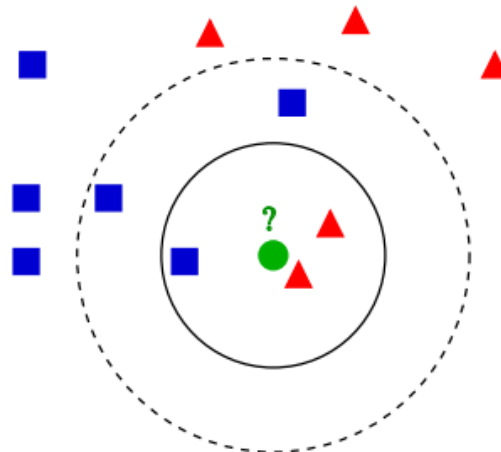


Σχήμα 9: Μοντέλο SVM για Διανύσματα Χαρακτηριστικών Δύο Διαστάσεων.[12]

3.1.2 Αλγόριθμος κ-Κοντινότερων Γειτόνων

Ο αλγόριθμος κοντινότερων γειτόνων (nearest neighbor algorithm) θεωρείται η απλούστερη μη παραμετρική διαδικασία κατηγοριοποίησης [18]. Ο τρόπος με τον οποίο ανατίθεται μια μη κατηγοριοποιημένη παρατήρηση σε κάποια κλάση, στηρίζεται στην ιδέα της μετρικής απόστασης (metric distance) [19]. Πιο συγκεκριμένα, σε ένα τυχαίο δείγμα επιλέγουμε να αναθέσουμε την κλάση εκείνη που περιέχει κάποιο παράδειγμα που απέχει τη μικρότερη μετρική απόσταση από την υπό κατηγοριοποίηση παρατήρηση.

Ο αλγόριθμος κ-κοντινότερων γειτόνων είναι μια ειδική περίπτωση του αλγορίθμου κοντινότερων γειτόνων. Ουσιαστικά πρόκειται για μια μη παραμετρική αλγοριθμική διαδικασία μάθησης που σε αντίθεση με άλλους αλγορίθμους μάθησης διατηρεί στη μνήμη του τα δεδομένα εκπαίδευσης ακόμα και όταν αυτή έχει ολοκληρωθεί και δεν τα ξεφορτώνεται. Έτσι όταν ένα ως τώρα απαρατήρητο δείγμα x εμφανιστεί ως είσοδος, ο kNN αλγόριθμος βρίσκει τα k πιο κοντινά παραδείγματα εκπαίδευσης σε αυτό και επιστρέφει γι' αυτό την πλειοψηφική ετικέτα που προκύπτει από την σύγκριση των ετικετών των k παραδειγμάτων. εμφανιστεί ως είσοδος, ο kNN αλγόριθμος βρίσκει τα k πιο κοντινά παραδείγματα εκπαίδευσης σε αυτό και επιστρέφει γι' αυτό την πλειοψηφική ετικέτα που προκύπτει από την σύγκριση των ετικετών των k παραδειγμάτων. Για παράδειγμα, στο Σχήμα 10, προσπαθούμε να κατηγοριοποιήσουμε το πράσινο απαρατήρητο δείγμα μέσω kNN. Αν επιλέξουμε $k = 3$, βλέπουμε ότι στο χωρίο της μαύρης γραμμής, το πράσινο δείγμα συνορεύει με περισσότερα κόκκινα παραδείγματα από ότι μπλε άρα η πλειοψηφική ετικέτα που του αποδίδεται είναι η κόκκινη. Στην περίπτωση όπου $k = 5$, πλέον το χωρίο που περιγράφει το πρόβλημά μας ορίζεται από την διακεκομμένη γραμμή. Αυτή περικλείει 5 παραδείγματα και πλέον η πλειοψηφική ετικέτα για το δείγμα μας είναι η μπλε.



Σχήμα 10: Αλγόριθμος kNN με $k = 3$ (μαύρη γραμμή) και $k = 5$ (διακεκομμένη γραμμή).[20]

Επιστρέφοντας στην προηγούμενη ανάλυσή μας, η εγγύτητα δύο διανυσμάτων \mathbf{x}, \mathbf{y} η διάστασης δίνεται από μια συνάρτηση απόστασης d . Μια συνάρτηση απόστασης θεωρείται μετρική αν ικανοποιεί τις παρακάτω ιδιότητες από [21]:

- **Μη αρνητικότητα (Non-negativity):** Η απόσταση μεταξύ των \mathbf{x}, \mathbf{y} είναι πάντα μια πραγματική τιμή μεγαλύτερη ή ίση του μηδενός.

$$d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \geq 0$$

- **Ταυτότητα των αδιόρατων (Identity of indiscernibles):** Η απόσταση μεταξύ των \mathbf{x}, \mathbf{y} είναι ίση με μηδέν αν και μόνο αν \mathbf{x} είναι ίσο με το \mathbf{y} .

$$d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0 \Leftrightarrow \mathbf{x} = \mathbf{y}$$

- **Συμμετρία (Symmetry):** Η απόσταση μεταξύ των \mathbf{x}, \mathbf{y} είναι ίση με την απόσταση μεταξύ των \mathbf{x}, \mathbf{y} .

$$d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = d(\mathbf{y}, \mathbf{x})$$

- **Τριγωνική ανισότητα (Triangle inequality):** Θεωρώντας την ύπαρξη ενός τρίτου διανύσματος \mathbf{z} , η απόσταση μεταξύ των \mathbf{x} και \mathbf{y} είναι πάντα μικρότερη ή ίση με το άθροισμα της απόστασης μεταξύ \mathbf{z}, \mathbf{x} και της απόστασης μεταξύ \mathbf{z}, \mathbf{y} .

$$d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \leq d(\mathbf{x}, \mathbf{z}) + d(\mathbf{z}, \mathbf{y})$$

Πιθανές επιλογές συναρτήσεων απόστασης για τον αλγόριθμο kNN δίνονται στους Πίνακες 2, 3 που δημιουργήθηκαν με βάση το [22]. Ο Πίνακας 2 εμπεριέχει συναρτήσεις που αποτελούν ειδικές περιπτώσεις της γενικής συνάρτησης απόστασης Minkowski: $D_{Mink}(x, y) = \sqrt[p]{\sum_{i=1}^n |x_i - y_i|^p}$. Επιπλέον στον Πίνακα 3 περιλαμβάνονται περιπτώσεις συναρτήσεων απόστασης, οι οποίες στηρίζουν την προέλευση τους στον υπολογισμό του εσωτερικού γινομένου δύο διανυσμάτων \mathbf{x}, \mathbf{y} .

Abbreviation	Name	p value	Definition
MD	Manhattan	1	$\sum_{i=1}^n x_i - y_i $
ED	Euclidean	2	$\sqrt{\sum_{i=1}^n x_i - y_i ^2}$
CD	Chebychev	∞	$\max_i x_i - y_i $

Πίνακας 2: Συναρτήσεις Απόστασης για τον Αλγόριθμο kNN με βάση την D_{Mink} . [22]

Abbreviation	Name	Definition
JacD	Jaccard Distance	$\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2}{\sum_{i=1}^n x_i^2 + \sum_{i=1}^n y_i^2 + \sum_{i=1}^n x_i y_i}$
CosD	Cosine Distance	$1 - \frac{\sum_{i=1}^n x_i y_i}{\sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n y_i^2}}$
DicD	Dice Distance	$1 - \frac{2 \sum_{i=1}^n x_i y_i}{\sum_{i=1}^n x_i^2 + \sum_{i=1}^n y_i^2}$

Πίνακας 3: Συναρτήσεις Απόστασης για τον Αλγόριθμο kNN με Βάση το Εσωτερικό Γινόμενο.[22]

Με βάση τις ως τώρα πληροφορίες, γνωρίζουμε τον τρόπο με τον οποίο ο αλγόριθμος kNN πραγματοποιεί τις προβλέψεις του. Ωστόσο δεν έχουμε ορίσει αυστηρά ποια είναι η συνάρτηση κόστους την οποία προσπαθεί να ελαχιστοποιήσει ο αλγόριθμος μάθησης. Υπενθυμίζουμε ότι ο αλγόριθμος kNN δεν είναι παραμετρικός αλγόριθμος μάθησης αλλά στηρίζεται στη μάθηση κατά περιστατικά (instance based learning) [23]. Αυτό σημαίνει ότι η λύση της διαδικασίας βελτιστοποίησης της συνάρτησης κόστους στη προκειμένη περίπτωση, δεν θα συνεισφέρει στην εύρεση βέλτιστων τιμών για κάποιες παραμέτρους με βάση το σύνολο εκπαίδευσης, όπως συνέβη με τους αλγορίθμους της γραμμικής παλινδρόμησης και των μηχανών διανυσματικής υποστήριξης που έχουμε δει ως τώρα. Στους αλγορίθμους μάθησης κατά περιστατικά δεν υπάρχει σετ εκπαίδευσης αλλά χρησιμοποιείται ολόκληρο το σετ δεδομένων για τη δόμηση του μη παραμετρικού μοντέλου.

Επιστρέφοντας στην ανάλυση μας, μια προσπάθεια για την αποτύπωση της συνάρτησης κόστους που καλείται να ελαχιστοποιήσει ο αλγόριθμος kNN δίνεται στο [24]. Πιο συγκεκριμένα, θεωρώντας ότι :

- Καλούμαστε να επιλύσουμε πρόβλημα διαδικής ταξινόμησης όπου $y \in \{0, 1\}$.
- Η συνάρτηση απόστασης $d = 1 - s$ στηρίζεται στην ομοιότητα συνημιτόνων δύο διανυσμάτων \mathbf{x}, \mathbf{z} διάστασης n μέσω της $s = \frac{\sum_{i=1}^n x_i z_i}{\sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n z_i^2}}$.
- Διαχειριζόμαστε κανονικοποιημένα² διανύσματα χαρακτηριστικών \mathbf{x} .

μπορούμε να υποθέσουμε ότι ο αλγόριθμος kNN επιτελεί ένα είδος τοπικής γραμμικής ταξινόμησης με χρήση του λεγόμενου διανύσματος συντελεστών (vector of coefficients) :

$$\mathbf{w}_x = \sum_{(\mathbf{x}', y') \in R_k(\mathbf{x})} y' \mathbf{x}'.$$

Στη παραπάνω σχέση η ποσότητα $R_k(\mathbf{x})$ αντιπροσωπεύει το σύνολο των k πλησιέστερων γειτόνων στο δείγμα εισόδου \mathbf{x} . Πρακτικά, η εξίσωση δηλώνει ότι λαμβάνουμε το άθροισμα όλων των διανυσμάτων χαρακτηριστικών \mathbf{x}' , που αποτελούν τους κοντινότερους γείτονες του δείγματος εισόδου \mathbf{x} μαζί με τις αντίστοιχες για αυτά ετικέτες y' . Το όριο ταξινόμησης παράγεται θέτοντας ένα φράγμα για το εσωτερικό γινόμενο $\mathbf{w}_x \mathbf{x}$, το οποίο στη περίπτωση κανονικοποιημένων διανυσμάτων χαρακτηριστικών ισούται με την ομοιότητα συνημιτόνων μεταξύ των \mathbf{w}_x και \mathbf{x} . Τελικά ορίζουμε την συνάρτηση κόστους στη προκειμένη περίπτωση ως :

$$L = - \sum_{(\mathbf{x}', y') \in R_k(\mathbf{x})} y' \mathbf{x}' \mathbf{w}_x + \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2.$$

Αλλωστε θέτοντας την παράγωγο $\frac{\partial L}{\partial \mathbf{w}_x} = 0$ λαμβάνουμε την εξίσωση για τα διανύσματα συντελεστών

$$\mathbf{w}_x = \sum_{(\mathbf{x}', y') \in R_k(\mathbf{x})} y' \mathbf{x}'.$$

² $\|\mathbf{x}\| \in [0, 1]$

Σαν τελική παρατήρηση, αξίζει να αναφερθεί ότι οι ταξινομητές kNN αποτελούν εύχρηστα και αποτελεσματικά εργαλεία ταξινόμησης, εφόσον τους παρέχονται δύο στοιχεία :

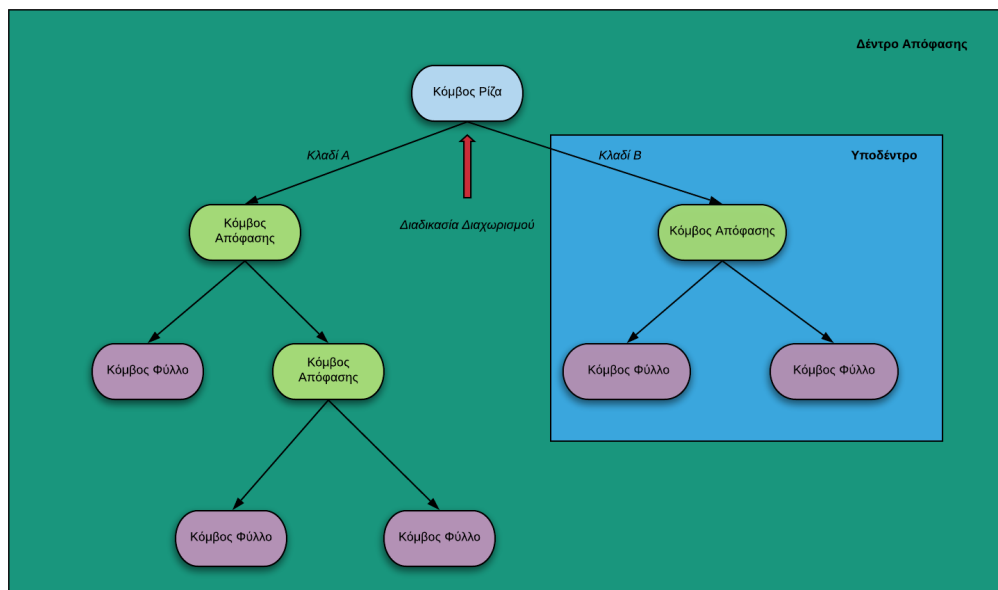
1. μια συνάρτηση απόστασης που αντιστοιχίζεται ικανοποιητικά στο υπό εξέταση πρόβλημα
2. αρκετά ζεύγη παραδειγμάτων εκπαίδευσης και ετικετών (x, y)

Ωστόσο αντιμετωπίζουν προβλήματα στην διαχείριση δεδομένων εισόδου υψηλών διαστάσεων [10]. Η αδυναμία αποτελεσματικής λειτουργίας τους σε περιβάλλοντα υψηλών διαστάσεων πηγάζει από τη λεγόμενη **κατάρα της διαστατικότητας (curse of dimensionality)** [25].

3.1.3 Δέντρα Αποφάσεων

Τα δέντρα αποφάσεων (decision trees) είναι ακολουθιακά μοντέλα, τα οποία δομούνται πάνω στη λογική της πραγματοποίησης διαδοχικών συγκρίσεων των χαρακτηριστικών ενός δείγματος εισόδου και συγκεκριμένων τιμών κατωφλίου (threshold values) [26]. Οι συγκρίσεις αυτές ονομάζονται δοκιμές. Τα μοντέλα των δέντρων απόφασης έχουν την ικανότητα να επιλύσουν τόσο προβλήματα παλινδρόμησης όσο και ταξινόμησης αλλά λόγω της κατηγορικής φύσης τους επιλέγονται κυρίως για τη λύση του τελευταίου είδους προβλημάτων. Πολλοί αλγόριθμοι δημιουργίας δέντρων απόφασης έχουν αναπτυχθεί μέσα στο χρόνο όπως για παράδειγμα ο ID3 [27], ο CART [28], ο SPRINT [29] και ο SLIQ [30].

Στο Σχήμα 11 απεικονίζονται τα βασικά συστατικά στοιχεία ενός δέντρου απόφασης.



Σχήμα 11: Συστατικά Στοιχεία ενός Δέντρου Απόφασης

Πιο συγκεκριμένα διακρίνουμε :

1. Τον *κόμβο ρίζα* που αναπαριστά το χαρακτηριστικό με βάση το οποίο ξεκινά η ακολουθιακή πορεία που θα ακολουθήσει το δείγμα εισόδου.
2. Την *διαδικασία διαχωρισμού* κατά την οποία το χαρακτηριστικό του κόμβου ρίζας διαχωρίζεται στις πιθανές τιμές που μπορεί να λάβει
3. Τον *κόμβο απόφασης* που εμπεριέχει το επόμενο χαρακτηριστικό του δείγματος εισόδου που εξετάζει το δέντρο απόφασης.

4. Τον *κόμβο φύλλο* που περιλαμβάνει την τελική απόφαση της συλλογιστικής πορείας που ακολούθησε το δέντρο απόφασης και αντιστοιχεί στην ετικέτα που ανατίθεται στο δείγμα εισόδου.

Άλλωστε η διαδικασία δόμησης καθώς και η συλλογιστική πορεία διάσχισης ενός δέντρου απόφασης πάνω σε κάποιο δείγμα εισόδου φαίνονται στο Σχήμα 12 όπου εξετάζουμε τη δυνατότητα μας να παίξουμε Golf ανάλογα με τις καιρικές συνθήκες που επικρατούν [27].



Σχήμα 12: Παράδειγμα Συλλογιστικής ενός Δέντρου Απόφασης.³

Στο εν λόγω παράδειγμα, αν εισάγουμε στο δέντρο απόφασης το πρώτο δείγμα εισόδου που αποτελείται από την πρώτη γραμμή του αριστερού Πίνακα του Σχήματος 12, μπορούμε ακολουθιακά να εξάγουμε την ετικέτα που τού αντιστοιχεί ακολουθώντας τη συλλογιστική πορεία του δέντρου απόφασης. Έτσι, ξεκινώντας με το χαρακτηριστικό Outlook ως κόμβο ρίζα και βλέποντας την τιμή Rainy που λαμβάνει με βάση την πρώτη γραμμή του Πίνακα, αντιλαμβανόμαστε ότι πρέπει να ακολουθήσουμε τη πορεία του δεξιότερου υποδέντρου. Στη συνέχεια ακολουθώντας την ίδια λογική για το χαρακτηριστικό Humidity που λαμβάνει την τιμή High αντιλαμβανόμαστε ότι η απόφαση μας για το αν θα παίξουμε τελικά Golf θα είναι αρνητική.

Υπάρχουν αρκετοί τρόποι σύνθεσης του αλγορίθμου των δέντρων απόφασης, ωστόσο στα πλαίσια της εργασίας θα εξετάσουμε τη μέθοδο ID3 (Iterative Dichotomiser 3) [27].

Η αντικειμενική συνάρτηση του προβλήματος είναι η μέση λογαριθμική πιθανοφάνεια :

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i \ln f_{ID3}(\mathbf{x}_i) + (1 - y_i) \ln(1 - f_{ID3}(\mathbf{x}_i))$$

όπου η ποσότητα f_{ID3} είναι ένα δέντρο απόφασης. Ο αλγόριθμος ID3 προσπαθεί να βρει μια λύση στο πρόβλημα βελτιστοποίησης παράγοντας ένα **μη παραμετρικό μοντέλο**:

$$f_{ID3}(\mathbf{x}) \stackrel{\text{def}}{=} \Pr(y = 1 | \mathbf{x}).$$

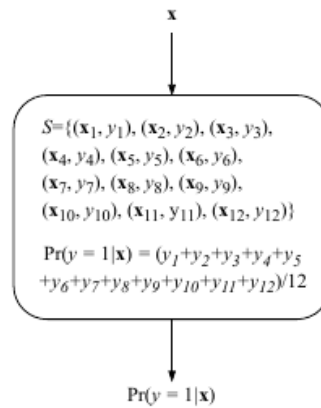
Προκειμένου να εξηγήσουμε το τρόπο λειτουργίας του αλγορίθμου ID3 οφείλουμε να εισάγουμε κάποιους συμβολισμούς. Αρχικά θεωρούμε ένα σύνολο S που περιλαμβάνει N το πλήθος παραδειγμάτων \mathbf{x}_i με τις αντίστοιχες ετικέτες τους y_i . Το εν λόγω σύνολο συμβολίζεται ως $S \stackrel{\text{def}}{=} \{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1}^N$.

Σε πρώτο στάδιο, ο αλγόριθμος ξεκινάει με ένα σταθερό μοντέλο

$$f_{ID3}^S = \frac{1}{|S|} \sum_{(\mathbf{x}, y) \in S} y$$

όπου οι προβλέψεις $\Pr(y = 1 | \mathbf{x})$ για κάθε στοιχείο εισόδου \mathbf{x} θα είναι ίδιες όπως φαίνεται στο Σχήμα 13.

³ https://medium.com/@rishabhjain_22692/decision-trees-it-begins-here-93ff54ef134

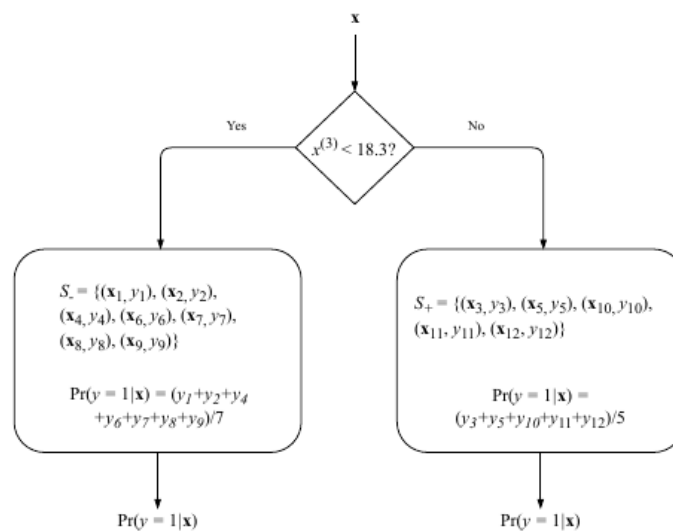


Σχήμα 13: DT Σταθερού Μοντέλου ID3.[12]

Στη συνέχεια ξεκινάμε τη προσπέλαση των χαρακτηριστικών $x^{(j)}$ όπου $j = 1, \dots, d$ και με βάση τις τιμές κατωφλίου t χωρίζουμε το σύνολο \mathbf{S} σε δύο υποσύνολα:

- $\mathbf{S}_- \stackrel{\text{def}}{=} \{(\mathbf{x}, y) \mid (\mathbf{x}, y) \in \mathbf{S}, x^{(j)} < t\}$.
- $\mathbf{S}_+ \stackrel{\text{def}}{=} \{(\mathbf{x}, y) \mid (\mathbf{x}, y) \in \mathbf{S}, x^{(j)} \geq t\}$.

Η παραπάνω διαδικασία διαχωρισμού με βάση το χαρακτηριστικό 3 των δειγμάτων εισόδου \mathbf{x} και τιμή κατωφλίου $t = 18.3$ φαίνεται στο Σχήμα 14.



Σχήμα 14: Διαδικασία Διαχωρισμού ενός DT.[12]

Προκειμένου να καθορίσουμε την ποιότητα του διαχωρισμού του \mathbf{S} σε \mathbf{S}_- και \mathbf{S}_+ εισάγουμε την έννοια της *εντροπίας*. Η εντροπία αποτελεί ένα μέτρο για την τυχαιότητα μιας τυχαίας μεταβλητής. Πιο συγκεκριμένα, η εντροπία $H \in [0, 1]$ με :

- $H = 0$ όταν η τυχαία μεταβλητή που εξετάζουμε μπορεί να λάβει μονάχα μια τιμή με πιθανότητα $\text{Pr} = 1$. Σε αυτή τη περίπτωση δεν εμπεριέχεται καθόλου το στοιχείο της τυχαιότητας στη διαδικασία ανάθεσης τιμής στην τυχαία μεταβλητή.
- $H = 1$ όταν η τυχαία μεταβλητή που εξετάζουμε μπορεί να λάβει τις δυνατές για αυτή τιμές με ισοπίθανο τρόπο. Σε αυτή τη περίπτωση η διαδικασία ανάθεσης τιμής στην τυχαία μεταβλητή

στηρίζεται πλήρως στην τύχη εφόσον οι πιθανότητες λήψης των δυνατών τιμών της τυχαίας μεταβλητής είναι ίσες μεταξύ τους.

Συνεχίζοντας την ανάλυση μας, η εντροπία ενός συνόλου παραδειγμάτων \mathbf{S} δίνεται από τον τύπο

$$H(\mathbf{S}) = -f_{ID3}^S \ln f_{ID3}^S - (1 - f_{ID3}^S) \ln(1 - f_{ID3}^S).$$

Έτσι όταν διαχωρίζουμε ένα σύνολο παραδειγμάτων με βάση ένα συγκεκριμένο χαρακτηριστικό $x^{(j)}$ και μια τιμή κατωφλίου t , η εντροπία του διαχωρισμού $H(\mathbf{S}_-, \mathbf{S}_+)$ είναι ο σταθμισμένος μέσος όρος:

$$H(\mathbf{S}_-, \mathbf{S}_+) = \frac{|\mathbf{S}_-|}{|\mathbf{S}|} H(\mathbf{S}_-) + \frac{|\mathbf{S}_+|}{|\mathbf{S}|} H(\mathbf{S}_+).$$

Αρα ο αλγόριθμος ID3 σε κάθε βήμα, υπολογίζει για κάθε κόμβο φύλλο, ένα διαχωρισμό που ελαχιστοποιεί τη τιμή της εντροπίας της παραπάνω εξίσωσης, αλλιώς σταματάει στο εν λόγω φύλλο. Είναι σημαντικό να καταλάβουμε γιατί επιθυμούμε η εντροπία του διαχωρισμού $(\mathbf{S}_-, \mathbf{S}_+)$ να ελαχιστοποιείται.

Η ελαχιστοποίηση της εντροπίας συνεπάγεται ότι με τον υπάρχοντα διαχωρισμό, οι πιθανές τιμές που μπορούν να λάβουν τα στοιχεία που ανήκουν στα δύο σύνολα $(\mathbf{S}_-, \mathbf{S}_+)$ συγκεκριμενοποιούνται όσο το δυνατόν περισσότερο γύρω από κάποια επιθυμητά ύψη. Πιο απλά, αν επιθυμούσαμε να επιτύχουμε δυαδική ταξινόμηση κάποιου τυχαίου δείγματος \mathbf{x}_i , θα θέλαμε με μεγάλη πιθανότητα τα στοιχεία του συνόλου \mathbf{S}_- να λαμβάνουν την τιμή 0, ενώ τα στοιχεία του συνόλου \mathbf{S}_+ να λαμβάνουν την τιμή 1 με όσο το δυνατόν μεγαλύτερη πιθανότητα επίσης. Αυτό που επιδιώκουμε ιδανικά είναι τα στοιχεία των συνόλων να λαμβάνουν όλα μια συγκεκριμένη τιμή με $\text{Pr} = 1$, ώστε να μην εμπλέκεται καθόλου το στοιχείο της τυχειότητας στα δύο σύνολα και επομένως η εντροπία για το καθένα να είναι μηδενική. Στη προσπάθειά μας να προσεγγίσουμε αυτή την ιδεατή κατάσταση οδηγούμαστε στην ελαχιστοποίηση της $H(\mathbf{S}_-, \mathbf{S}_+)$

Συνοψίζοντας, μπορούμε να πούμε ότι ο ID3 σταματάει σε κάποιο κόμβο φύλλο στις εξής περιπτώσεις :

1. Όλα τα δείγματα εισόδου για το εν λόγω φύλλο κατηγοριοποιούνται σωστά από το σταθερό μοντέλο

$$f_{ID3}^S = \frac{1}{|\mathbf{S}|} \sum_{(\mathbf{x}, y) \in \mathbf{S}} y.$$

2. Δεν μπορούμε να εντοπίσουμε κάποιο χαρακτηριστικό με βάση το οποίο θα γίνει περαιτέρω διαχωρισμός.
3. Ο διαχωρισμός μειώνει την εντροπία $H(\mathbf{S}_-, \mathbf{S}_+)$ λιγότερο από κάποιο ϵ .
4. Το δέντρο φτάνει κάποιο συγκεκριμένο μέγιστο βάθος.

3.2 Ερευνητικές Εργασίες

Το 2008 ο Klöppel κ.α. δημιούργησαν μία ισχυρή, αυτοματοποιημένη μέθοδο ταξινόμησης του τμήματος της φαιάς ουσίας του εγκεφάλου εξετάζοντας T1 μαγνητικές τομογραφίες από υγιή άτομα και ασθενείς του Alzheimer [31]. Το εργαλείο ταξινόμησης που χρησιμοποιήθηκε ήταν γραμμικές μηχανές διανυσματικής υποστήριξης με έναν από τους κυριότερους στόχους της έρευνας να είναι ο καθορισμός της δυνατότητας αυτού του εργαλείου να πραγματοποιεί εξατομικευμένες διαγνώσεις. Εκτός των άλλων η συγκεκριμένη έρευνα, προσπάθησε να διακρίνει κατά πόσο δεδομένα από διαφορετικά διαγνωστικά κέντρα και διαφορετικό διαγνωστικό εξοπλισμό μπορούν να συνδυαστούν για την εκπαίδευση του ταξινομητή. Τα αποτελέσματα της έρευνας θεωρούνται ιδιαίτερα ενθαρρυντικά καθώς με ένα ποσοστό 96% παρατηρήθηκε ορθή ταξινόμηση ατόμων που ήταν κλινικά αποδεδειγμένοι ασθενείς του Alzheimer έπειτα από νεκροψία. Άλλωστε η εν λόγω μέθοδος θεωρείται ικανή να γενικευθεί σε διαφορετικά διαγνωστικά κέντρα και να χρησιμοποιηθεί σαν επικουρικό εργαλείο για την διάγνωση με χρήση υπολογιστικών ακόμα και σε κλινικά πρακτικό επίπεδο.

Στην εργασία τους το 2009, ο Magnin κ.α. χρησιμοποίησαν επίσης μηχανές διανυσματικής υποστήριξης για την κατηγοριοποίηση υγιών και ασθενών ατόμων [32]. Τα δεδομένα εισόδου του αλγορίθμου ήταν επίσης T1 μαγνητικές τομογραφίες. Στη προκειμένη περίπτωση ωστόσο, ορίσθηκαν σε κάθε μαγνητική τομογραφία κάποιες περιοχές ενδιαφέροντος με την εκμετάλλευση ενός ανατομικού καλουπιού του εγκεφάλου. Έτσι δημιουργήθηκε μια μάσκα με βάση την οποία μπορούσαν να αφαιρεθούν από το κρανίο voxel που περιείχαν θόρυβο. Με βάση τους συγγραφείς, η εν λόγω έρευνα παρουσίασε 94,5% επιτυχή μέση κατηγοριοποίηση ασθενών και υγιών ατόμων και καταλήγουν ότι η μέθοδός τους δύναται να συνεισφέρει στην πρόωμη διάγνωση της νόσου.

Ο Morra κ.α. συνέκριναν στην εργασία τους τέσσερις αυτοματοποιημένες μεθόδους για τον διαχωρισμό της εγκεφαλικής περιοχής του ιππόκαμπου, η οποία θεωρείται ότι σχετίζεται με την εξέλιξη της νόσου Alzheimer [33]. Εντός των τεσσάρων τεχνικών συμπεριλαμβάνονται δύο είδη μηχανών διανυσματικής υποστήριξης όπου το ένα υποστηρίζει αυτοματοποιημένη επιλογή χαρακτηριστικών ενδιαφέροντος ενώ στο άλλο τα χαρακτηριστικά δηλώνονται από τον χρήστη με μη αυτοματοποιημένο τρόπο. Οι συγγραφείς καταλήγουν ότι οι παραπάνω μέθοδοι θεωρήθηκαν ικανές να συλλάβουν επιδράσεις και συσχετισμούς που έχουν άμεση σχέση με τη νόσο Alzheimer.

Μια ακόμα έρευνα που χρησιμοποίησε μηχανές διανυσματικής υποστήριξης για την ταξινόμηση της νόσου Alzheimer δημοσιεύθηκε το 2007 από την Vemuri κ.α. [34]. Η εν λόγω ερευνητική ομάδα ανέπτυξε τρία διαφορετικά μοντέλα ταξινόμησης πάνω σε δεδομένα 190 ατόμων με πιθανή νόσο Alzheimer και 190 υγιών ατόμων. Τα δεδομένα αυτά περιείχαν δομικές μαγνητικές τομογραφίες σε συνδυασμό με γονοτυπικά χαρακτηριστικά που αφορούν την απολιποπρωτεΐνη E καθώς και δημογραφικά στοιχεία που αφορούν την ηλικία και το φύλο των εμπλεκόμενων. Τα συγκεκριμένα μοντέλα κατάφεραν να επιτύχουν συνολική ορθότητα της τάξης του 88.5% και 89.3% αντιστοίχως. Επιπλέον, αξίζει να σημειωθεί, ότι ανατομικά μοτίβα που διαφοροποιούσαν τα δύο συγκρινόμενα σύνολα των ασθενών και υγιών ατόμων και προέκυπταν από την πειραματική διαδικασία ήταν σύμφωνα με τη γνωστή παθολογία της νόσου Alzheimer.

Στον Πίνακα 4, ο οποίος πάρθηκε από την [35] παρατίθενται συγκεντρωτικά μελέτες οι οποίες χρησιμοποίησαν την τεχνική των μηχανών διανυσματικής υποστήριξης για να κατηγοριοποιήσουν υγιή άτομα (healthy controls - HC) από άτομα που έχουν μερική γνωσιακή έκπτωση (mild cognitive impairment - MCI) και άτομα με πιθανή ανοϊκή συνδρομή τύπου Alzheimer (probable dementia of Alzheimer type - PDAT) σε συνδυασμό με τη τροπικότητα εισόδου και την ακρίβεια της κάθε μελέτης.

Author	Comparison	Sample size	Technique	Accuracy (%)
Arimura et al. (2008)	PDAT vs. HC	PDAT = 29 HC = 25	Structural MRI	82.7
Davatzikos et al. (2008)	MCI vs. HC	MCI = 15 HC = 15	Structural MRI	90
Duchesne et al. (2008)	PDAT vs. HC	PDAT = 75 HC = 75	Structural MRI	92
Fan et al. (2008a)	MCI vs. HC	MCI = 15 HC = 15	Structural MRI & PET	100
Ferrarini et al. (2008)	PDAT vs. HC	PDAT = 58 HC = 28	Structural MRI	84
Klöppel et al. (2008a)	PDAT vs. HC	PDAT = 20 HC = 20	Structural MRI	95
	PDAT vs. FTLD	PDAT = 18 FTLD = 19	Structural MRI	89.2
Vemuri et al. (2008)	PDAT vs. HC	PDAT = 190 HC = 190	Structural MRI & genetic data	89.3
Gerardin et al. (2009)	PDAT vs. HC	PDAT = 23 HC = 23	Structural MRI	94
	MCI vs. HC	MCI = 23 HC = 25	Structural MRI	83
Magnin et al. (2009)	PDAT vs. HC	PDAT = 16 HC = 22	Structural MRI	94.5
Haller et al. (2010)	HC vs. MCI	HC = 35 MCI = 67	Structural MRI, DTI FA	91.4
Nho et al. (2010)	PDAT vs. HC	PDAT = 182 HC = 226	Structural MRI	90.5
Oliveira et al. (2010)	PDAT vs. HC	PDAT = 14 HC = 20	Structural MRI	88.2
Plant et al. (2010)	PDAT vs. HC	PDAT = 32 HC = 18	Structural MRI (GM + WM)	90
	MCI vs. HC	MCI = 24 HC = 18	Structural MRI (GM + WM)	97.62
Salas-Gonzalez et al. (2010)	PDAT + MCI vs. HC	PDAT + MCI = 167 HC = 52	PET	86
	PDAT vs. HC	PDAT = 53 HC = 52	PET	95
	MCI vs. HC	MCI = 114 HC = 53	PET	88
Abdulkadir et al. (2011)	PDAT vs. HC	PDAT = 95 HC = 95	Structural MRI (GM)	84.5
Chen et al. (2011)	PDAT vs. HC	PDAT = 21 HC = 20	Resting-state functional MRI	87
	MCI vs. HC	MCI = 15 HC = 20	Resting-state functional MRI	95
Chincarini et al. (2011)	PDAT vs. HC	PDAT = 144 HC = 189	Structural MRI	Sens. = 89 Spec. = 94
Cui et al. (2011a)	MCI vs. HC	MCI = 79 HC = 204	Structural MRI & DTI	71.09
Dukart et al. (2011)	PDAT vs. FTLD vs. HC	PDAT = 21 FTLD = 14 HC = 13	Structural MRI (GM) & PET	91.7
Graña et al. (2011)	PDAT vs. HC	PDAT = 20 HC = 25	DTI FA	100
		PDAT = 20 HC = 25	DTI MD	98
Hinrichs et al. (2011)	PDAT vs. HC	PDAT = 48 HC = 66	Structural MRI & PET & CSF(tau, amygdaloid-beta 142, p-tau 181P, t-tau, APOE genotype) & NMs	88.2
Zhang et al. (2011a)	PDAT vs. HC	PDAT = 45 HC = 50	Structural MRI & PET & CSF(Aβ42, t-tau and p-tau)	92
	MCI vs. HC	MCI = 91 HC = 50	Structural MRI & PET & CSF(Aβ42, t-tau and p-tau)	80
Zhang et al. (2011b)	PDAT vs. HC	PDAT = 51 HC = 52	Structural MRI & PET & CSF(Aβ42, t-tau and p-tau)	93.2
	MCI vs. HC	MCI = 99 HC = 52	Structural MRI & PET & CSF(Aβ42, t-tau and p-tau)	76.4
Fu et al. (2008)	MD vs. HC	MD = 19 HC = 19	Functional MRI	86
Marquand et al. (2008)	MD vs. HC	MD = 20 HC = 20	Functional MRI	67.5
Costafreda et al. (2009a)	MD vs. HC	MD = 37 HC = 37	Structural MRI	67.6
Hahn et al. (2010)	MD vs. HC	MD = 30 HC = 30	Functional MRI	83
Nouretdinov et al. (2010)	MD vs. HC	MD = 19 HC = 19	Structural and fMRI	76.3

Πίνακας 4: Έρευνητικές Εργασίες Ταξινόμησης Alzheimer με SVM.[35]⁴

Μια διαφορετική προσέγγιση για την επίλυση του προβλήματος της ταξινόμησης της νόσου ακολούθησε ο D.Zhang και η ερευνητική του ομάδα στο [36]. Πιο συγκεκριμένα πρότειναν την ενοποίηση συγκεκριμένων βιοδεικτών όπως οι εικόνες μαγνητικής τομογραφίας, εικόνες τομογραφίας εκπομπής ποζιτρονίων (Positron Emission Tomography- PET) με τη χρήση φθοριωμένης γλυκόζης (18FDG) και μετρήσεις εγκεφαλονωτιαίου υγρού (Cerebrospinal Fluid Biomarkers - CSF) υπό ένα ενιαίο πρίσμα, χρησιμοποιώντας μια συνδυαστική μέθοδο πυρήνα. Οι ενοποιημένοι βιοδείκτες ενήργησαν ως είσοδοι για μια μηχανή διανυσματικής υποστήριξης, η οποία ανέλαβε να φέρει σε πέρας την ταξινόμηση. Η συγκέντρωση των επιμέρους βιοδεικτών σε μία οντότητα παρείχε αποτελέσματα ταξινόμησης της τάξης του 93.2% στο πρόβλημα διαχωρισμού υγιών και ασθενών ατόμων σε σύγκριση με το 86.5% που ανέδειξε η μεμονωμένη χρήση του πληροφοριακά πληρέστερου βιοδείκτη του PET. Άλλωστε σε αντίστοιχη βάση στηρίζεται και η εργασία των K.R.Gray κ.α. οι οποίοι χρησιμοποίησαν επίσης μια ενοποιημένη δομή από βιοδείκτες ίδιας φύσης με τους προαναφερθέντες με τη διαφορά ότι το εργαλείο κατηγοριοποίησης στη δεδομένη περίπτωση ήταν συνδυασμοί πολλών δέντρων απόφασης που σαν οντότητα ονομάζεται τυχαία δάση [37].

Στην εργασία τους ο El-Dahshan κ.α. πρότειναν μια υβριδική μέθοδο για τον διαχωρισμό ενός

⁴ GM=Grey Matter, WM=White Matter, DTI=Diffusion Tensor Imaging

υγιούς και ενός νοσούντα εγκεφάλου όπου στις νοσούσες καταστάσεις συμπεριλαμβάνεται και η νόσος Alzheimer [38]. Η συγκεκριμένη τεχνική περιλαμβάνει τρία στάδια :

1. Απόκτηση χαρακτηριστικών στοιχείων από δομικές μαγνητικές τομογραφίες με χρήση του διακριτού μετασχηματισμού κυματιδίων (Discrete Wavelet Transformation - DWT).
2. Μείωση του πλήθους των χαρακτηριστικών που αποκτήθηκαν από το πρώτο στάδιο και εύρεση των πληροφοριακά σημαντικότερων μέσω της ανάλυσης κυριότερων συνιστωσών (Principal Component Analysis - PCA).
3. Το τελικό στάδιο περιλαμβάνει τη διαδικασία της ταξινόμησης όπου αναπτύχθηκαν δύο μοντέλα ταξινόμησης, ένα στη βάση των τεχνητών νευρωνικών δικτύων και ένα στηριζόμενο στη μέθοδο των k κοντινότερων γειτόνων.

Αξίζει να σημειωθεί ότι και τα δύο μοντέλα ταξινόμησης κατάφεραν να πετύχουν επιδόσεις κατηγοριοποίησης με ακρίβεια της τάξης του 97% για το μοντέλο των τεχνητών νευρωνικών δικτύων και του 98% για το μοντέλο των k κοντινότερων γειτόνων.

Τέλος αρκετά σημαντική είναι η ύπαρξη εργασιών στην σύγχρονη βιβλιογραφία που έχουν ως αντικείμενο ανάλυσης την αξιολόγηση και σύγκριση των πειραματικών αποτελεσμάτων των παραπάνω μεθόδων. Ιδιαίτερη προσπάθεια δίνεται στην ανακατασκευή των διαδικασιών που περιγράφονται στις εργασίες, πάνω σε κοινά σετ δεδομένων ώστε να καθίσταται δυνατή η μεταξύ τους σύγκριση. Σε αυτό το πνεύμα άλλωστε αναπτύχθηκαν ερευνητικές εργασίες όπως οι [39], [40] και [35].

Κεφάλαιο 4

Βαθιά Μάθηση

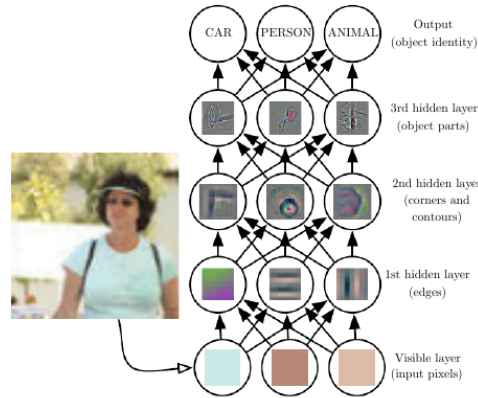
4.1 Ορισμός Βαθιάς Μάθησης

Στο κεφάλαιο 2 δώσαμε ένα ορισμό για την μηχανική μάθηση και τα προβλήματα που αναπτύσσονται στα πλαίσια της. Σημαντικό ρόλο τόσο στην ανάπτυξη όσο και στην εκτίμηση της απόδοσης των αλγορίθμων μηχανικής μάθησης διαδραματίζει η **αναπαράσταση** των δεδομένων του προβλήματος μάθησης [41]. Με τον όρο αναπαράσταση αναφερόμαστε στα στοιχεία που συνθέτουν τα *χαρακτηριστικά (features)* των δεδομένων του προβλήματος. Αυτά τα χαρακτηριστικά άλλωστε εσωκλείουν την πληροφορία που μας παρέχεται από τα δεδομένα άρα μπορούμε εύκολα να αντιληφθούμε την εξέχουσα σημασία τους για την διαδικασία της επίλυσης ενός προβλήματος μάθησης.

Ωστόσο σε πολλές διαδικασίες είναι σχετικά δύσκολο να προσδιορίσει κανείς ακριβώς ποια χαρακτηριστικά στοιχεία αξίζει να εξαχθούν από τα δεδομένα. Μια λύση στο εν λόγω πρόβλημα θα μπορούσε να δοθεί αν αφήναμε τον αλγόριθμο μάθησης να καθορίσει μόνος του σε πρώτη φάση την ίδια την φύση της αναπαράστασης των δεδομένων και μετέπειτα πως αυτή η αναπαράσταση σχετίζεται με την τελική λύση του προβλήματος μάθησης.

Αυτή η προσέγγιση μάθησης ονομάζεται **αναπαραστατική μάθηση (representation learning)**. Στόχος της αναπαραστατικής μάθησης είναι να διαχωρίσει όσο καλύτερα γίνεται τους *παράγοντες απόκλισης (factors of variation)* που καθορίζουν τις διαφορές που παρατηρούνται στα δεδομένα και οι οποίοι συχνά δεν είναι εύκολο να προσδιοριστούν. Κάποιος θα μπορούσε να αναφερθεί σε αυτούς τους παράγοντες ως αφηρημένους μηχανισμούς που μας βοηθούν να αντιληφθούμε την πλούσια μεταβλητότητα των δεδομένων. Για παράδειγμα, αν χρειαζόταν να αναλύσουμε μια εικόνα ενός αυτοκινήτου, οι παράγοντες απόκλισης του δεδομένου αυτού θα μπορούσαν περιλαμβάνουν τη θέση του αυτοκινήτου, το χρώμα του, το φως του ήλιου που αντανακλάται πάνω του κλπ. Όπως γίνεται εύκολα αντιληπτό, μια βασική πηγή δυσκολίας για το διαχωρισμό των παραπάνω παραγόντων απόκλισης είναι ότι πολλοί από αυτούς σχετίζονται στενά μεταξύ τους όπως για παράδειγμα η αποτύπωση του χρώματος του αυτοκινήτου με την ύπαρξη φωτός στην εικόνα. Έτσι καθίσταται δύσκολο να αντιληφθούμε πιο χαρακτηριστικό είναι αυτό που παίζει κεντρικό ρόλο στο χαρακτηρισμό της εικόνας.

Η **βαθιά μάθηση (deep learning)** αποτελεί ένα είδος αναπαραστατικής μάθησης που προσπαθεί να δώσει απάντηση σε αυτό το κεντρικό πρόβλημα δομώντας πολύπλοκες αναπαραστάσεις με ερείσματα απλούστερες αποτυπώσεις. Στο Σχήμα 15 φαίνεται πώς ένα σύστημα βαθιάς μάθησης προσδιορίζει την έννοια ενός ανθρώπινου προσώπου, στηριζόμενο σε απλούστερες έννοιες όπως γωνίες (corners) και περιγράμματα (contours), οι οποίες βασίζονται με τη σειρά τους στην ιδέα των ακμών (edges).



Σχήμα 15: Ένα Σύστημα Βαθιάς Μάθησης.[41]

4.2 Εισαγωγή στα Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα

Τα κυριότερα εργαλεία που επιλύουν προβλήματα βαθιάς μάθησης είναι τα **τεχνητά νευρωνικά δίκτυα (artificial neural networks)**. Η βάση των τεχνητών νευρωνικών δικτύων είναι το δίκτυο perceptron που εισήχθη στην επιστημονική κοινότητα από τον Frank Rosenblatt στο βιβλίο του [42], στηριζόμενος στην δουλειά των Warren McCulloch και Walter Pitts [43]. Προκειμένου να αντιληφθούμε καλύτερα τον τρόπο λειτουργίας του εν λόγω δικτύου, αξίζει να εξετάσουμε έναν αλγόριθμο μηχανικής μάθησης με παρόμοια λειτουργία, την λογιστική παλινδρόμηση.

4.2.1 Λογιστική Παλινδρόμηση

Ο αλγόριθμος **λογιστικής παλινδρόμησης - logistic regression**, σε αντίθεση με ό,τι προϋποθέτει η ονομασία του, δεν επιλύει προβλήματα παλινδρόμησης αλλά ταξινόμησης. Παρ' όλα αυτά οι δύο αλγόριθμοι θεμελιώνονται σε κοινή βάση. Έτσι μπορούμε να στηρίξουμε την ανάλυση της λογιστικής παλινδρόμησης, χρησιμοποιώντας τα χαρακτηριστικά του προβλήματος παλινδρόμησης που αναλύσαμε στο Κεφάλαιο 2.

Όπως και στη γραμμική παλινδρόμηση έτσι και στον αλγόριθμο της λογιστικής παλινδρόμησης επιθυμούμε να μοντελοποιήσουμε τα στοιχεία y_i του συνόλου στόχων-ετικετών Y , μέσω μιας γραμμικής συνάρτησης πρόβλεψης $h_{w,b}(\mathbf{x}) = \mathbf{w}\mathbf{x} + b$, για κάθε πιθανή τιμή που μπορεί να λάβει ένα τυχαίο διάνυσμα χαρακτηριστικών εισόδου \mathbf{x}_i . Ωστόσο αν για παράδειγμα αναλογιστούμε ένα πρόβλημα δυαδικής ταξινόμησης, οι πιθανές τιμές των ετικετών είναι δύο $(-1, +1)$, ενώ η συνάρτηση πρόβλεψης $h_{w,b}(\mathbf{x})$ μπορεί να λάβει οποιαδήποτε τιμή πραγματικού αριθμού. Έτσι με κάποιο τρόπο πρέπει να μετατρέψουμε το σύνολο τιμών της συνάρτησης πρόβλεψης στο διάστημα $[-1, 1]$ ώστε να ταιριάζει στις συνθήκες του προβλήματος της δυαδικής ταξινόμησης.

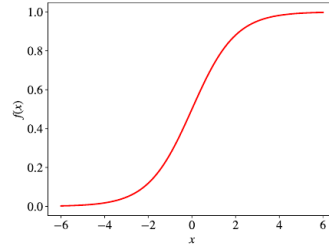
Προκειμένου να ξεπεραστεί η παραπάνω δυσκολία απεικόνισης επιλέχθηκε να επενεργεί η λογιστική ή σιγμοειδής συνάρτηση

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$$

σαν φίλτρο πάνω στην $h_{w,b}(\mathbf{x}) = \mathbf{w}\mathbf{x} + b$.

Η ιδέα που συνοδεύει την επιλογή της συγκεκριμένης συνάρτησης είναι ότι μπορούμε να περιορίσουμε την έξοδο της συνάρτησης πρόβλεψης στο $[-1, +1]$ θέτοντας ένα κατώφλι για τις τιμές της $f(h_{w,b}(\mathbf{x}))$, για παράδειγμα το 0.5 και θεωρώντας ότι τιμές κάτω από τη τιμή κατωφλίου αντιστοιχούν στην τιμή -1 ενώ τιμές πάνω από τη τιμή κατωφλίου στην τιμή $+1$

Υπό αυτές τις συνθήκες εξυπηρετείται η διαδικασία επίλυσης του προβλήματος της ταξινόμησης αν κάνουμε την παραδοχή ότι $f(h_{\mathbf{w},b}(\mathbf{x})) \stackrel{\text{def}}{=} \Pr(y_i = 1 | \mathbf{x})$. Ως εκ τούτου το μοντέλο μας δίνεται από τη σχέση $f(h_{\mathbf{w},b}(\mathbf{x})) \stackrel{\text{def}}{=} \Pr(y_i = 1 | \mathbf{x}) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{1+e^{-(\mathbf{w}\mathbf{x}+b)}}$.



Σχήμα 16: Σιγμοειδής Συνάρτηση

Εφόσον ορίσαμε το μοντέλο μας έχουμε ως στόχο να βρούμε το ζεύγος παραμέτρων (\mathbf{w}^*, b^*) μέσω των οποίων επιλύεται βέλτιστα το πρόβλημα της ταξινόμησης. Το κριτήριο βελτιστοποίησης στην περίπτωση της λογιστικής παλινδρόμησης είναι αυτό της **εκτίμησης μέγιστης πιθανοφάνειας (maximum likelihood estimation)**.

Η συνάρτηση πιθανοφάνειας ορίζεται ως :

$$L_{\mathbf{w},b} \stackrel{\text{def}}{=} \prod_{i=1,\dots,m} h_{\mathbf{w},b}(\mathbf{x}_i)^{y_i} (1 - h_{\mathbf{w},b}(\mathbf{x}_i))^{(1-y_i)}$$

και εκφράζει πόσο πιθανή είναι η παρατήρηση ενός παραδείγματος \mathbf{x}_i σύμφωνα με το μοντέλο μας $h_{\mathbf{w},b}(\mathbf{x})$.

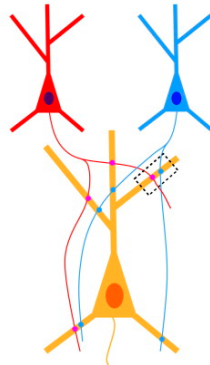
Συνήθως ,εξαιτίας του παράγοντα e που εισάγει στη συνάρτηση πρόβλεψης η σιγμοειδής συνάρτηση, συνηθίζεται να μεγιστοποιείται η συνάρτηση *log-likelihood* που ορίζεται ως

$$\text{Log}L_{\mathbf{w},b} \stackrel{\text{def}}{=} \ln(L_{\mathbf{w},b}(\mathbf{x})) = \sum_{i=1}^m y_i \ln h_{\mathbf{w},b}(\mathbf{x}_i) + (1 - y_i) \ln(1 - h_{\mathbf{w},b}(\mathbf{x}_i)).$$

Τέλος, αξίζει να σημειωθεί ότι στην απλούστερη μορφή του, το μοντέλο της λογιστικής παλινδρόμησης έχει την ικανότητα να επιλύσει προβλήματα όπου τα δεδομένα είναι γραμμικώς διαχωρίσιμα καθώς παράγει σύνορα απόφασης που έχουν γραμμική μορφή.

4.2.2 Το Δίκτυο Perceptron

Το δίκτυο Perceptron αποτελεί την απλούστερη περίπτωση τεχνητού νευρωνικού δικτύου και δημιουργήθηκε στηριζόμενο σε χαρακτηριστικά του βιολογικού νευρώνα [44].



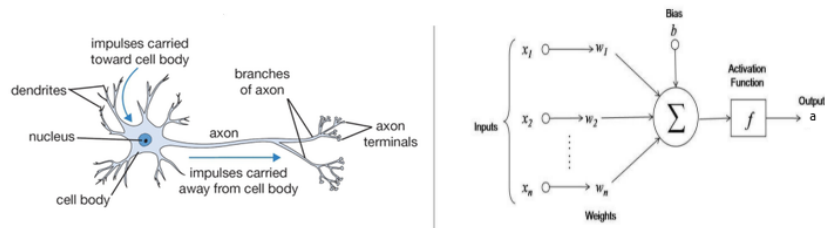
Σχήμα 17: Τρεις Συνδεδεμένοι Βιολογικοί Νευρώνες.[45]

Οι βιολογικοί νευρώνες είναι οντότητες που αλληλεπιδρούν μεταξύ τους στέλνοντας ηλεκτρικά σήματα. Στο Σχήμα 17 βλέπουμε ένα παράδειγμα τριών τέτοιων συνδεδεμένων νευρώνων. Ο ρυθμός με βάση τον οποίο ένας νευρώνας στέλνει ηλεκτρικά σήματα, μας υποδεικνύει πόσο ενεργός θεωρείται. Στο Σχήμα 17 μπορούμε να θεωρήσουμε ότι ο κίτρινος νευρώνας δρα ως δέκτης τέτοιων σημάτων εισόδου από τους άλλους δύο νευρώνες. Ανάλογα με το πόσο ενεργοί είναι ο μπλε και ο κόκκινος νευρώνας αλλά και με βάση το πόσο ισχυρές είναι οι συναπτικές τους συνδέσεις με τον κίτρινο νευρώνα, καθορίζεται η ενεργοποίηση του τελευταίου. Η διαδικασία της εγκεφαλικής μάθησης καθορίζεται από νευρώνες που συνδέονται μεταξύ τους, από την ισχύ των συνδέσεων αυτών και από την προσαρμογή που παρουσιάζουν ανάλογα με την εργασία που προσπαθεί να εκτελέσει ο ανθρώπινος οργανισμός [46].

Στο μαθηματικό μοντέλο του Perceptron θεωρούμε ότι έχουμε ένα δίκτυο που αποτελείται από μόνο ένα νευρώνα. Οι είσοδοι που δέχεται ο εν λόγω νευρώνας αναπαρίστανται από τις συνιστώσες ενός διανύσματος $\mathbf{x} = [x_1, x_2, \dots, x_n]^T$ n διαστάσεων. Το διάνυσμα \mathbf{x} ονομάζεται *διάνυσμα χαρακτηριστικών*. Κάθε συνιστώσα εισόδου x_i συνδέεται με τον νευρώνα μέσω μιας ποσότητας w_i που ονομάζεται *βάρος* και αποτελεί συνιστώσα του *διανύσματος βαρών* $\mathbf{w} = [w_1, w_2, \dots, w_n]^T$, το οποίο έχει επίσης διάσταση n . Προκειμένου να προσδιοριστεί η ενεργοποίηση a του νευρώνα, αρχικά υπολογίζεται η ποσότητα $\sum_{i=1}^n w_i x_i$. Επιπλέον ορίζεται συνήθως ένα μη μηδενικό κατώφλι θ που πρέπει να ξεπεράσει η ενεργοποίηση a , ώστε να θεωρήσουμε ότι ο συγκεκριμένος νευρώνας τυροδοτήθηκε. Η μοντελοποίηση του κατώφλιου γίνεται με την εισαγωγή ενός όρου b που ονομάζουμε *πόλωση*. Έτσι ορίζουμε την είσοδο του νευρώνα ως την ποσότητα $\text{net} = b + \sum_{i=1}^n w_i x_i$. Τέλος για να διαμορφωθεί η ενεργοποίηση του νευρώνα εφαρμόζουμε στην ποσότητα εισόδου μια συνήθως μη γραμμική συνάρτηση f που ονομάζεται *συνάρτηση ενεργοποίησης*. Έτσι η ενεργοποίηση a ενός νευρώνα δίνεται τελικά από την ποσότητα

$$a = f\left(b + \sum_{i=1}^n w_i x_i\right).$$

Αυτά τα στοιχεία συνθέτουν το νευρωνικό μοντέλο μάθησης, το οποίο παραμετροποιείται από n το πλήθος βάρη w_1, w_2, \dots, w_n και από μια βαθμωτή τιμή πόλωσης b . Άλλωστε, η αντιπαραβολή του βιολογικού και του τεχνητού νευρώνα φαίνεται στο Σχήμα 18.



Σχήμα 18: Σύγκριση Βιολογικού και Τεχνητού Νευρώνα.¹

Μια σημαντική παρατήρηση αναφορικά με τη ταυτότητα του δικτύου Perceptron είναι ότι πρόκειται για ένα γραμμικό μοντέλο. Αυτό σημαίνει ότι το εν λόγω δίκτυο προσαρμόζοντας κατάλληλα τις παραμέτρους του \mathbf{w} , b έχει τη δυνατότητα να διαμορφώνει ένα ταξινομητή υπερεπιπέδου και συνεπώς να παράγει μόνο γραμμικά σύνορα απόφασης. Αυτό σημαίνει ότι το μοντέλο του Perceptron περιορίζεται μόνο στην επίλυση προβλημάτων όπου τα δεδομένα του προβλήματος είναι γραμμικώς διαχωρίσιμα [46].

4.2.3 Βαθιά Δίκτυα Εμπρόσθιας Τροφοδότησης

Τα βαθιά δίκτυα εμπρόσθιας τροφοδότησης (*Deep Feedforward Networks*) ή αλλιώς δίκτυα *Perceptron* πολλών επιπέδων (*Multi Layer Perceptron*) ή απλώς νευρωνικά δίκτυα εμπρόσθιας τροφοδότησης (*Feedforward Neural Networks*) αποτελούν τα συνηθέστερα μοντέλα βαθιάς μάθησης [41]. Αναπτύχθηκαν στα πλαίσια της επέκτασης του απλού δικτύου Perceptron. Τα εν λόγω δίκτυα δρουν ως προσεγγιστικά εργαλεία συναρτήσεων f^* ακόμα και μη γραμμικής φύσης. Ακριβέστερα στο [47] αναφέρεται ότι ένα τεχνητό νευρωνικό δίκτυο μπορεί να προσεγγίσει μια οποιαδήποτε συνεχή συνάρτηση f^* σε ένα υποσύνολο του χώρου \mathbb{R}^n . Για παράδειγμα, ο στόχος ενός βαθύς δικτύου που δρα ως ταξινομητής είναι να κατανοήσει τη διαδικασία $y = f_{NN}(\mathbf{x})$ που αντιστοιχίζει την είσοδο \mathbf{x} στη κατηγορία y . Πιο συγκεκριμένα ένα βαθύ δίκτυο ορίζει μια διαδικασία αντιστοίχισης $y = f_{NN}(\mathbf{x}; \theta)$ και μαθαίνει τις τιμές των παραμέτρων θ που έχουν ως αποτέλεσμα τη συνάρτηση με τη βέλτιστη προσέγγιση.

Δομή και Μαθηματική Μοντελοποίηση

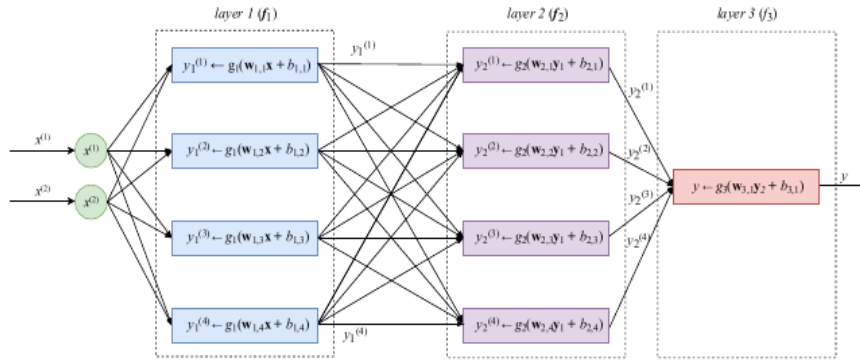
Τα βαθιά δίκτυα εμπρόσθιας τροφοδότησης μπορούν να θεωρηθούν μια συλλογή από μονάδες νευρώνων (*units*), οι οποίες είναι συνδεδεμένες στη μορφή ενός ακυκλικού γράφου. Τα νευρωνικά δίκτυα συνήθως οργανώνονται σε στρώματα ή επίπεδα νευρώνων όπως φαίνεται στο Σχήμα 19. Το πρώτο κατά σειρά στρώμα νευρώνων ονομάζεται στρώμα εισόδου. Το στρώμα εισόδου ακολουθείται από ένα αριθμό κρυφών στρωμάτων που με τη σειρά τους καταλήγουν στο επίπεδο εξόδου. Αξίζει να αναφερθεί ότι η ονομαστική σύμβαση που ακολουθείται σε ένα νευρωνικό δίκτυο N στρωμάτων δεν περιλαμβάνει απαρίθμηση του στρώματος εισόδου.

Όπως έχουμε ήδη αναφέρει, ένα βαθύ νευρωνικό δίκτυο μπορεί να θεωρηθεί ως μια συνάρτηση $y = f(\mathbf{x})$. Αυτή η συνάρτηση προκύπτει ουσιαστικά από τη διαδικασία σύνθεσης συναρτήσεων. Πιο συγκεκριμένα, στη περίπτωση ενός νευρωνικού δικτύου τριών επιπέδων η συνάρτηση f έχει την ακόλουθη μορφή

$$y = f_{NN}(\mathbf{x}) = f_3(\mathbf{f}_2(\mathbf{f}_1(\mathbf{x}))).$$

Στη παραπάνω σχέση οι συναρτήσεις \mathbf{f}_1 , \mathbf{f}_2 είναι διανυσματικές της μορφής :

¹ <https://www.datacamp.com/community/tutorials/deep-learning-python>



Σχήμα 19: Νευρωνικό Δίκτυο 3 Στρωμάτων.[12]

$$\mathbf{f}_l(\mathbf{z}) \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{g}_l(\mathbf{W}_l \mathbf{z} + \mathbf{b}_l),$$

όπου :

- Η ποσότητα l αντιπροσωπεύει το στρώμα ενδιαφέροντος.
- Η διανυσματική συνάρτηση \mathbf{g}_l συμβολίζει τη συνάρτηση ενεργοποίησης των νευρώνων του στρώματος l , η οποία είναι μη γραμμική και εφαρμόζεται συνήθως μόνο στις μονάδες των κρυφών επιπέδων.
- Το διάνυσμα \mathbf{z} εκφράζει τις τιμές ενεργοποίησης νευρώνων του προηγούμενου στρώματος $l - 1$
- Ο πίνακας \mathbf{W}_l περιγράφει τα βάρη που εισέρχονται στο στρώμα l .
- Το διάνυσμα \mathbf{b}_l αναπαριστά την πόλωση που εισάγεται στο στρώμα l .

Οι δύο τελευταίες ποσότητες $\mathbf{W}_l, \mathbf{b}_l$ ονομάζονται *παράμετροι* του στρώματος l και η εκμάθηση των τιμών τους αποτελεί προϊόν της διαδικασίας βελτιστοποίησης μιας συνάρτησης κόστους μέσω του αλγορίθμου Κατάβασης Κλίσης. Η συνάρτηση f_3 είναι συνήθως μια βαθμωτή συνάρτηση που εφαρμόζεται στην έξοδο του τελικού επιπέδου του δικτύου.

Στο Σχήμα 19 παρουσιάζεται αναλυτικά η δομή ενός δικτύου Perceptron τριών επιπέδων. Το δίκτυο αναπαρίσταται γραφικά από ένα συνδυασμό μονάδων λογικά οργανωμένων σε στρώματα όπου κάθε μονάδα αναπαρίσταται από ένα κύκλο ή ένα παραλληλόγραμμο. Οι εισοδοί και έξοδοι των μονάδων αναπαρίστανται με εισερχόμενα και εξερχόμενα βέλη αντίστοιχα. Οι κυκλικές μονάδες απλά στέλνουν αυτούσιο το περιεχόμενό τους στην επόμενη μονάδα. Η έξοδος κάθε μονάδας παραλληλόγραμμο προκύπτει από τη μαθηματική έκφραση που αναγράφεται σε κάθε παραλληλόγραμμο. Το εν λόγω δίκτυο ονομάζεται *πλήρως συνδεδεμένο (fully connected)* καθώς κάθε μονάδα ενός επιπέδου $l - 1$ συνδέεται με κάθε μονάδα του επόμενου επιπέδου l . Τέλος αξίζει να επισημανθεί ότι αν η συνάρτηση ενεργοποίησης g_{last} της μονάδας του τελευταίου επιπέδου του νευρωνικού δικτύου είναι γραμμική τότε το νευρωνικό επιλύει πρόβλημα παλινδρόμησης ενώ στην περίπτωση που είναι κάποια συνάρτηση αντίστοιχης μορφής με τη λογιστική επιλύει κάποιο πρόβλημα ταξινόμησης.

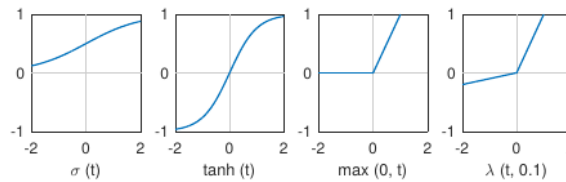
Συναρτήσεις Ενεργοποίησης

Όπως ήδη αναφέραμε στην ενότητα 4.2.2 ένα στοιχείο που διαδραματίζει κεντρικό ρόλο στη μοντελοποίηση ενός νευρώνα είναι η συνάρτηση ενεργοποίησης g . Οι κυριότερες συναρτήσεις ενεργοποίησης που χρησιμοποιούνται στα πλαίσια εφαρμογών των τεχνητών νευρωνικών δικτύων με βάση

την ανάλυση του [48] φαίνονται στον Πίνακα 5 με τις αντίστοιχες γραφικές παραστάσεις στο Σχήμα 20.

Όνομα	Συμβολισμός	Ορισμός
Sigmoid	$\sigma(t)$	$\frac{1}{1+e^{-t}}$
Hyperbolic Tangent	$\tanh(t)$	$\frac{e^t - e^{-t}}{e^t + e^{-t}}$
Rectified Linear Unit	$ReLU(t) = \max(0, t)$	$\begin{cases} 0 & t < 0 \\ t & t \geq 0 \end{cases}$
Leaky Rectified Linear Unit	$\lambda(t) = \max(0, t) + \alpha \min(0, t)$	$\begin{cases} at & t < 0 \\ t & t \geq 0 \end{cases}$

Πίνακας 5: Κυριότερες Συναρτήσεις Ενεργοποίησης Νευρώνων.



Σχήμα 20: Γραφικές Παραστάσεις Συναρτήσεων Ενεργοποίησης.

Η Διαδικασία Εκπαίδευσης ενός Βαθούς Νευρωνικού Δικτύου

Εν γένει κάθε αλγόριθμος μάθησης αποτελείται από τρία βασικά στοιχεία :

1. Μια συνάρτηση απωλειών (loss function) που αποτυπώνει την αστοχία της πρόβλεψης του μοντέλου για κάποιο παράδειγμα εισόδου.
2. Ένα κριτήριο το οποίο καλούμαστε να βελτιστοποιήσουμε όπως για παράδειγμα μια συνάρτηση κόστους που γενικεύει την συνάρτηση απωλειών για ολόκληρο το σετ δεδομένων.
3. Μια ρουτίνα που εκμεταλλεύεται τα δεδομένα εκπαίδευσης για να βελτιστοποιήσει το παραπάνω κριτήριο.

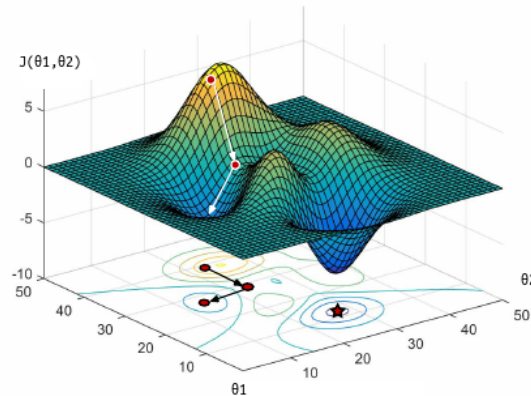
Ο Αλγόριθμος Κατάβασης Κλίσης

Οι πιο γνωστές ρουτίνες βελτιστοποίησης είναι αυτές της *κατάβασης κλίσης* (gradient descent) [49] και η *στοχαστική παραλλαγή της στοχαστική κατάβαση κλίσης* (stochastic gradient descent) [50]. Οι δύο αυτοί αλγόριθμοι είναι οι συνηθέστεροι που χρησιμοποιούνται για την βελτιστοποίηση μιας συνάρτησης κόστους με τη προϋπόθεση ότι η τελευταία είναι διαφορίσιμη συνάρτηση [51].

Ο αλγόριθμος κατάβασης κλίσης είναι μια επαναληπτική διαδικασία βελτιστοποίησης για την εύρεση του ελαχίστου μιας συνάρτησης. Για την εύρεση ενός *τοπικού* ελαχίστου, ο αλγόριθμος εκκινεί από ένα τυχαίο σημείο της συνάρτησης και εκτελεί βήματα, ανάλογα με το αντίστροφο της κλίσης της συνάρτησης στο σημείο αυτό. Ο αλγόριθμος μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την εύρεση των βέλτιστων τιμών για τις παραμέτρους μοντέλων μάθησης παραμετρικής μορφής. Για πολλά μοντέλα μηχανικής μάθησης όπως η λογιστική παλινδρόμηση και οι μηχανές διανυσματικής υποστήριξης πρέπει να ισχύει η προϋπόθεση το κριτήριο βελτιστοποίησης να είναι *κυρτό* (convex). Οι κυρτές συναρτήσεις παρουσιάζουν ένα μόνο ολικό ελάχιστο. Στη περίπτωση των νευρωνικών δικτύων ωστόσο τα κριτήρια

βελτιστοποίησης δεν είναι κυρτές συναρτήσεις αλλά στη πράξη αρκεί και εύρεση τοπικών ελαχίστων για την σύγκλιση του αλγορίθμου. Η απεικόνιση του αλγορίθμου κατάβασης κλίσης φαίνεται στο Σχήμα 21.

Διαισθητικά, έχοντας την απεικόνιση της συνάρτησης κόστους $J(\theta_1, \theta_2)$ και ξεκινώντας από ένα τυχαίο σημείο της επιφάνειας, εκτελούμε βήματα προς την κατεύθυνση της μεγαλύτερης κλίσης και επαναληπτικά οδηγούμαστε σε ένα τοπικό ελάχιστο. Άλλωστε η κλίση της συνάρτησης σε κάποιο σημείο δίνεται από τη τιμή της παραγώγου της στο σημείο αυτό.



Σχήμα 21: Ο Αλγόριθμος Κατάβασης Κλίσης.

Ο Αλγόριθμος Οπισθοδιάδοσης

Στη προηγούμενη παράγραφο αναφέραμε ότι ο αλγόριθμος κατάβασης κλίσης λειτουργεί βασιζόμενος στην έννοια της παραγώγου του κριτηρίου βελτιστοποίησης. Ωστόσο στα βαθιά νευρωνικά δίκτυα όπως προείπαμε, υπάρχουν συναρτήσεις που δεν είναι διαφορίσιμες και διαδραματίζουν το ρόλο του κριτηρίου βελτιστοποίησης. Για αυτές τις συναρτήσεις εισάγονται έννοιες όπως οι υποπαραγώγοι (subderivatives) που γενικεύουν την έννοια της παραγώγου για μη διαφορίσιμες συναρτήσεις.

Προκειμένου να συγκλίνει σε ικανοποιητικό χρονικό διάστημα ο αλγόριθμος κατάβασης κλίσης σε πολύπλοκα συστήματα όπως τα βαθιά νευρωνικά δίκτυα, πρέπει να παρέχεται ένας γρήγορος μηχανισμός για τον υπολογισμό των παραγώγων του κριτηρίου βελτιστοποίησης. Σε αυτή τη κατεύθυνση δημιουργήθηκε ο αλγόριθμος της οπισθοδιάδοσης (*backpropagation*) που υπολογίζει με ταχύτητα παραγώγους σύνθετων συναρτήσεων με χρήση του κανόνα της αλυσίδας [52].

Πρακτικά ο αλγόριθμος οπισθοδιάδοσης εκμεταλλεύεται την πληροφορία που του παρέχεται από τη συνάρτηση σφάλματος για να ενημερώσει κατάλληλα τα βάρη του νευρωνικού δικτύου ώστε το τελευταίο να πραγματοποιεί πιο εύστοχες προβλέψεις. Ουσιαστικά το σφάλμα από το τελευταίο επίπεδο του νευρωνικού δικτύου διαδίδεται προς τη κατεύθυνση των αρχικών επιπέδων. Έτσι σε κάθε επίπεδο διορθώνονται οι τιμές των βαρών που θεωρήθηκαν περισσότερο υπεύθυνα για την απόκλιση της πρόβλεψης του δικτύου από την επιθυμητή τιμή.

4.3 Συνελικτικά Νευρωνικά Δίκτυα

Τα *συνελικτικά νευρωνικά δίκτυα* (*convolutional neural networks*) είναι μια ειδική κατηγορία των βαθιών δικτύων εμπρόσθιας τροφοδότησης. Εισήχθησαν στην επιστημονική κοινότητα το 1988 από τον Fukushima στο [53] αλλά η εφαρμογή τους σε προβλήματα υπολογιστικής όρασης γνώρισε άνθιση μετά τα αποτελέσματα των Lecun κ.α στο [54] για την αυτοματοποιημένη αναγνώριση χειρόγραφων αριθμών από ηλεκτρονικό υπολογιστή. Έκτοτε, πολλοί ερευνητές χρησιμοποίησαν συνελικτικά νευρωνικά δίκτυα για να φέρουν σε πέρας άλλα εγχειρήματα αισθητήριας αναγνώρισης όπως επεξεργασία φωνής, εικόνας και κειμένου [55].

Τα εν λόγω δίκτυα έχουν τη δυνατότητα να διαχειρίζονται δεδομένα εισόδου πολλών διαστάσεων όπως για παράδειγμα εικόνες, μειώνοντας το πλήθος των παραμέτρων που θα χρειαζόταν για την ίδια εργασία, ένα απλό είδος νευρωνικού δικτύου εμπρόσθιας τροφοδότησης. Η ανάλυση μας θα εστιασθεί σε δεδομένα εικόνας.

4.3.1 Αρχή Λειτουργίας

Οι εικόνες σε ψηφιακή μορφή αναπαρίστανται από δομικές ποσότητες που ονομάζονται pixel. Τα pixel της εικόνας αποτελούν τα χαρακτηριστικά (features) του προβλήματος. Ως εκ τούτου γίνεται εύκολα αντιληπτό γιατί οι εικόνες θεωρούνται πληροφοριακά δεδομένα πολλών διαστάσεων καθώς μια εικόνα μεγέθους 100×100 pixel διαθέτει 10000 χαρακτηριστικά.

Στη συνηθέστερη περίπτωση, τα γειτονικά pixel μιας εικόνας αναπαριστούν παρόμοιο τύπο πληροφορίας. Η εξαίρεση στον παραπάνω κανόνα εισάγεται από τις ακμές (edges) που αναπαριστούν τα σημεία της εικόνας όπου διαφορετικά αντικείμενα έρχονται σε επαφή. Ως εκ τούτου, αν ένα νευρωνικό δίκτυο εκπαιδευτεί να διαχωρίζει τις περιοχές της εικόνας που αναπαριστούν κοινή πληροφορία καθώς και τις ακμές μεταξύ διαφορετικών περιοχών πληροφορίας τότε θα έχουμε δημιουργήσει ένα δίκτυο που θα αναγνωρίζει αντικείμενα.

Έχοντας υπόψη μας ότι οι σημαντικότερες πηγές πληροφορίας σε κάποιο εικόνα αναπτύσσονται τοπικά, μπορούμε να διαχωρίσουμε την εικόνα σε τοπικά τετραγωνικά τμήματα (square patches), χρησιμοποιώντας την τεχνική του κυλιόμενου παραθύρου [56]. Εν συνεχεία, έχουμε τη δυνατότητα να εκπαιδεύσουμε ταυτόχρονα, πολλαπλά μικρά μοντέλα παλινδρόμησης που δέχονται ως είσοδο διαφορετικά τετραγωνικά τμήματα. Στόχος μας είναι κάθε ξεχωριστό μοντέλο παλινδρόμησης να μπορεί να διακρίνει ένα συγκεκριμένο είδος μοτίβου σε κάθε τετραγωνικό τμήμα.

Στα συνελκτικά νευρωνικά δίκτυα ένα μικρό μοντέλο παλινδρόμησης μοιάζει με το μοντέλο του Σχήματος 19 με τη διαφορά ότι διαθέτει μόνο το επίπεδο 1 και όχι τα επίπεδα 2 και 3. Προκειμένου το μοντέλο να είναι σε θέση να αναγνωρίσει κάποιο μοτίβο, πρέπει να μάθει τις παραμέτρους ενός πίνακα φίλτρου F μεγέθους $p \times p$ όπου p είναι το μέγεθος του τετραγωνικού τμήματος. Η διαδικασία εκμάθησης αυτών των παραμέτρων στηρίζεται στη πράξη της συνέλιξης.

Η Πράξη της Συνέλιξης

Θα εξηγήσουμε την έννοια της συνέλιξης (convolution) μέσω ενός παραδείγματος. Έστω ότι η εικόνα εισόδου είναι ασπρόμαυρη με την τιμή 1 να αναφέρεται σε μαύρα pixel και την τιμή 0 σε λευκά. Υποθέτουμε επίσης ότι χωρίζουμε την εικόνα σε τετραγωνικά τμήματα μεγέθους 3×3 pixels. Έτσι ένα τυχαίο τετραγωνικό τμήμα της εικόνας μπορεί να δίνεται από τον ακόλουθο πίνακα P :

$$P = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Το παραπάνω τετραγωνικό τμήμα αναπαριστά ένα μοτίβο που μοιάζει με σταυρό. Το μικρό μοντέλο παλινδρόμησης που θα αναγνωρίζει αυτού του είδους τα μοτίβα και μόνο πρέπει να μάθει ένα 3×3 πίνακα παραμέτρων F όπου οι παράμετροι σε θέσεις που αντιστοιχούν σε 1 του τετραγωνικού τμήματος P θα είναι θετικοί αριθμοί ενώ οι παράμετροι σε θέσεις που αντιστοιχούν σε 0 θα είναι αριθμοί κοντά στο μηδέν.

Έστω ένας πίνακας φίλτρο F της μορφής:

$$F = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 3 \\ 2 & 4 & 1 \\ 0 & 3 & 0 \end{bmatrix}.$$

Η πράξη της συνέλιξης $P * F$ περιλαμβάνει δύο στάδια :

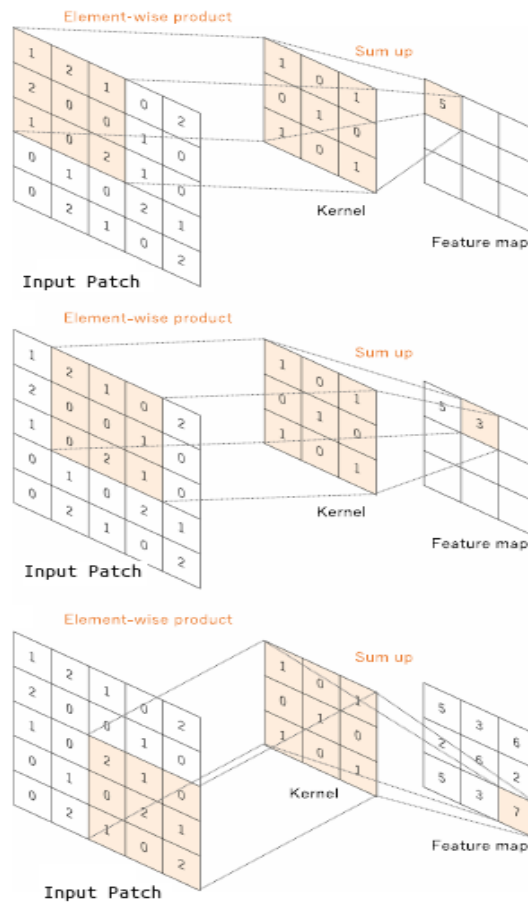
1. Υπολογισμός του γινομένου Hadamard \circ των πινάκων P, F

$$P \circ F = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 3 \\ 2 & 4 & 1 \\ 0 & 3 & 0 \end{bmatrix} \circ \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 0 \\ 2 & 4 & 1 \\ 0 & 3 & 0 \end{bmatrix}$$

2. Άθροιση των συνιστωσών του πίνακα $P \circ F$

$$2 + 2 + 4 + 3 + 1 = 12.$$

Η διαδικασία της συνέλιξης μεταξύ των τετραγωνικών τμημάτων (input patches) της εικόνας εισόδου και ενός φίλτρου (kernel) με στόχο την εξαγωγή χαρακτηριστικών (feature map) από την εικόνα εισόδου φαίνεται στο Σχήμα 22.

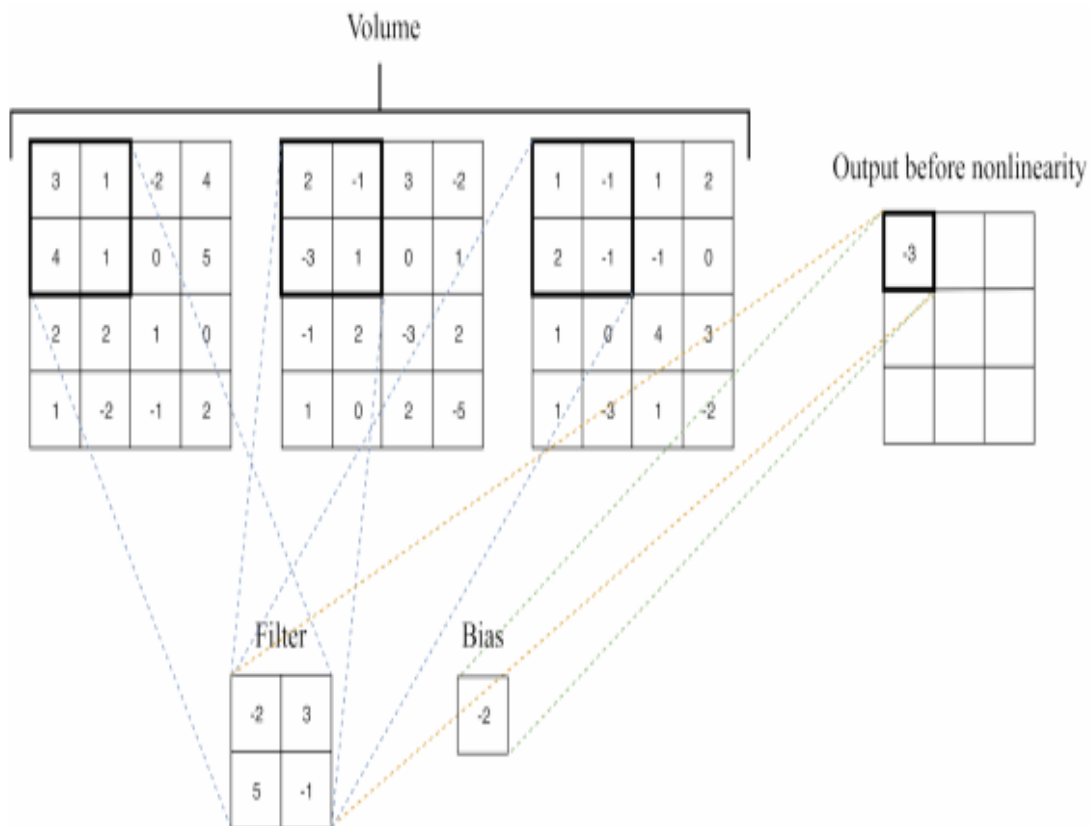


Σχήμα 22: Συνέλιξη για Εξόρυξη Χαρακτηριστικών.[8]

Η τελική τιμή της συνέλιξης θα αυξάνεται όσο πιο όμοιοι είναι οι πίνακες P, F . Δηλαδή όσο περισσότερο μοιάζουν το φίλτρο και το τετραγωνικό τμήμα τόσο υψηλότερη θα είναι και η τιμή της συνέλιξης. Επιπλέον, όπως και στα νευρωνικά δίκτυα εμπρόσθιας διάδοσης, έτσι και στα συνελκτικά δίκτυα υπάρχει ένας όρος πόλωσης b που σχετίζεται με κάθε φίλτρο F και προστίθεται στο αποτέλεσμα της συνέλιξης. Στην προκύπτουσα ποσότητα εφαρμόζεται μια μη γραμμική συνάρτηση με συνήθη επιλογή τη $ReLU$ για να προκύψει το τελικό αποτέλεσμα του συνελκτικού επιπέδου.

Κάθε επίπεδο ενός συνελκτικού νευρωνικού δικτύου αποτελείται από πολλαπλά συνελκτικά φίλτρα που στο καθένα αντιστοιχεί μια παράμετρος πόλωσης. Η παραπάνω σύμβαση δρα σε αντιστοιχία με τα νευρωνικά δίκτυα εμπρόσθιας διάδοσης που κάθε επίπεδο του δικτύου αποτελείται από πολλαπλές μονάδες νευρώνων. Κάθε φίλτρο του πρώτου επιπέδου συνελίσσεται κατά μήκος της εικόνας εισόδου. Ο πίνακας φίλτρο (ένας για κάθε φίλτρο σε κάθε επίπεδο) και οι τιμές πόλωσης είναι οι παράμετροι εκμάθησης του δικτύου τις οποίες βελτιστοποιούμε με χρήση τεχνικών βελτιστοποίησης όπως για παράδειγμα ο αλγόριθμος κατάβασης κλίσης σε συνδυασμό με την διαδικασία οπισθοδιάδοσης.

Δεδομένου του ότι έχουμε $size_l$ φίλτρα σε κάθε επίπεδο l , η έξοδος κάποιου τυχαίου συνελκτικού επιπέδου l θα αποτελείται από $size_l$ το πλήθος πίνακες, ένα για κάθε φίλτρο. Αν το συνελκτικό νευρωνικό δίκτυο έχει πολλαπλά συνελκτικά επίπεδα, το ένα ακολουθούμενο από το επόμενο, τότε το επίπεδο $l + 1$ μεταχειρίζεται την έξοδο του προηγούμενου επιπέδου l ως μια συλλογή από $size_l$ πίνακες εικόνων. Μια τέτοια συλλογή ονομάζεται *όγκος*. Το μέγεθος αυτής της συλλογής δηλαδή το πλήθος των πινάκων που σχηματίζουν τον όγκο ονομάζεται *βάθος*. Επιπλέον κάθε φίλτρο του επιπέδου $l + 1$ συνελίσσεται με όλους τους πίνακες του όγκου. Έτσι η συνέλιξη του φίλτρου με ένα τετραγωνικό τμήμα του όγκου είναι το άθροισμα των συνέλιξεων του φίλτρου με τα τετραγωνικά τμήματα των πινάκων που συνθέτουν τον όγκο. Ένα παράδειγμα της παραπάνω διαδικασίας φαίνεται στο Σχήμα 23.



Σχήμα 23: Συνέλιξη Φίλτρου με Όγκο Βάθους 3.[12]

Ιδιότητες Συνέλιξης

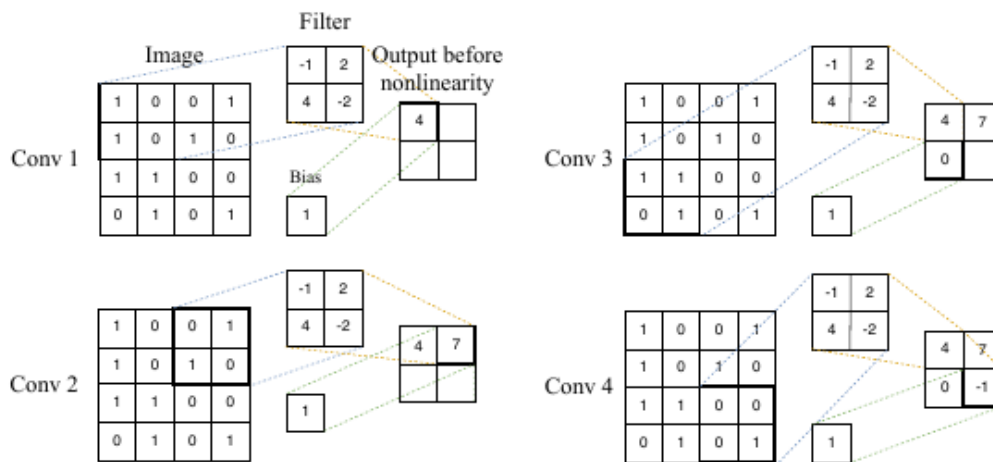
Δύο σημαντικά χαρακτηριστικά της συνέλιξης που επηρεάζουν τον τρόπο λειτουργίας των συνελκτικών νευρωνικών δικτύων είναι :

1. Το βήμα φιλτραρίσματος (stride).
2. Η επέκταση εισόδου (padding).

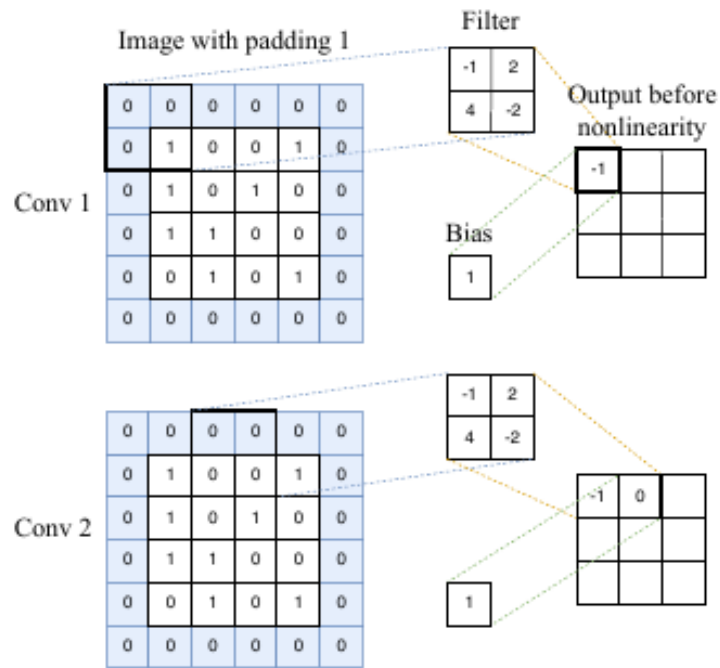
Το βήμα φιλτραρίσματος καθορίζει το πλήθος των pixel που θα προσπερνάει το φίλτρο κατά τη διαδικασία του φιλτραρίσματος της εικόνας εισόδου. Όσο αυξάνεται το βήμα φιλτραρίσματος τόσο πιο μικρό θα είναι το μέγεθος του πίνακα εξόδου που προκύπτει από τη συνέλιξη.

Η επέκταση εισόδου μας δίνει την δυνατότητα να αυξήσουμε το μέγεθος του πίνακα εξόδου. Για να γίνει αυτό προσθέτουμε στην εικόνα εισόδου ένα τετράγωνο με πλάτος ίσο με το padding πριν πραγματοποιήσουμε τη συνέλιξη με το φίλτρο. Συνήθως τα προστιθέμενα κελιά έχουν την τιμή 0.

Στα Σχήματα 24, 25 δίνονται παραδείγματα συνέλιξης με χρήση των παραπάνω ιδιοτήτων.



Σχήμα 24: Συνέλιξη με Βήμα Φιλτραρίσματος 2.[12]

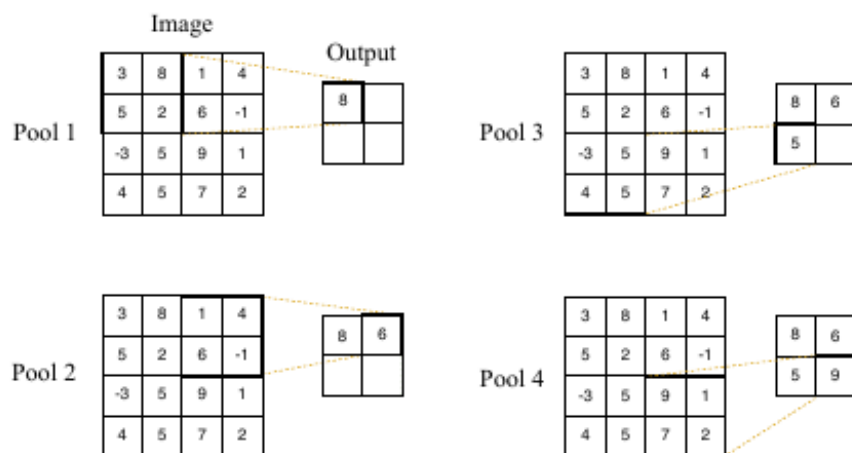


Σχήμα 25: Συνέλιξη με Βήμα Φιλτραρίσματος 2 και Επέκταση 1.[12]

Η Συγκέντρωση

Τέλος αξίζει να αναφερθούμε στη διαδικασία της *συγκέντρωσης (pooling)*, μια τεχνική η οποία χρησιμοποιείται ευρέως στα συνελκτικά νευρωνικά δίκτυα. Η συγκέντρωση λειτουργεί σε μεγάλο βαθμό όμοια με τη συνέλιξη ως ένα φίλτρο που εφαρμόζεται στην εικόνα εισόδου με τη λογική του κινούμενου παραθύρου. Ωστόσο αντί να εφαρμόσουμε ένα εκπαιδευόμενο φίλτρο παραμέτρων σε ένα όγκο εισόδου, η συγκέντρωση εφαρμόζει ένα σταθερό τελεστή, συνήθως τους *max* ή *average*. Όπως και στη συνέλιξη η συγκέντρωση παρουσιάζει κάποια χαρακτηριστικά όπως το μέγεθος του φίλτρου συγκέντρωσης και το βήμα φιλτραρίσματος.

Συνήθως μια διαδικασία συγκέντρωσης παρατηρείται μετά από αυτή της συνέλιξης. Όταν η συγκέντρωση εφαρμόζεται σε ένα όγκο εισόδου, επεξεργάζεται κάθε πίνακας του όγκου ξεχωριστά. Ως εκ τούτου το αποτέλεσμα της συγκέντρωσης είναι ένας όγκος ίσου μεγέθους με τον όγκο εισόδου. Η διαδικασία του *max pooling* με βήμα φιλτραρίσματος 2 φαίνεται στο Σχήμα 26.



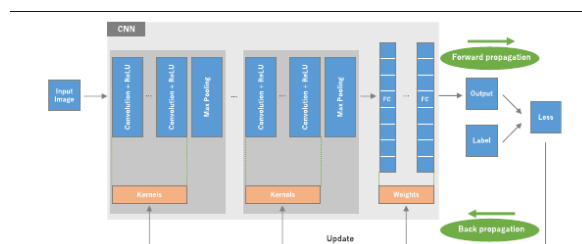
Σχήμα 26: Συγκέντρωση Μεγίστου με Βήμα Φιλτραρίσματος 2.[12]

4.3.2 Δομικά Επίπεδα

Η αρχιτεκτονική των συνελκτικών δικτύων αποτελείται από τα εξής δομικά στρώματα :

- Το συνελκτικό στρώμα.
- Το στρώμα συγκέντρωσης.
- Τα πλήρως συνδεδεμένα στρώματα.

Μια τυπική αρχιτεκτονική όπως απεικονίζεται στο Σχήμα 27, δομείται με την επαναληπτική σύνθεση διαφόρων συνελκτικών στρωμάτων και στρωμάτων συγκέντρωσης, τα οποία ακολουθούνται από πλήρως συνδεδεμένα στρώματα νευρώνων. Η διαδικασία μετατροπής της εικόνας εισόδου σε έξοδο με τη διάσχιση των παραπάνω στρωμάτων ονομάζεται εμπροσθοδιάδοση ενώ η διαδικασία με την οποία διαδίδονται τα σφάλματα πρόβλεψης για την ανανέωση των παραμέτρων των βαρών και των φίλτρων πυρήνων ονομάζεται οπισθοδιάδοση. [8].



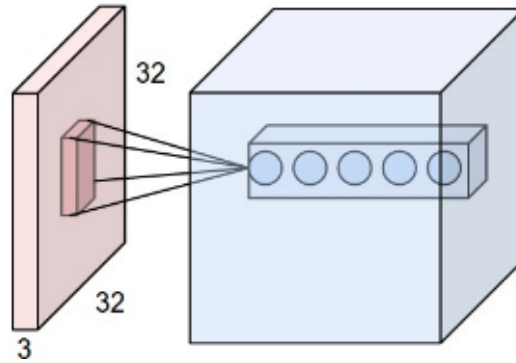
Σχήμα 27: Η Αρχιτεκτονική ενός Συνελκτικού Νευρωνικού Δικτύου.[8]

Επίπεδο Συνέλιξης

Το συνελκτικό επίπεδο (convolutional layer) είναι το θεμελιώδες επίπεδο κάθε συνελκτικού νευρωνικού δικτύου και είναι υπεύθυνο για την εξαγωγή χαρακτηριστικών από τις εικόνες εισόδου. Το εν λόγω επίπεδο αποτελείται από πολλά μικρά εκπαιδευσιμα φίλτρα τα οποία εκτείνονται σε όλο το βάθος του όγκου εισόδου. Κατά την εμπρόσθια διάδοση, κάθε φίλτρο συνελίσσεται κατά πλάτος και ύψος με τον όγκο εισόδου. Διαισθητικά, το δίκτυο θα εκπαιδευσει τα εν λόγω φίλτρα να ενεργοποιούνται όταν ανιχνεύουν ένα συγκεκριμένο οπτικό χαρακτηριστικό του όγκου εισόδου, όπως για παράδειγμα κάποια ακμή, καμπύλη ή κηλίδα χρώματος και σε υψηλότερα επίπεδα του δικτύου κάποια συγκεκριμένα μοτίβα όπως σημεία του προσώπου.

Άλλωστε, ενδιαφερόμενοι να περιορίσουμε την υπολογιστική δυσκολία που αποφέρουν είσοδοι υψηλών διαστάσεων όπως εικόνες, εισάγουμε την έννοια της τοπικότητας σύνδεσης των νευρώνων-φίλτρων του συνελκτικού επιπέδου. Πιο συγκεκριμένα η υπερπαραμέτρος που φέρει το όνομα *οπτικό πεδίο (receptive field)* καθορίζει το μέγεθος των φίλτρων που χρησιμοποιεί το δίκτυο στο συνελκτικό επίπεδο. Η έκταση της συνδεσιμότητας των φίλτρων όσο αφορά το βάθος τους ταυτίζεται με το βάθος του όγκου εισόδου. Συνοψίζοντας, οι συνδέσεις των νευρώνων του συνελκτικού επιπέδου είναι τοπικές στο χώρο (κατά τις διαστάσεις πλάτους και ύψους) και πλήρεις κατά τη διάσταση του βάθους.

Στο Σχήμα 28 φαίνεται ο παραπάνω διαχωρισμός. Κάθε νευρώνας στο συνελκτικό επίπεδο συνδέεται μόνο με μια τοπική περιοχή του όγκου εισόδου χωρικά (τετραγωνικό τμήμα 32×32), αλλά περιλαμβάνει όλο το βάθος του όγκου (3 μονάδες βάθους)



Σχήμα 28: Παράδειγμα Χωρικής Τοπικότητας και Πληρότητας Βάθους.²

Επίπεδο Συγκέντρωσης

Το επίπεδο συγκέντρωσης (pooling layer) παρέχει μια τυπική διαδικασία υποδειγματοληψίας η οποία χρησιμοποιείται για να μειώσει το μέγεθος των πινάκων χαρακτηριστικών που προκύπτουν από το επίπεδο συνέλιξης. Το επίπεδο συγκέντρωσης δεν διαθέτει καμία εκπαιδευσιμη παράμετρο σε αντίθεση με το επίπεδο συνέλιξης. Ο κύριος λόγος χρήσης του εν λόγω επιπέδου είναι να μειώσει το μέγεθος της τελικής απεικόνισης που προκύπτει από το στρώμα συνέλιξης και άρα να περιορίσει τον αριθμό των παραμέτρων του δικτύου ελέγχοντας και ενδεχόμενη υπερπροσαρμογή στα δεδομένα εκπαίδευσης.

Πλήρως Συνδεδεμένο Επίπεδο

Το πλήρως συνδεδεμένο επίπεδο (fully connected layer) αποτελείται από νευρώνες που συνδέονται με όλες τις ενεργοποιήσεις του προηγούμενου επιπέδου. Πρόκειται ουσιαστικά για τα τυπικά στρώματα δικτύου που συναντά κανείς σε ένα νευρωνικό δίκτυο εμπρόσθιας διάδοσης.

Τέλος στον Πίνακα 6 παραθέτουμε συγκεντρωτικά τα στοιχεία που αποτελούν τις παραμέτρους και υπερπαραμέτρους των παραπάνω επιπέδων και του δικτύου συνολικά :

Αρχιτεκτονικές

Ο τρόπος με τον οποίο δομούνται τα συνελκτικά νευρωνικά δίκτυα έχει γνωρίσει πολλές αλλαγές από την απαρχή τους ως σήμερα. Οι βασικές αρχιτεκτονικές αλλαγές μπορούν να κατατάξουν τα συνελκτικά νευρωνικά δίκτυα σε 7 διαφορετικές κλάσεις αρχιτεκτονικών σύμφωνα με το [57].

Τα κριτήρια με βάση τα οποία γίνεται η ταξινόμηση των δικτύων στις παραπάνω κλάσεις είναι τα ακόλουθα :

- Χωρική Εκμετάλλευση (Spatial Exploitation)
- Βάθος (Depth)
- Πολλαπλών Μονοπατιών (Multi Path)
- Πλάτος (Width)
- Εκμετάλλευση Αποτύπωσης Χαρακτηριστικών (Feature Map Exploitation)
- Ενίσχυση Καναλιών (Channel Boosting)
- Συνελκτικά Δίκτυα Προσήλωσης (Attention Based CNN)

² <http://cs231n.github.io/convolutional-networks/>

Επίπεδο	Παράμετροι	Υπερπαράμετροι
Συνελικτικό Επίπεδο	Φίλτρα-Πυρήνες	Μέγεθος Φίλτρου, Πλήθος Φίλτρων, Βήμα Φιλτραρίσματος, Επέκταση Εισόδου, Συνάρτηση Ενεργοποίησης
Επίπεδο Συγκέντρωσης	-	Μέθοδος Συγκέντρωσης, Μέγεθος Φίλτρου, Βήμα Φιλτραρίσματος, Επέκταση Εισόδου
Πλήρως Συνδεδεμένο Επίπεδο	Βάρη, Πόλωση	Πλήθος Βαρών, Συνάρτηση Ενεργοποίησης
Συνολικό Δίκτυο	-	Αρχιτεκτονική Δικτύου, Μέθοδος Βελτιστοποίησης, Ρυθμός Μάθησης, Συνάρτηση Απωλειών, Εποχές, Ρυθμιστικός Μηχανισμός, Αρχικοποίηση Βαρών, Διαχωρισμός Δεδομένων, Μέγεθος Πακέτου Εκπαίδευσης

Πίνακας 6: Οι Παράμετροι και Υπερπαράμετροι ενός Συνελικτικού Νευρωνικού Δικτύου.

Άλλωστε στο Πίνακα 7 παρουσιάζονται συγκεντρωτικά οι κυριότερες αρχιτεκτονικές συνελικτικών νευρωνικών δικτύων με τη χρονολογία τους, τη κύρια συνεισφορά τους, το πλήθος των παραμέτρων τους, το ποσοστό σφάλματος σε συγκεκριμένα σετ δεδομένων, το βάθος τους και την κατηγορία ταξινόμησης τους.

Architecture Name	Year	Main contribution	Parameters	Error Rate	Depth	Category
LeNet	1998	- First Popular CNN architecture	0.060 M	(dnt)MNIST: 0.8 MNIST: 0.95	7	Spatial Exploitation
AlexNet	2012	- Deeper and wider than the LeNet - Uses ReLU, Dropout and overlap Pooling - GPU: NVIDIA GTX 580	60 M	ImageNet: 16.4	8	Spatial Exploitation
ZelNet	2014	- Intermediate layers feature visualization	60 M	ImageNet: 11.7	8	Spatial Exploitation
VGG	2014	- Homogeneous topology - Small kernel size	138 M	ImageNet: 7.3	19	Spatial Exploitation
GoogLeNet	2015	- Split Transform Merge - Introduces block concept	4 M	ImageNet: 6.7	22	Spatial Exploitation
Inception-V3	2015	- Handles the problem of a representational bottleneck - Replace large size filters with small filters - Replaces the bigger filter with smaller filters	23.6 M	ImageNet: 3.5 Multi-Crop: 3.58 Single-Crop: 5.6	-	Depth
Highway Networks	2015	- Multi-Path Idea	2.3 M	CIFAR-10: 7.76	19	Depth + Multi-Path
Inception-V4	2016	- Split, Transform, Merge Uses asymmetric filter	-	ImageNet: 4.01	-	Depth
Inception-ResNet	2016	- Split, Transform, Merge and Residual Links	-	ImageNet: 3.52	-	Depth + Multi-Path
ResNet	2016	- Residual Learning and Identity mapping based skip connection	6.8 M 1.7 M	ImageNet: 3.6 CIFAR-10: 6.43	152 110	Spatial Exploitation + Depth + Multi-Path
DeepleNet	2016	- Allow cross layer information inflow in Deep Networks	20.2 M	CIFAR-10: 3.76 CIFAR-100: 19.02	146	Multi-path
FractalNet	2016	- Different path lengths are interacting with each other without any residual connection	38.6 M	CIFAR-10: 7.27 CIFAR-10+: 4.60 CIFAR-10++: 4.59 CIFAR-100: 28.20 CIFAR-100+: 22.49 CIFAR100++: 21.49	20 40	Multi-Path
WideResNet	2016	- Width is increased and depth is decreased	36.5 M	CIFAR-10: 3.89 CIFAR-100: 18.85	28 -	Width
Xception	2017	- Depth wise Convolution followed by point wise convolution	22.8 M	ImageNet: 0.055	36	Width
Residual Attention Neural Network	2017	- Introduces Attention Mechanism	8.6 M	CIFAR-10: 3.90 CIFAR-100: 20.4 ImageNet: 4.8	452	Attention
ResNeXt	2017	- Cardinality - Homogeneous topology - Grouped convolution	68.1 M	CIFAR-10: 3.58 CIFAR-100: 17.31 ImageNet: 4.4	29 101	Spatial Exploitation
Squeeze & Excitation Networks	2017	- Models Interdependencies between feature maps	27.5 M	ImageNet: 2.3	152	Feature Map Exploitation
DenseNet	2017	- Cross-layer information flow	25.6 M 25.6 M 15.3 M 15.3 M	CIFAR-10+: 3.46 CIFAR100+: 17.18 CIFAR-10: 5.19 CIFAR-100: 19.64	190 190 250 250	Multi-Path
PolyNet	2017	- Experimented structural diversity - Introduces Poly Inception Module - Generalizes residual unit using Polynomial compositions	92 M	ImageNet: Single: 4.25 Multi: 3.45	- -	Width
PyramidalNet	2017	- Increases width gradually per unit	116.4 M 27.0 M 27.0 M	ImageNet: 4.7 CIFAR-10: 3.48 CIFAR-100: 17.01	200 164 164	Width
Convolutional Block Attention Module (ResNeXt101 (32x4d) + CBAM)	2018	- Exploit both spatial and feature map information	48.96 M	ImageNet: 5.59	101	Attention
Concurrent Squeeze & Channel Excitation Mechanism	2018	- Squeezing spatially followed by exciting channel-wise - Squeezing channel-wise followed by exciting spatially - Performing spatial and channel squeeze & excitation in parallel	-	MALC: 0.12 Viscerai: 0.09	-	Attention
Channel Boosted CNN	2018	- Boost the original channels with extra generated information rich channels	-	-	-	Channel Boosted
Competitive Squeeze & Excitation Network CMPE-SE-WRN-28	2018	- Residual and identity mappings both are responsible for rescaling the channel	36.92 M 36.90 M	CIFAR-10: 3.58 CIFAR-100: 18.47	28 28	Feature Map Exploitation

Πίνακας 7: Αρχιτεκτονικές Συνελκτικών Νευρωνικών Δικτύων.[57]

Κεφάλαιο 5

Εφαρμογές Βαθιάς Μάθησης στην Αναγνώριση της Νόσου Alzheimer

Το συγκεκριμένο κεφάλαιο αποτελεί συνέχεια του Κεφαλαίου 3 όπου έγινε ανάλυση των ερευνητικών εργασιών που σχετίζονται με την αναγνώριση της νόσου Alzheimer και χρησιμοποιούν τεχνικές κλασικής μηχανικής μάθησης. Στο προκείμενο γίνεται αναφορά σε ερευνητικές εργασίες που αντιμετωπίζουν το ίδιο ερευνητικό ερώτημα αλλά με χρήση τεχνικών βαθιάς μάθησης. Βάση για την ανάλυση μας θα αποτελέσει η εργασία [58] αντικείμενο της οποίας είναι η σύγκριση των state of the art εργασιών που σχετίζονται με την αναγνώριση του Alzheimer από T1 μαγνητικές τομογραφίες με χρήση συνελκτικών νευρωνικών δικτύων. Κύριο μέλημα της εργασίας ήταν να διευκρινίσει τις πιο συνήθεις εσφαλμένες πρακτικές που ακολουθούν οι ερευνητές για την αντιμετώπιση του ερευνητικού ερωτήματος και να προσπαθήσει να αναπαράγει τις διαδικασίες και τα αποτελέσματα όσο το δυνατόν περισσότερων εργασιών.

5.1 Ερευνητικές Εργασίες

Τα τελευταία 2 χρόνια πάνω από 30 ερευνητικά άρθρα πρότειναν τη χρήση συνελκτικών νευρωνικών δικτύων για την εύρεση της νόσου Alzheimer από T1 μαγνητικές τομογραφίες. Περισσότερες από τις μισές εργασίες παρουσίασαν πρόβλημα όσο αφορά το διαχωρισμό των δεδομένων στα σύνολα εκπαίδευσης, επαλήθευσης και ελέγχου με αποτέλεσμα να υπάρχει διαρροή δεδομένων από το σύνολο εκπαίδευσης στα άλλα δύο και συνεπώς υψηλό ποσοστό μεροληψίας στις προβλέψεις των προτεινόμενων μοντέλων.

Οι κυριότερες προσεγγίσεις που χρησιμοποιούνται στις ερευνητική κοινότητα μπορούν να διαχωριστούν σε 4 κατηγορίες:

1. Αρχιτεκτονικές με είσοδο 2-D εικόνες (2D slice level).
2. Αρχιτεκτονικές με είσοδο 3-D τμήματα (3D patch level).
3. Αρχιτεκτονικές που επικεντρώνονται σε περιοχές ενδιαφέροντος (ROI-based).
4. Αρχιτεκτονικές με είσοδο 3-D όγκους (3D subject level).

Οι κυριότεροι λόγοι διαρροής δεδομένων είναι οι εξής :

- (a) **Λανθασμένος Διαχωρισμός Δεδομένων.** Ο μη διαχωρισμός των δεδομένων σε επίπεδο ατόμων όταν ορίζονται τα σύνολα εκπαίδευσης, επαλήθευσης και ελέγχου μπορεί να έχει ως αποτέλεσμα να υπάρχουν δεδομένα του ίδιου ατόμου σε παραπάνω από ένα σύνολο. Ο Bäckström κ.α [59] έδειξε ότι η χρήση ενός μεροληπτικού διαχωρισμού δεδομένων μπορεί να αύξηση την ακρίβεια του μοντέλου κατά ένα ποσοστό 8 μονάδων.
- (b) **Απουσία Ανεξάρτητου Συνόλου Ελέγχου.** Το σύνολο ελέγχου πρέπει να χρησιμοποιείται μόνο για τον έλεγχο της γενίκευσης του εκπαιδευμένου μοντέλου. Σε καμία περίπτωση δεν πρέπει να χρησιμοποιείται στην εκπαίδευση του μοντέλου για την προσαρμογή των παραμέτρων. Το σύνολο προσαρμογής και μόνο αυτό είναι υπεύθυνο για τον καθορισμό των παραμέτρων του μοντέλου κατά την εκπαίδευση.

- (c) **Καθυστερημένος Διαχωρισμός Δεδομένων.** Διαδικασίες όπως η προσαύξηση δεδομένων (data augmentation) και η επιλογή χαρακτηριστικών (feature selection) δεν πρέπει ποτέ να χρησιμοποιούν το σύνολο ελέγχου. Αυτό σημαίνει ότι η παραπάνω διαδικασίες πρέπει να τελούνται μετά το διαχωρισμό του αρχικού συνόλου δεδομένων στα 3 υποσύνολα.
- (d) **Μεροληπτική Μεταφερόμενη Μάθηση.** Η τεχνική της μεταφερόμενης μάθησης μπορεί να οδηγήσει σε διαρροή δεδομένων όταν το δίκτυο προεκπαιδεύεται σε δεδομένα παρόμοιας φύσης. Αυτό συμβαίνει διότι πάλι δεδομένα από το σύνολο προεκπαίδευσης μπορεί να επικαλύπτονται με δεδομένα του σετ δεδομένων του προβλήματος μας.

Στον Πίνακα 8 παρουσιάζονται οι ερευνητικές εργασίες που δεν παρατηρήθηκε διαρροή δεδομένων. Αντίστοιχα τον Πίνακα 9 NONE DETECTED TABLE παρουσιάζονται οι ερευνητικές εργασίες που παρατηρήθηκε κάποια διαρροή και η αντίστοιχη αιτία με βάση την παραπάνω κατηγοριοποίηση. Εκτός των άλλων, στους δύο πίνακες παρουσιάζονται η προσέγγιση που ακολούθησε η κάθε εργασία και η χρονολογία της και η απόδοση των μοντέλων στη σύγκριση ασθενών (AD - Alzheimer Disease) και υγιών (NC - Normal Control) ατόμων.

Η εργασία [59] συμπεριλαμβάνεται και στους δύο πίνακες διότι στα πλαίσια της πραγματοποιήθηκαν πειράματα που συνέκριναν την επιτηδευμένη διαρροή δεδομένων με την έλλειψη διαρροής.

Εργασία	Χρονολογία	Απόδοση	Προσέγγιση AD vs NC	Διαρροή Δεδομένων
[59]	2018	0.90	3D Subject Level	Δεν Παρατηρήθηκε
[60]	2018	0.90	ROI-based	Δεν Παρατηρήθηκε
[61]	2017	0.87	3D Patch Level	Δεν Παρατηρήθηκε
[62]	2018	0.85	3D Subject Level	Δεν Παρατηρήθηκε
[63]	2017	0.80	3D Subject Level	Δεν Παρατηρήθηκε
[64]	2018	0.90	3D Patch Level	Δεν Παρατηρήθηκε
[65]	2018	0.90	3D Patch Level	Δεν Παρατηρήθηκε
[66]	2018	0.76	3D Subject Level	Δεν Παρατηρήθηκε
[67]	2017	0.81	2D Slice Level	Δεν Παρατηρήθηκε
[68]	2018	0.91	3D Patch Level	Δεν Παρατηρήθηκε

Πίνακας 8: Σύγκριση Εργασιών Ταξινόμησης χωρίς Πληροφοριακή Διαρροή.[58]

Εργασίες με Προσέγγιση Δισδιάστατων Εικόνων

Στη παρούσα παράγραφο θα παρουσιαστούν συνοπτικά οι εργασίες που χρησιμοποίησαν ως είσοδο για τα συνελκτικά δίκτυα δισδιάστατες εικόνες μιας και αυτό το είδος εισόδου πραγματεύεται και η πειραματική μας εφαρμογή. Το κύριο πλεονέκτημα της συγκεκριμένης προσέγγισης είναι η πληθώρα ήδη υπάρχοντων αρχιτεκτονικών συνελκτικών δικτύων με επιτυχία στην κατηγοριοποίηση

Εργασία	Χρονολογία	Απόδοση	Προσέγγιση AD vs NC	Διαρροή Δεδομένων
[60]	2017	0.91	3D ROI-Based	Πιθανή (b,c)
[14]	2019	0.99	3D Subject Level	Πιθανή (b)
[69]	2017	0.96	2D Slice Level	Πιθανή (a,c)
[70]	2018	0.99	3D Subject Level	Πιθανή (a)
[71]	2018	0.89	ROI-Based	Πιθανή (b)
[72]	2018	1.00	2D Slice Level	Πιθανή (b)
[73]	2017	0.85	3D Subject Level	Πιθανή (a)
[74]	2018	0.98	2D Slice Level	Πιθανή (b)
[64]	2018	0.85	3D Patch Level	Πιθανή (d)
[59]	2018	0.99	3D Subject Level	Ξεκάθαρη(a)
[75]	2018	0.86	3D Subject Level	Ξεκάθαρη (a,c)
[76]	2019	0.99	3D Subject Level	Ξεκάθαρη (b)

Πίνακας 9: Σύγκριση Εργασιών Ταξινόμησης με Πληροφοριακή Διαρροή.[58]

φυσικών εικόνων (π.χ ResNet [77], VGGNet[78]) τις οποίες μπορεί να εκμεταλλευτεί ο ερευνητής για να πραγματοποιήσει ενδεχομένως κάποιο είδος μεταφερόμενης μάθησης. Επιπλέον τα δείγματα εκπαίδευσης ταυτίζονται με το πλήθος των δισδιάστατων εικόνων που προκύπτουν από τον τεμαχισμό των τρισδιάστατων όγκων μαγνητικής τομογραφίας. Αυτά είναι σίγουρα πολύ περισσότερα από το πλήθος των ασθενών που αντιστοιχεί στον αριθμό παραδειγμάτων εκπαίδευσης σε 3D τεχνικές που χρησιμοποιούν το συνολικό όγκο της μαγνητικής σαν είσοδο.

Η εργασία [67] ήταν η μόνη στην οποία δεν παρατηρήθηκε κάποια σίγουρη διαρροή δεδομένων άρα και μεροληπτικές μετρικές απόδοσης. Τα αρχικά ογκομετρικά δεδομένα τεμαχίστηκαν ακριβώς στο κέντρο του όγκου, κατά μία αξονική κατεύθυνση και κατά ασθενή. Έπειτα πραγματοποιήθηκε σύγκριση της αρχιτεκτονικής ResNet με ένα πρωτότυπο συνελκτικό δίκτυο με ένα συνελκτικό επίπεδο και δύο πλήρως συνδεδεμένα επίπεδα. Εξετάστηκε τόσο η επιρροή της μεταφερόμενης μάθησης με προεκπαίδευση στο σετ δεδομένων ImageNet και προσαύξηση δεδομένων με αφινικούς μετασχηματισμούς. Κατέληξαν ότι η αρχιτεκτονική ResNet είναι πιο αποδοτική από την δική τους αρχιτεκτονική. Επιπλέον σημείωσαν ότι οι τεχνικές προεκπαίδευσης και προσαύξησης βελτιώνουν την ακρίβεια του ResNet μοντέλου.

Άλλωστε μελετήθηκαν και εργασίες οι οποίες παρουσίασαν διαρροή δεδομένων όπως φαίνεται στον Πίνακα 9. Οι εν λόγω οι έρευνες διαφέρουν όσο αφορά την επιλογή του ύψους και του άξονα που γίνεται ο τεμαχισμός του όγκου της μαγνητικής τομογραφίας και άρα η εξαγωγή της εικόνας. Πιο συγκεκριμένα:

- Μια έρευνα χρησιμοποίησε όλες τις εικόνες που προέκυψαν από τον τεμαχισμό του όγκου [79].
- Άλλες εργασίες χρησιμοποίησαν διάφορα τεμάχια εικόνων εκμεταλλευόμενες κάποιο αυτοματοποιημένο [69], [80] ή μη [81] κριτήριο.
- Μια εργασία χρησιμοποίησε μόνο μία εικόνα σαν είσοδο [74].

Η χρήση πολλών τεμαχίων εικόνων προϋποθέτει την συνένωση της ταξινόμησης σε επίπεδο εικόνας ώστε να δίνεται αποτέλεσμα ταξινόμησης σε επίπεδο ατόμου. Μόνο η εργασία [81] εξηγεί πως πραγματοποιείται αυτή η συνένωση. Στις εργασίες [79],[82],[69],[74],[80],[83],[72] δεν είναι ξεκάθαρο αν η ταξινόμηση γίνεται σε επίπεδο εικόνας ή επίπεδο ατόμου.

Τέλος αξίζει να σημειωθεί ότι ο περιορισμός της 2D slice level προσέγγισης είναι ότι η μαγνητική τομογραφία είναι 3D τροπικότητα. Ως εκ τούτου υπάρχουν πολλοί τρόποι να επιλεγούν τα τεμάχια εικόνων εισόδου από τα τρισδιάστατα ογκομετρικά δεδομένα γεγονός που επηρεάζει τη σύσταση του μοντέλου και την ακριβεία του όσο αφορά την ταξινόμηση σε επίπεδο ατόμου και όχι σε επίπεδο εικόνας.

5.2 Βάσεις Δεδομένων

Σε αυτό το σημείο της εργασίας παρουσιάζονται οι κυριότερες βάσεις δεδομένων που χρησιμοποιούνται στον ερευνητικό τομέα για την εκπαίδευση νευρωνικών δικτύων. Ιδιαίτερη έμφαση δίνεται στην πληροφοριακή απεικόνιση εικόνων τόσο στο τομέα της βαθιάς μάθησης όσο και της ασθένειας του Alzheimer.

Βαθιά Μάθηση

Στη παράγραφο αυτή παρατίθενται σύνδεσμοι για σεντ δεδομένων που θεωρούνται ορόσημα στο χώρο της μηχανικής μάθησης :

- Το **MNIST**¹ είναι μια βάση δεδομένων από ασπρόμαυρες εικόνες χειρόγραφων αριθμητικών ψηφίων. Το σεντ δεδομένων αποτελείται από 60000 παραδείγματα εκπαίδευσης και 10000 παραδείγματα ελέγχου μεγέθους 28×28 pixels. Χρησιμοποιείται συχνά σαν σημείο αναφοράς για την αξιολόγηση συστημάτων ταξινόμησης βασισμένα στη βαθιά μάθηση.
- Το **CIFAR-10**² είναι ένα από τα πρώτα σεντ δεδομένων πάνω στο οποίο ελέγχονται νέες εφαρμογές μηχανικής μάθησης. Περιλαμβάνει 50000 εικόνες εκπαίδευσης και 10000 εικόνες ελέγχου χωρισμένες σε 10 κλάσεις από 6000 έγχρωμες εικόνες μεγέθους 32×32
- Το **CIFAR-100**³ είναι πανομοιότυπο με το CIFAR-10 με τη διαφορά ότι εμπεριέχει 100 κλάσεις από 600 εικόνες η κάθε μία. Διαθέτει 500 εικόνες εκπαίδευσης και 100 εικόνες ελέγχου για κάθε κλάση.
- Το **Street View House Numbers**⁴ είναι ένα σεντ δεδομένων βασισμένο σε εικόνες από αριθμούς σπιτιών από την υπηρεσία Google Street View. Διαθέτει πάνω από 600000 εικόνες διαχωρισμένες σε 10 κλάσεις και διατίθεται σε δύο μορφές όπου η μία βασίζεται σε πρωτότυπες εικόνες και η άλλη σε μορφολογία παρόμοια με το MNIST με μέγεθος 32×32
- Το **ImageNet**⁵ είναι μια τεράστια βάση δεδομένων που περιέχει πάνω από 14.000.000 εικόνες διαχωρισμένες σε πάνω από 21000 κλάσεις. Η βάση δεδομένων στηρίζει το διαχωρισμό της με

¹ <http://yann.lecun.com/exdb/mnist/>

² <http://www.cs.toronto.edu/~kriz/cifar.html>

³ <http://www.cs.toronto.edu/~kriz/cifar.html>

⁴ <http://ufldl.stanford.edu/housenumbers/>

⁵ <http://www.image-net.org/>

βάση τους διαγωνισμούς ImageNet Large Scale Visual Recognition Challenges. Για παράδειγμα ο διαγωνισμός του 2012 εμπεριέχει δεδομένα εκπαίδευσης 1.2 εκατομμυρίων εικόνων από 1000 κατηγορίες. Τα σετ αξιολόγησης και ελέγχου εμπεριέχουν 150000 εικόνες από τις παραπάνω κατηγορίες.

Ασθένεια Alzheimer

Στη συγκεκριμένη παράγραφο παραθέτουμε στοιχεία για βάσεις δεδομένων σχετικές με την ασθένεια του Alzheimer. Η αναφορά έγινε με χρήση πληροφοριών από τον ιστότοπο ⁶.

- Το **ADNI** (Alzheimer’s Disease Neuroimaging Initiative) ⁷ είναι ένας οργανισμός που έχει συσταθεί με στόχο να παρέχει δεδομένα ηλεκτρονικής μορφής σε ερευνητές της νόσου Alzheimer. Στα είδη των δεδομένων εμπεριέχονται στοιχεία γηραιών ενηλίκων με αναλύσεις που διεξάγονται σε βάθος χρόνου και συμπεριλαμβάνουν δομικές μαγνητικές τομογραφίες είδους T1 και T2 καθώς και λειτουργικές μαγνητικές τομογραφίες [84].
- Η οργάνωση **OASIS-BRAINS** ⁸ αποτελεί ένα ερευνητικό σχέδιο που στόχο έχει την ελεύθερη παροχή νευροαπεικονιστικών δεδομένων στην επιστημονική κοινότητα γύρω από τη νόσο Alzheimer. Στα πλαίσια υλοποίησης της παραπάνω δέσμευσης διατίθενται 3 σετ δεδομένων. Το πρώτο σύνολο αφορά τη διατμηματική έρευνα της νόσου σε 416 ενήλικες και παρέχονται δεδομένα T1 μαγνητικών τομογραφιών. [85]. Το δεύτερο αφορά μια έρευνα που διενεργήθηκε με τη συμμετοχή 150 γηραιών ενηλίκων σε βάθος χρόνου και εμπεριέχει εκ νέου εικόνες μαγνητικής τομογραφίας τύπου T1 [86]. Το τρίτο σετ περιγράφει μια έρευνα που συμμετείχαν 1098 άτομα με 2168 συνεδρίες μαγνητικής τομογραφίας και 1608 συνεδρίες τομογραφίας με εκπομπή ποζιτρονίων [87]. Η πειραματική μας εφαρμογή βασίστηκε στο δεύτερο σύνολο δεδομένων.
- Το **OpenNeuro** ⁹ είναι μια δομή που περιλαμβάνει παραπάνω από 75 σετ δεδομένων για διαφορετικά προβλήματα νευρολογικής φύσης. Μέχρι πρότινος η εν λόγω προσπάθεια ονομαζόταν OpenfMRI όπως αναφέρεται και στο [88].

⁶ <https://github.com/cMadan/openMorph>

⁷ <http://adni.loni.usc.edu>

⁸ <http://www.oasis-brains.org>

⁹ <https://www.openneuro.org>

Κεφάλαιο 6

Αναγνώριση της Νόσου Alzheimer με Χρήση Μεταφερόμενης Μάθησης

Σε αυτό το κεφάλαιο παρουσιάζεται συνοπτικά η πειραματική εφαρμογή της εργασίας. Στηριζόμενοι στο πειραματικό πλαίσιο του PyTorch [89] και της βιβλιοθήκης fastai [90] προσπαθήσαμε να δομήσουμε ένα ταξινομητή της νόσου Alzheimer με χρήση της τεχνικής της μεταφερομένης μάθησης σε λίγες γραμμές κώδικα. Ο συνολικός κώδικας της διπλωματικής παρατίθεται στο σύνδεσμο ¹.

6.1 Μεταφερόμενη Μάθηση

Σε πρώτο στάδιο αξίζει να περιγράψουμε την ιδέα της *μεταφερόμενης μάθησης* (*transfer learning*). Η κεντρική ιδέα της μεταφερόμενης μάθησης είναι ότι διαλέγουμε ένα ήδη υπάρχον νευρωνικό δίκτυο, εκπαιδευμένο σε ένα διαφορετικό σύνολο δεδομένων από αυτό του προβλήματος που καλούμαστε να επιλύσουμε και προσαρμόζουμε τη γνώση του προεκπαιδευμένου αυτού μοντέλου στο πρόβλημα μας. Συνήθως το σύνολο δεδομένων του προβλήματος μας είναι πολύ μικρότερου μεγέθους συγκριτικά με αυτό που χρησιμοποιείται στην προεκπαίδευση. Στη περίπτωση μας χρησιμοποιούμε σαν σύνολο προεκπαίδευσης το ImageNet που εμπεριέχει εικόνες φυσικών αντικειμένων και προσπαθούμε να επιλύσουμε το πρόβλημα ταξινόμησης εικόνων δομικής μαγνητικής τομογραφίας στο σύνολο δεδομένων του [86].

Τα βήματα που χρειάζεται να ακολουθήσουμε για να εφαρμόσουμε τη τεχνική της μεταφερόμενης μάθησης είναι τα ακόλουθα :

1. Εκπαιδεύουμε το μοντέλο μας σε ένα πολύ μεγάλο σύνολο δεδομένων διαφορετικό από το πρόβλημά μας.
2. Συγκεντρώνουμε το σύνολο δεδομένων που αντιστοιχεί στο ερευνητικό μας ερώτημα και το οποίο όπως είπαμε έχει μικρότερο μέγεθος από το σύνολο προεκπαίδευσης.
3. Αφαιρούμε το τελευταίο επίπεδο του νευρωνικού δικτύου που προεκπαιδεύσαμε. Συνήθως το επίπεδο αυτό αναλαμβάνει να φέρει σε πέρας τη διαδικασία της ταξινόμησης.
4. Στη θέση του επιπέδου που αφαιρέσαμε εισάγουμε ένα καινούργιο μη εκπαιδευμένο επίπεδο.
5. Παγώνουμε τις παραμέτρους των επιπέδων που προηγούνται του νεοεισερχόμενου επιπέδου.
6. Χρησιμοποιούμε κάποια τεχνική εκπαίδευσης όπως ο αλγόριθμος κατάβασης κλίσης για να εκπαιδεύσουμε τις παραμέτρους που αντιστοιχούν μόνο στο νέο επίπεδο.

Ακολουθώντας τα παραπάνω βήματα ολοκληρώνεται η διαδικασία της μεταφερόμενης μάθησης. Τελικά με χρήση ενός πολύ μικρότερου συνόλου δεδομένων και εκμεταλλευόμενοι τη γνώση της προεκπαίδευσης που αποθηκεύεται στις τιμές των παραμέτρων του παγωμένου σταδίου, έχουμε τη δυνατότητα να παράγουμε προβλέψεις για το πρόβλημα ενδιαφέροντος.

¹ <https://github.com/Pristakos/alzheimer>

6.2 Μέθοδος

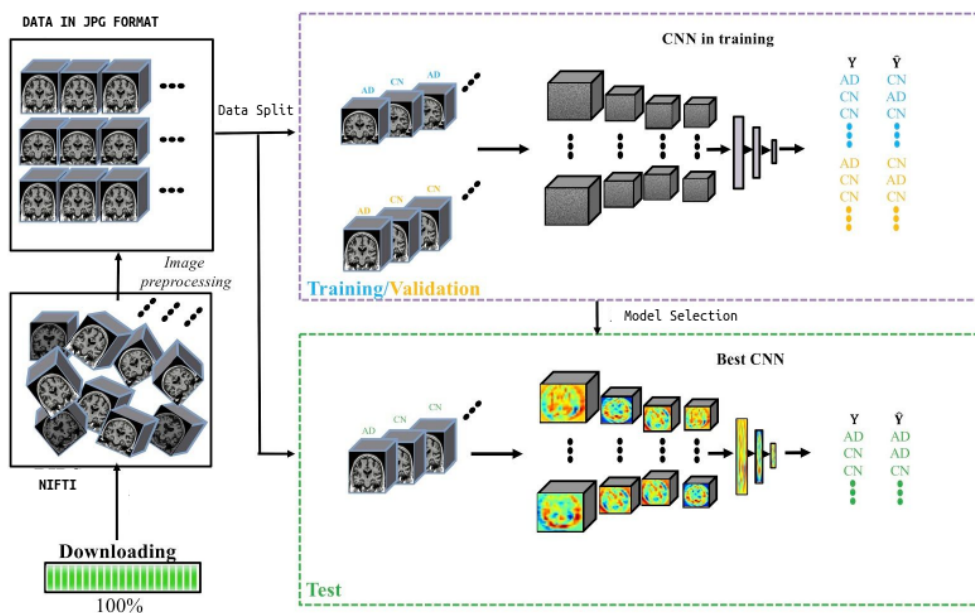
Προεπεξεργασία Δεδομένων

Τα δεδομένα στην αρχική τους μορφή βρίσκονταν σε dual nifti format. Χρησιμοποιήσαμε τα script combo και nii2jpg που παρατίθενται στη διεύθυνση ² για να μετατρέψουμε την δομή τους σε nii format και να αλλάξουμε την ονομασία τους προκειμένου να μπορούν να αναγνωριστούν από την βιβλιοθήκη του fastai. Στη συνέχεια με χρήση των script med2image και Choose10to119.py μετατρέπουμε το nii όγκο σε εικόνες jpg 256 × 256 pixel και διατηρούμε μόνο τις 110 πιο σημαντικές πληροφοριακά.

Εκτός των άλλων χρησιμοποιήθηκαν οι αφινικοί μετασχηματισμοί της παραπάνω βιβλιοθήκης για να πραγματοποιηθεί προσαύξηση των δεδομένων και τα δεδομένα κανονικοποιήθηκαν με βάση το Imagenet. Κανένας παραπάνω μετασχηματισμός ειδικής επεξεργασίας αναφορικά με το πρόβλημα της ταξινόμησης του Alzheimer δεν εφαρμόστηκε διότι ενδιαφερόμαστε να εξετάσουμε κατά πόσο μπορεί να επιτευχθεί ο στόχος της κατηγοριοποίησης με την μικρότερη δυνατή προεπεξεργασία δεδομένων.

Εκπαίδευση

Μια επισκόπηση της εφαρμογής που κληθήκαμε να υλοποιήσουμε φαίνεται στο Σχήμα 29

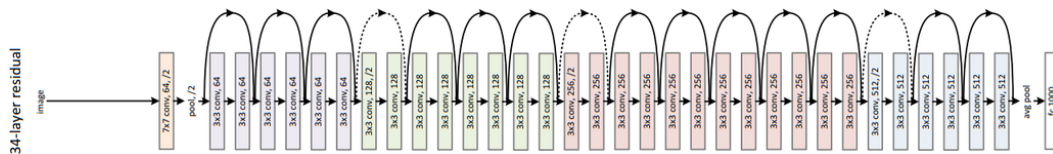


Σχήμα 29: Επισκόπηση της Πειραματικής Εφαρμογής

Το πρώτο βήμα για την υλοποίηση της εφαρμογής ήταν ο καθορισμός του συνόλου δεδομένων που θα χρησιμοποιούσαμε. Επιλέχθηκε το σύνολο δεδομένων [86] που περιέχει 150 γηραιούς ενήλικες με δεδομένα που παράγονται σε βάθος χρόνου αναφορικά με την κατάσταση της υγείας τους. Διαχωρίσαμε τα δεδομένα σε δύο ομάδες 72 ασθενών και 72 υγείων ατόμων. Επιπλέον δημιουργήσαμε τα σύνολα εκπαίδευσης, επαλήθευσης και ελέγχου με 116 άτομα (58 υγιά και 58 νοσούντα) στο σύνολο εκπαίδευσης, 14 άτομα (7 υγιά και 7 νοσούντα) στο σύνολο επαλήθευσης και 14 άτομα (7 υγιά και 7 νοσούντα) στο σύνολο ελέγχου. Η αρχιτεκτονική που θα εργασθούμε είναι αυτή του ResNet34 [77], ο σκελετός της οποίας φαίνεται στο Σχήμα 30.

Προεκπαίδευσουμε το εν λόγω δίκτυο στο ImageNet και στη συνέχεια παγώσαμε τα αρχικά επίπεδα. Εκπαίδευσουμε το μοντέλο για 6 εποχές που σημαίνει ότι εκθέσαμε το μοντέλο 6 φορές σε όλο

² <https://github.com/Pristakos/alzheimer>



Σχήμα 30: Η Αρχιτεκτονική ResNet34.[77]

το σετ εκπαίδευσης, με ρυθμό εκμάθησης ίσο με 0.003. Σε κάθε εποχή καταγράψαμε την ακρίβεια των προβλέψεων του μοντέλου πάνω στο σύνολο επαλήθευσης. Στη συνέχεια ενεργοποιήσαμε όλα τα επίπεδα του μοντέλου και συνεχίσαμε την εκπαίδευση για άλλες 6 εποχές ρυθμίζοντας κατάλληλα την υπερπαράμετρο του ρυθμού μάθησης χρησιμοποιώντας τον κανόνα ενός κύκλου που παρουσιάζεται στο [91].

Τέλος αφήσαμε το μοντέλο μας να διενεργήσει προβλέψεις πάνω στο σύνολο ελέγχου για 6 εποχές προκειμένου να εξετάσουμε την ικανότητα γενίκευσης του μοντέλου. Ο έλεγχος της γενίκευσης συμπεριελάμβανε τις εξής τεχνικές :

- *Έλεγχος του πίνακα σύγχυσης(confusion matrix)*. Ο πίνακας σύγχυσης περιγράφει περιληπτικά τις προβλεπτικές αστοχίες και επιτυχίες του μοντέλου αναφορικά με κάθε κλάση του προβλήματος. Στον ένα άξονα του πίνακα αντιστοιχίζεται η πραγματική κλάση του προβλήματος και στον άλλο άξονα η πρόβλεψη του μοντέλου.
- *Έλεγχος της ακρίβειας (accuracy)*. Η ακρίβεια είναι μια μετρική που προκύπτει από το λόγο του συνόλου των σωστών προβλέψεων του μοντέλου προς το σύνολο των προβλέψεων που παρήγαγε πάνω στο σετ επαλήθευσης.
- *Σύγκριση των απωλειών στο σύνολο εκπαίδευσης με τις απώλειες στο σύνολο επαλήθευσης*. Η παραπάνω διαδικασία αποτελεί ένα εμπειρικό κανόνα με βάση τον οποίο μπορούμε να διαπιστώσουμε αν το μοντέλο μας καταλήγει να υπερπροσαρμόζεται στα δεδομένα εκπαίδευσης. Πιο συγκεκριμένα αν το $train_{loss} \ll valid_{loss}$ τότε το νευρωνικό κάνει υπερπροσαρμογή (overfit) στα δεδομένα εκπαίδευσης και δεν μπορεί να γενικεύσει τη γνώση του σε καινούρια δεδομένα.

Η εκπαίδευση του δικτύου στις πρώτες έξι εποχές με ρυθμό μάθησης 0.003 φαίνονται στο Σχήμα 31.

Μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι οι απώλειες εκπαίδευσης μειώνονται με το πέρασμα των εποχών σε αντίθεση με τις απώλειες επαλήθευσης οι οποίες αυξάνονται. Επιπλέον καθ' όλη τη διάρκεια της εκπαίδευσης το $train_{loss} \ll valid_{loss}$ με το παραπάνω να αποτελεί ένδειξη πιθανής υπερπροσαρμογής του μοντέλου. Άλλωστε με τη συνέχιση της εκπαίδευσης για άλλες έξι εποχές με αυξανόμενο ρυθμό μάθησης στο διάστημα $1e - 05, 1e - 03$ η κατάσταση δεν άλλαξε με το φαινόμενο υπερπροσαρμογής να συνεχίζεται όπως φαίνεται στο Σχήμα 32.

Ένας από τους λόγους για τους οποίους παρατηρείται υπερπροσαρμογή είναι η πολυπλοκότητα του μοντέλου που οφείλεται στο μεγάλο πλήθος παραμέτρων που διαθέτει. Προκειμένου να περιορίσουμε τη συμπεριφορά της υπερπροσαρμογής πραγματοποιήσαμε δύο ξεχωριστούς πειραματισμούς.

Στον πρώτο εισάγαμε στο μοντέλο μια υπερπαράμετρο που ονομάζεται *κατάπτωση βαρών (weight decay)* στηριζόμενοι στο έργο των [92]. Η συγκεκριμένη παράμετρος ουσιαστικά εφαρμόζει ένα *ρυθμιστικό μηχανισμό τύπου L2 (L2 Regularization)* που εν συντομία καθορίζει μια ποινή ανάλογη της απώλειας για τις λανθασμένες προβλέψεις του μοντέλου και προσαρμόζει με βάση αυτή τη ποινή τις τιμές που λαμβάνουν οι παράμετροι των βαρών του δικτύου. Επαναλάβαμε τη διαδικασία εκπαίδευσης με $wd = 0.5$ και τα αποτελέσματα εφαρμογής της κατάπτωσης βαρών φαίνονται στα Σχήματα 33, 34 όπου παρατηρούμε ότι η επιρροή της υπερπροσαρμογής για ίδιο αριθμό εποχών εκπαίδευσης έχει μειωθεί αισθητά σε σχέση με τα Σχήμα 31,32.

Προκειμένου να περιορίσουμε ακόμα περισσότερο το φαινόμενο της υπερπροσαρμογής χρησιμοποιούμε ταυτόχρονα με το ρυθμιστικό μηχανισμό L2 άλλη μια τεχνική που ονομάζεται *αποκοπή*

```
learn.fit_one_cycle(6, 3e-03)
```

epoch	train_loss	valid_loss	accuracy	time
0	0.730759	0.838301	0.537662	37:02
1	0.664312	1.038019	0.444156	03:23
2	0.503186	1.731547	0.357143	03:22
3	0.403322	1.623360	0.407143	03:24
4	0.306000	1.797512	0.418831	03:24
5	0.265839	2.062396	0.398052	03:24

Σχήμα 31: Εκπαίδευση Δικτύου για 6 Εποχές με $lr = 0.003$

```
learn.fit_one_cycle(6, max_lr=slice(1e-05, 1e-03))
```

epoch	train_loss	valid_loss	accuracy	time
0	0.280742	2.055254	0.391558	03:24
1	0.262988	2.199062	0.422727	03:24
2	0.265180	2.162194	0.412987	03:22
3	0.281453	2.459296	0.392857	03:24
4	0.288034	2.148094	0.409091	03:23
5	0.245819	2.256573	0.409091	03:23

Σχήμα 32: Συνέχιση Εκπαίδευσης για 6 Εποχές με $lr = (1e - 05, 1e - 03)$

συνδέσεων (*dropout*) [93]. Όπως δηλώνει και η ονομασία της η συγκεκριμένη μέθοδος απενεργοποιεί συνδέσεις στο δίκτυο μας. Αυτό έχει ως συνέπεια το μοντέλο να απλουστεύει τη μορφή του και να μην υπερπροσαρμόζεται στα δεδομένα.

Τελικά επαναλάβαμε τη διαδικασία εκπαίδευσης εισάγοντας άλλη μια υπερπαράμετρο $ps = 0.01$ που ελέγχει την αποκοπή συνδέσεων. Τα Σχήματα 35, 36 αποτυπώνουν την εικόνα της εκπαίδευσης του μοντέλου μας μετά την εφαρμογή και των δύο τεχνικών περιορισμού της υπερπροσαρμογής.

```
learn.fit_one_cycle(6, 3e-03)
```

epoch	train_loss	valid_loss	accuracy	time
0	0.697735	1.036686	0.448052	29:55
1	0.602923	0.904103	0.524026	03:35
2	0.611181	0.724004	0.552597	03:30
3	0.546991	0.911068	0.487013	03:56
4	0.461094	0.911428	0.483117	03:24
5	0.410912	1.115680	0.456493	03:21

Σχήμα 33: Εκπαίδευση για 6 Εποχές με $wd = 0.5$ και $lr = 0.003$

```
learn.fit_one_cycle(6, max_lr=slice(1e-03, 1e-02))
```

epoch	train_loss	valid_loss	accuracy	time
0	0.507207	1.123066	0.384416	03:25
1	0.651310	0.847287	0.466234	03:31
2	0.627808	0.944519	0.459091	03:35
3	0.527857	0.963672	0.497403	03:30
4	0.472773	0.967743	0.483766	03:53
5	0.445170	1.007274	0.468182	03:41

Σχήμα 34: Συνέχιση Εκπαίδευσης για 6 Εποχές με $wd = 0.5$ και $lr = (0.001, 0.01)$

6.3 Αποτελέσματα

Η σύγκριση των Σχημάτων 31,31 με τα αντίστοιχα Σχήματα 35,36 καταδεικνύει την μείωση της επιρροής της υπερπροσαρμογής στη φύση του μοντέλου μας αφού εισάγαμε τις υπερπαραμέτρους wd και ps . Έχοντας εκπαιδεύσει το τελικό μας μοντέλο κάνουμε τον έλεγχο πάνω στο σετ ελέγχου. Η μετρική της ακρίβειας του μοντέλου μας ανέρχεται στην τάξη του 54%

Οι μαγνητικές τομογραφίες που κατηγοριοποιήθηκαν λανθασμένα με πιο συστηματικό τρόπο από

```
learn.fit_one_cycle(6, 3e-03)
```

epoch	train_loss	valid_loss	accuracy	time
0	0.680883	0.807789	0.532468	03:19
1	0.654689	0.897291	0.459091	03:21
2	0.666382	0.893054	0.503896	03:21
3	0.639678	0.885312	0.494156	03:17
4	0.600889	0.924259	0.500649	03:14
5	0.540435	0.952034	0.488312	03:15

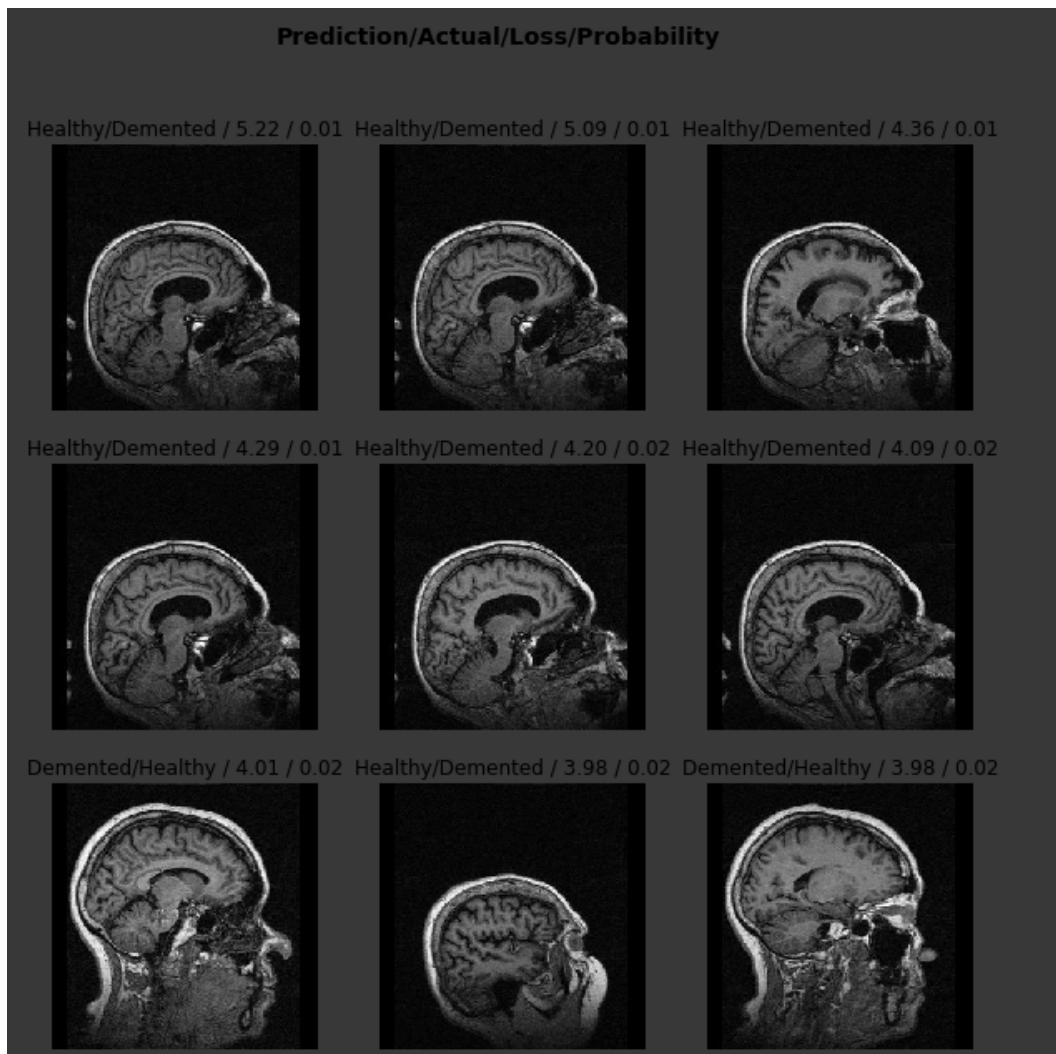
Σχήμα 35: Εκπαίδευση για 4 Εποχές με $ps = 0.01$, $wd = 0.5$ και $lr = 0.003$

```
learn.fit_one_cycle(6, max_lr=slice(1e-03, 1e-02))
```

epoch	train_loss	valid_loss	accuracy	time
0	0.602776	0.798005	0.458442	03:14
1	0.670611	0.723156	0.555195	03:15
2	0.673621	0.725532	0.527273	03:13
3	0.624023	0.822533	0.504545	03:14
4	0.589404	0.878517	0.511688	03:14
5	0.532601	0.908703	0.475974	03:14

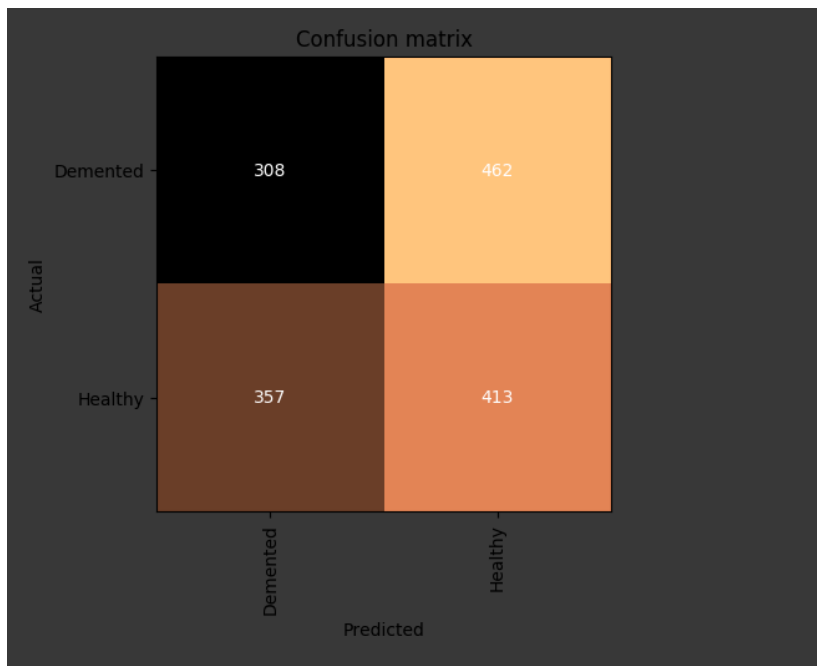
Σχήμα 36: Συνέχιση Εκπαίδευσης για 4 Εποχές με $ps = 0.01$, $wd = 0.5$ και $lr = (0.001, 0.01)$

το μοντέλο μας φαίνονται στο Σχήμα 37.



Σχήμα 37: Συχνότερα Λάθη

Στο Σχήμα 38 φαίνονται τα στοιχεία του πίνακα σύγκυσης με τα λάθη τα οποία παρουσίασε το μοντέλο στις προβλέψεις του και την αντίστοιχη ποσότητα απωλειών.



Σχήμα 38: Πίνακας Σύγκυσης

Σχόλια

Ο τελικός σχολιασμός των αποτελεσμάτων μπορεί να αποτυπωθεί συνοπτικά στις εξής παρατηρήσεις :

- **Υπερπροσαρμογή.** Η χρήση των μεθόδων της αποκοπής συνδέσεων και της κατάπτωσης βαρών μείωσε σημαντικά την επιρροή της υπερπροσαρμογής. Η επιλογή κάποιας αρχιτεκτονικής με μικρότερο αριθμό παραμέτρων ενδεχομένως να αντιμετώπιζε πιο άμεσα το φαινόμενο της υπερπροσαρμογής.
- **Μεταφερόμενη Μάθηση.** Η χρήση μεταφερόμενης μάθησης σε σύνολο προεκπαίδευσης φυσικών εικόνων (ImageNet) συνέβαλε στην επιτυχή εκπαίδευση του μοντέλου μας με τη χρήση μικρού σετ δεδομένων. Ωστόσο όσο αφορά την προβλεπτική ικανότητα του μοντέλου είχε δραματική επιρροή στην αύξηση της ακρίβειας του μοντέλου μας που διαχειρίζεται εικόνες διαφορετικού τύπου (μαγνητικές τομογραφίες).
- **Σύνολο Δεδομένων.** Μια πιθανή εξήγηση για την αδυναμία του μοντέλου να γενικεύσει τη γνώση του πιο αποδοτικά είναι ο μικρός αριθμός του συνόλου δεδομένων που είχαμε στη διάθεση μας συγκριτικά με τα τυπικά σετ δεδομένων σε προβλήματα βαθιάς μάθησης.
- **Αρχιτεκτονική.** Η χρήση μιας αρχιτεκτονικής τριών διαστάσεων, σε αντίθεση με την αρχιτεκτονική δύο διαστάσεων που χρησιμοποιήθηκε, ενδεχομένως να απέφερε ποιοτικότερα αποτελέσματα. Καθώς τα δεδομένα μαγνητικής τομογραφίας είναι επίσης τρισδιάστατα θα μπορούσε να τα εκμεταλλευτεί πλήρως χωρίς την απώλεια πληροφορίας όπως έγινε στο μοντέλο μας κατά τον τεμαχισμό σε εικόνες δύο διαστάσεων.

Κεφάλαιο 7

Συμπεράσματα

7.1 Ανακεφαλαίωση και Συμβολή της Διπλωματικής Εργασίας

Η παρούσα διπλωματική εργασία εξέτασε το πρόβλημα της ταξινόμησης της νόσου Alzheimer με χρήση συνελκτικών νευρωνικών δικτύων. Στο πλαίσιο αυτό παρουσιάσαμε συνοπτικά πώς το εν λόγω πρόβλημα εμπίπτει στη κατηγορία ενός προβλήματος μάθησης. Επιπλέον περιγράψαμε τους κυριότερους μηχανισμούς με βάση τους οποίους επιλύεται ένα πρόβλημα μηχανικής μάθησης, αναλύοντας τόσο κλασικούς αλγορίθμους μηχανικής μάθησης όσο και προσεγγίσεις βαθιάς μάθησης. Ωστόσο η πιο θεμελιώδης συμβολή της διπλωματικής εργασίας περιλαμβάνει δύο άξονες:

1. Την σύγκριση των state of the art εργασιών γύρω από το επιστημονικό πρόβλημα της εργασίας με κριτήριο την προσεκτική κρίση των αποτελεσμάτων τους. Με αυτό το τρόπο αποφεύγονται προσεγγίσεις που στηρίζονται σε γενίκευση αποτελεσμάτων που δυστυχώς υποφέρουν από διαρροή δεδομένων.
2. Την προσπάθεια πραγμάτωσης των παραπάνω γνώσεων σε μια εφαρμογή ταξινόμησης της νόσου Alzheimer αποτυπωμένη σε λίγες γραμμές κώδικα, η οποία στηρίχθηκε σε ιδέες και προσεγγίσεις που χρησιμοποιούνται ευρέως στην επιστημονική κοινότητα της βαθιάς μάθησης. Στο πνεύμα της ελεύθερης διάδοσης της γνώσης, ο κώδικας για την εν λόγω εργασία είναι αναρτημένος στον ιστότοπο <https://github.com/Pristakos/alzheimer>.

7.2 Προτάσεις για Μελλοντική Έρευνα

Στα πλαίσια μελλοντικής έρευνας για την ταξινόμηση του Alzheimer με συνελκτικά νευρωνικά δίκτυα θεωρούμε ότι ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζουν οι εξής προσεγγίσεις έρευνας :

- Κατασκευή ενός νευρωνικού δικτύου με αρχιτεκτονική τριών διαστάσεων, ώστε να διαχειρίζεται με συνεχή τρόπο τον τρισδιάστατο τύπο εισόδου της δομικής μαγνητικής τομογραφίας. Έτσι δεν θα χρειάζεται τεμαχισμός των ογκομετρικών δεδομένων σε εικόνες δύο διαστάσεων με αποτέλεσμα να μην χάνεται σημαντική ποσότητα απεικονιστικής πληροφορίας. Ωστόσο πρέπει να γνωρίζουμε ότι η εκπαίδευση τέτοιων δικτύων είναι υπολογιστικά δαπανηρή.
- Έλεγχος εναλλακτικών τύπων εισόδου για το μοντέλο ταξινόμησης αντί εικόνων 2 διαστάσεων δομικής μαγνητικής τομογραφίας. Προτείνεται πειραματισμός με εισόδους τύπου λειτουργικών μαγνητικών τομογραφιών (functional magnetic resonance imaging) ή τομογραφίες εκπομπής ποζιτρονίων (positron emission tomography).
- Πειραματισμός με χρήση μεταφερόμενης μάθησης πάνω σε εικόνες με μορφή παρόμοια με αυτή των δομικών μαγνητικών τομογραφιών. Μια ενδιαφέρουσα εναλλακτική πρόταση θα ήταν η προεκπαίδευση του δικτύου σε δομές δεδομένων όπως το ImageNet αλλά σε grayscale απεικόνιση.

Βιβλιογραφία

- [1] M. A. DeTure and D. W. Dickson, “The neuropathological diagnosis of Alzheimer’s disease,” *Molecular Neurodegeneration*, vol. 14, Aug. 2019, issn: 1750-1326. doi: 10.1186/s13024-019-0333-5. [Online]. Available: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC6679484/> (visited on 08/28/2019).
- [2] “2016 Alzheimer’s disease facts and figures,” en, *Alzheimer’s & Dementia*, vol. 12, no. 4, pp. 459–509, Apr. 2016, issn: 15525260. doi: 10.1016/j.jalz.2016.03.001. [Online]. Available: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1552526016000856> (visited on 08/28/2019).
- [3] “National Vital Statistics Reports Volume 68, Number 9 June 24, 2019 Deaths: Final Data for 2017,” en, p. 77,
- [4] L. E. Hebert, J. Weuve, P. A. Scherr, and D. A. Evans, “Alzheimer disease in the United States (2010-2050) estimated using the 2010 census,” en, *Neurology*, vol. 80, no. 19, pp. 1778–1783, May 2013, issn: 0028-3878, 1526-632X. doi: 10.1212/WNL.0b013e31828726f5. [Online]. Available: <http://www.neurology.org/cgi/doi/10.1212/WNL.0b013e31828726f5> (visited on 08/28/2019).
- [5] M. F. Folstein, S. E. Folstein, and P. R. McHugh, ““Mini-mental state”,” en, *Journal of Psychiatric Research*, vol. 12, no. 3, pp. 189–198, Nov. 1975, issn: 00223956. doi: 10.1016/0022-3956(75)90026-6. [Online]. Available: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0022395675900266> (visited on 09/02/2019).
- [6] D. P. Perl, “Neuropathology of Alzheimer’s Disease,” *The Mount Sinai Journal of Medicine, New York*, vol. 77, no. 1, pp. 32–42, 2010, issn: 0027-2507. doi: 10.1002/msj.20157. [Online]. Available: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC2918894/> (visited on 08/28/2019).
- [7] S. Shalev-Shwartz and S. Ben-David, “Understanding Machine Learning,” en, p. 416,
- [8] R. Yamashita, M. Nishio, R. K. G. Do, and K. Togashi, “Convolutional neural networks: an overview and application in radiology,” en, *Insights into Imaging*, vol. 9, no. 4, pp. 611–629, Aug. 2018, issn: 1869-4101. doi: 10.1007/s13244-018-0639-9. [Online]. Available: <https://insightsimaging.springeropen.com/articles/10.1007/s13244-018-0639-9> (visited on 09/03/2019).
- [9] T. M. Mitchell, *Machine Learning*, en, ser. McGraw-Hill series in computer science. New York: McGraw-Hill, 1997, isbn: 978-0-07-042807-2.
- [10] K. P. Murphy, *Machine learning: a probabilistic perspective*, en, ser. Adaptive computation and machine learning series. Cambridge, MA: MIT Press, 2012, isbn: 978-0-262-01802-9.
- [11] A. Zhang, Z. C. Lipton, M. Li, and A. J. Smola, “Dive into Deep Learning,” en, p. 651,
- [12] A. Burkov, *The Hundred-Page Machine Learning Book*, en. [Online]. Available: <http://them1book.com/> (visited on 09/17/2019).
- [13] D. P. Kingma and J. Ba, *Adam: A Method for Stochastic Optimization*, cite arxiv:1412.6980Comment: Published as a conference paper at the 3rd International Conference for Learning Representations, San Diego, 2015, 2014. [Online]. Available: <http://arxiv.org/abs/1412.6980>.

- [14] S. Basaia, F. Agosta, L. Wagner, E. Canu, G. Magnani, R. Santangelo, and M. Filippi, “Automated classification of Alzheimer’s disease and mild cognitive impairment using a single MRI and deep neural networks,” en, *NeuroImage: Clinical*, vol. 21, p. 101 645, 2019, issn: 22131582. doi: 10.1016/j.nicl.2018.101645. [Online]. Available: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S2213158218303930> (visited on 09/20/2019).
- [15] V. N. Vapnik, *Statistical learning theory*, en, ser. Adaptive and learning systems for signal processing, communications, and control. New York: Wiley, 1998, isbn: 978-0-471-03003-4.
- [16] R. Gholami and N. Fakhari, “Support Vector Machine: Principles, Parameters, and Applications,” en, in *Handbook of Neural Computation*, Elsevier, 2017, pp. 515–535, isbn: 978-0-12-811318-9. doi: 10.1016/B978-0-12-811318-9.00027-2. [Online]. Available: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/B9780128113189000272> (visited on 09/06/2019).
- [17] J. Kacprzyk, “Studies in Fuzziness and Soft Computing, Volume 177,” en, p. 434,
- [18] T. Cover and P. Hart, “Nearest neighbor pattern classification,” en, *IEEE Transactions on Information Theory*, vol. 13, no. 1, pp. 21–27, Jan. 1967, issn: 0018-9448, 1557-9654. doi: 10.1109/TIT.1967.1053964. [Online]. Available: <http://ieeexplore.ieee.org/document/1053964/> (visited on 09/23/2019).
- [19] K. Q. Weinberger, J. Blitzer, and L. K. Saul, “Distance Metric Learning for Large Margin Nearest Neighbor Classification,” en, p. 8,
- [20] S. Fosseng, “Learning Distance Functions in k-Nearest Neighbors,” en, PhD thesis, NTNU-Trondheim, Jan. 2013. [Online]. Available: <https://pdfs.semanticscholar.org/48e6/ebb23bb4c70564a280a4e34ec06d4b009685.pdf>.
- [21] M. Deza and E. Deza, *Encyclopedia of distances*, en. Dordrecht : New York: Springer Verlag, 2009, OCLC: ocn310400730, isbn: 978-3-642-00233-5 978-3-642-00234-2.
- [22] V. B. S. Prasath, H. A. A. Alfeilat, O. Lasassmeh, A. B. A. Hassanat, and A. S. Tarawneh, “Distance and Similarity Measures Effect on the Performance of K-Nearest Neighbor Classifier – A Review,” en, *arXiv:1708.04321 [cs]*, Aug. 2017, arXiv: 1708.04321. [Online]. Available: <http://arxiv.org/abs/1708.04321> (visited on 09/25/2019).
- [23] D. W. Aha, D. Kibler, and M. K. Albert, “Instance-based learning algorithms,” *Machine learning*, vol. 6, no. 1, pp. 37–66, 1991.
- [24] F. Li and Y. Yang, “A loss function analysis for classification methods in text categorization,” in *Proceedings of the 20th international conference on machine learning (ICML-03)*, 2003, pp. 472–479.
- [25] R. Bellman, “Adaptive control processes: a guided tour princeton university press,” *Princeton, New Jersey, USA*, 1961.
- [26] S. B. Kotsiantis, “Decision trees: a recent overview,” en, *Artificial Intelligence Review*, vol. 39, no. 4, pp. 261–283, Apr. 2013, issn: 0269-2821, 1573-7462. doi: 10.1007/s10462-011-9272-4. [Online]. Available: <http://link.springer.com/10.1007/s10462-011-9272-4> (visited on 09/25/2019).
- [27] J. R. Quinlan, “Induction of decision trees,” en, *Machine Learning*, vol. 1, no. 1, pp. 81–106, Mar. 1986, issn: 0885-6125, 1573-0565. doi: 10.1007/BF00116251. [Online]. Available: <http://link.springer.com/10.1007/BF00116251> (visited on 09/25/2019).
- [28] L. Breiman, J. H. Friedman, R. A. Olshen, and C. J. Stone, “Classification and regression trees. Belmont, CA: Wadsworth,” *International Group*, vol. 432, pp. 151–166, 1984.
- [29] J. Shafer, R. Agrawal, and M. Mehta, “SPRINT: A scalable parallel classifier for data mining,” in *VLDB*, Citeseer, vol. 96, 1996, pp. 544–555.

- [30] M. Mehta, R. Agrawal, and J. Rissanen, “SLIQ: A fast scalable classifier for data mining,” in *International conference on extending database technology*, Springer, 1996, pp. 18–32.
- [31] S. Kloppel, C. M. Stonnington, C. Chu, B. Draganski, R. I. Scahill, J. D. Rohrer, N. C. Fox, C. R. Jack, J. Ashburner, and R. S. J. Frackowiak, “Automatic classification of MR scans in Alzheimer’s disease,” en, *Brain*, vol. 131, no. 3, pp. 681–689, Feb. 2008, issn: 0006-8950, 1460-2156. doi: 10.1093/brain/awm319. [Online]. Available: <https://academic.oup.com/brain/article-lookup/doi/10.1093/brain/awm319> (visited on 08/28/2019).
- [32] B. Magnin, L. Mesrob, S. Kinkingnéhun, M. Péligrini-Issac, O. Colliot, M. Sarazin, B. Dubois, S. Lehéricy, and H. Benali, “Support vector machine-based classification of Alzheimer’s disease from whole-brain anatomical MRI,” en, *Neuroradiology*, vol. 51, no. 2, pp. 73–83, Feb. 2009, issn: 0028-3940, 1432-1920. doi: 10.1007/s00234-008-0463-x. [Online]. Available: <http://link.springer.com/10.1007/s00234-008-0463-x> (visited on 09/20/2019).
- [33] J. Morra, Zhuowen Tu, L. Apostolova, A. Green, A. Toga, and P. Thompson, “Comparison of AdaBoost and Support Vector Machines for Detecting Alzheimer’s Disease Through Automated Hippocampal Segmentation,” en, *IEEE Transactions on Medical Imaging*, vol. 29, no. 1, pp. 30–43, Jan. 2010, issn: 0278-0062, 1558-254X. doi: 10.1109/TMI.2009.2021941. [Online]. Available: <http://ieeexplore.ieee.org/document/4957035/> (visited on 09/20/2019).
- [34] P. Vemuri, J. L. Gunter, M. L. Senjem, J. L. Whitwell, K. Kantarci, D. S. Knopman, B. F. Boeve, R. C. Petersen, and C. R. Jack, “Alzheimer’s disease diagnosis in individual subjects using structural MR images: Validation studies,” *NeuroImage*, vol. 39, no. 3, pp. 1186–1197, Feb. 2008. doi: 10.1016/j.neuroimage.2007.09.073.
- [35] G. Orru, W. Pettersson-Yeo, A. F. Marquand, G. Sartori, and A. Mechelli, “Using support vector machine to identify imaging biomarkers of neurological and psychiatric disease: a critical review,” *Neuroscience & Biobehavioral Reviews*, vol. 36, no. 4, pp. 1140–1152, 2012.
- [36] D. Zhang, Y. Wang, L. Zhou, H. Yuan, D. Shen, A. D. N. Initiative, *et al.*, “Multimodal classification of Alzheimer’s disease and mild cognitive impairment,” *Neuroimage*, vol. 55, no. 3, pp. 856–867, 2011.
- [37] K. R. Gray, P. Aljabar, R. A. Heckemann, A. Hammers, and D. Rueckert, “Random forest-based similarity measures for multi-modal classification of Alzheimer’s disease,” *NeuroImage*, vol. 65, pp. 167–175, Jan. 2013. doi: 10.1016/j.neuroimage.2012.09.065. [Online]. Available: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC3516432/>.
- [38] E.-S. A. El-Dahshan, T. Hosny, and A.-B. M. Salem, “Hybrid intelligent techniques for MRI brain images classification,” *Digital Signal Processing*, vol. 20, no. 2, pp. 433–441, 2010.
- [39] F. Falahati, E. Westman, and A. Simmons, “Multivariate data analysis and machine learning in Alzheimer’s disease with a focus on structural magnetic resonance imaging,” *Journal of Alzheimer’s disease*, vol. 41, no. 3, pp. 685–708, 2014.
- [40] R. Cuingnet, E. Gerardin, J. Tessieras, G. Auzias, S. Lehéricy, M.-O. Habert, M. Chupin, H. Benali, O. Colliot, A. D. N. Initiative, *et al.*, “Automatic classification of patients with Alzheimer’s disease from structural MRI: a comparison of ten methods using the ADNI database,” *neuroimage*, vol. 56, no. 2, pp. 766–781, 2011.
- [41] I. Goodfellow, Y. Bengio, and A. Courville, *Deep Learning*. The MIT Press, 2016, isbn: 0-262-03561-8 978-0-262-03561-3.
- [42] F. Rosenblatt, “Principles of neurodynamics. perceptrons and the theory of brain mechanisms,” Cornell Aeronautical Lab Inc Buffalo NY, Tech. Rep., 1961.
- [43] W. S. McCulloch and W. Pitts, “A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity,” *The bulletin of mathematical biophysics*, vol. 5, no. 4, pp. 115–133, 1943.

- [44] C. C. Aggarwal, "Neural networks and deep learning," *Cham: Springer International Publishing*, 2018.
- [45] N. Vitureira, M. Letellier, and Y. Goda, "Homeostatic synaptic plasticity: From single synapses to neural circuits," *Current opinion in neurobiology*, vol. 22, pp. 516–21, Oct. 2011. doi: 10.1016/j.conb.2011.09.006.
- [46] H. D. III, *A Course in Machine Learning*, en. [Online]. Available: <http://ciml.info/>.
- [47] G. Cybenko, "Approximation by superpositions of a sigmoidal function," *Mathematics of control, signals and systems*, vol. 2, no. 4, pp. 303–314, 1989.
- [48] C. Nwankpa, W. Ijomah, A. Gachagan, and S. Marshall, "Activation functions: Comparison of trends in practice and research for deep learning," *arXiv preprint arXiv:1811.03378*, 2018.
- [49] D. H. Ackley, G. E. Hinton, and T. J. Sejnowski, "A learning algorithm for Boltzmann machines," *Cognitive science*, vol. 9, no. 1, pp. 147–169, 1985.
- [50] J. Kiefer, J. Wolfowitz, *et al.*, "Stochastic estimation of the maximum of a regression function," *The Annals of Mathematical Statistics*, vol. 23, no. 3, pp. 462–466, 1952.
- [51] L. Bottou and O. Bousquet, "The tradeoffs of large scale learning," in *Advances in neural information processing systems*, 2008, pp. 161–168.
- [52] G. E. Hinton, S. Osindero, and Y.-W. Teh, "A fast learning algorithm for deep belief nets," *Neural computation*, vol. 18, no. 7, pp. 1527–1554, 2006.
- [53] K. Fukushima, "Neocognitron: A hierarchical neural network capable of visual pattern recognition," *Neural networks*, vol. 1, no. 2, pp. 119–130, 1988.
- [54] Y. Lecun, L. Bottou, Y. Bengio, and P. Haffner, "Gradient-Based Learning Applied to Document Recognition," en, *PROCEEDINGS OF THE IEEE*, vol. 86, no. 11, p. 47, 1998.
- [55] M. Z. Alom, T. M. Taha, C. Yakopcic, S. Westberg, P. Sidike, M. S. Nasrin, M. Hasan, B. C. Van Essen, A. A. S. Awwal, and V. K. Asari, "A State-of-the-Art Survey on Deep Learning Theory and Architectures," en, *Electronics*, vol. 8, no. 3, p. 292, Mar. 2019, issn: 2079-9292. doi: 10.3390/electronics8030292. [Online]. Available: <https://www.mdpi.com/2079-9292/8/3/292> (visited on 10/09/2019).
- [56] S. Smith, *Digital signal processing: a practical guide for engineers and scientists*. Elsevier, 2013.
- [57] A. Khan, A. Sohail, U. Zahoor, and A. S. Qureshi, "A survey of the recent architectures of deep convolutional neural networks," *arXiv preprint arXiv:1901.06032*, 2019.
- [58] J. Wen, E. Thibeau-Sutre, J. Samper-González, S. Bottani, S. Durrleman, and N. Burgos, "Convolutional Neural Networks for Classification of Alzheimer's Disease: Overview and Reproducible Evaluation," en, p. 65,
- [59] K. Bäckström, M. Nazari, I. Y.-H. Gu, and A. S. Jakola, "An efficient 3D deep convolutional network for Alzheimer's disease diagnosis using MR images," in *2018 IEEE 15th International Symposium on Biomedical Imaging (ISBI 2018)*, IEEE, 2018, pp. 149–153.
- [60] K. Aderghal, A. Khvostikov, A. Krylov, J. Benois-Pineau, K. Afdel, and G. Catheline, "Classification of Alzheimer disease on imaging modalities with deep CNNs using cross-modal transfer learning," in *2018 IEEE 31st International Symposium on Computer-Based Medical Systems (CBMS)*, IEEE, 2018, pp. 345–350.
- [61] D. Cheng and M. Liu, "CNNs based multi-modality classification for AD diagnosis," in *2017 10th International Congress on Image and Signal Processing, BioMedical Engineering and Informatics (CISP-BMEI)*, IEEE, 2017, pp. 1–5.
- [62] M. Liu, D. Cheng, K. Wang, Y. Wang, A. D. N. Initiative, *et al.*, "Multi-modality cascaded convolutional neural networks for Alzheimer's disease diagnosis," *Neuroinformatics*, vol. 16, no. 3-4, pp. 295–308, 2018.

- [63] S. Korolev, A. Safiullin, M. Belyaev, and Y. Dodonova, "Residual and plain convolutional neural networks for 3d brain mri classification," in *2017 IEEE 14th International Symposium on Biomedical Imaging (ISBI 2017)*, IEEE, 2017, pp. 835–838.
- [64] F. Li, M. Liu, A. D. N. Initiative, *et al.*, "Alzheimer's disease diagnosis based on multiple cluster dense convolutional networks," *Computerized Medical Imaging and Graphics*, vol. 70, pp. 101–110, 2018.
- [65] C. Lian, M. Liu, J. Zhang, and D. Shen, "Hierarchical Fully Convolutional Network for Joint Atrophy Localization and Alzheimer's Disease Diagnosis using Structural MRI," *IEEE transactions on pattern analysis and machine intelligence*, 2018.
- [66] U. Senanayake, A. Sowmya, and L. Dawes, "Deep fusion pipeline for mild cognitive impairment diagnosis," in *2018 IEEE 15th International Symposium on Biomedical Imaging (ISBI 2018)*, IEEE, 2018, pp. 1394–1997.
- [67] A. Valliani and A. Soni, "Deep Residual Nets for Improved Alzheimer's Diagnosis.," in *BCB*, 2017, p. 615.
- [68] M. Liu, J. Zhang, E. Adeli, and D. Shen, "Joint Classification and Regression via Deep Multi-Task Multi-Channel Learning for Alzheimer's Disease Diagnosis," *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, vol. 66, no. 5, pp. 1195–1206, 2018.
- [69] M. Hon and N. M. Khan, "Towards Alzheimer's disease classification through transfer learning," in *2017 IEEE International Conference on Bioinformatics and Biomedicine (BIBM)*, IEEE, 2017, pp. 1166–1169.
- [70] E. Hosseini-Asl, G. Gimel'farb, and A. El-Baz, "Alzheimer's disease diagnostics by a deeply supervised adaptable 3D convolutional network," *arXiv preprint arXiv:1607.00556*, 2018.
- [71] W. Lin, T. Tong, Q. Gao, D. Guo, X. Du, Y. Yang, G. Guo, M. Xiao, M. Du, X. Qu, *et al.*, "Convolutional neural networks-based MRI image analysis for the alzheimer's disease prediction from mild cognitive impairment," *Frontiers in neuroscience*, vol. 12, 2018.
- [72] A. M. Taqi, A. Awad, F. Al-Azzo, and M. Milanova, "The impact of multi-optimizers and data augmentation on TensorFlow convolutional neural network performance," in *2018 IEEE Conference on Multimedia Information Processing and Retrieval (MIPR)*, IEEE, 2018, pp. 140–145.
- [73] T. D. Vu, H.-J. Yang, V. Q. Nguyen, A.-R. Oh, and M.-S. Kim, "Multimodal learning using convolution neural network and Sparse Autoencoder," in *2017 IEEE International Conference on Big Data and Smart Computing (BigComp)*, IEEE, 2017, pp. 309–312.
- [74] S.-H. Wang, P. Phillips, Y. Sui, B. Liu, M. Yang, and H. Cheng, "Classification of Alzheimer's disease based on eight-layer convolutional neural network with leaky rectified linear unit and max pooling," *Journal of medical systems*, vol. 42, no. 5, p. 85, 2018.
- [75] T.-D. Vu, N.-H. Ho, H.-J. Yang, J. Kim, and H.-C. Song, "Non-white matter tissue extraction and deep convolutional neural network for Alzheimer's disease detection," *Soft Computing*, vol. 22, no. 20, pp. 6825–6833, 2018.
- [76] H. Wang, Y. Shen, S. Wang, T. Xiao, L. Deng, X. Wang, and X. Zhao, "Ensemble of 3D densely connected convolutional network for diagnosis of mild cognitive impairment and Alzheimer's disease," *Neurocomputing*, vol. 333, pp. 145–156, 2019.
- [77] K. He, X. Zhang, S. Ren, and J. Sun, *Deep Residual Learning for Image Recognition*, 2015. arXiv: 1512.03385 [cs.CV].
- [78] K. Simonyan and A. Zisserman, *Very Deep Convolutional Networks for Large-Scale Image Recognition*, 2014. arXiv: 1409.1556 [cs.CV].

- [79] A. Farooq, S. Anwar, M. Awais, and S. Rehman, “A deep CNN based multi-class classification of Alzheimer’s disease using MRI,” in *2017 IEEE International Conference on Imaging systems and techniques (IST)*, IEEE, 2017, pp. 1–6.
- [80] C. Wu, S. Guo, Y. Hong, B. Xiao, Y. Wu, Q. Zhang, A. D. N. Initiative, *et al.*, “Discrimination and conversion prediction of mild cognitive impairment using convolutional neural networks,” *Quantitative Imaging in Medicine and Surgery*, vol. 8, no. 10, p. 992, 2018.
- [81] S. Qiu, G. H. Chang, M. Panagia, D. M. Gopal, R. Au, and V. B. Kolachalama, “Fusion of deep learning models of MRI scans, Mini–Mental State Examination, and logical memory test enhances diagnosis of mild cognitive impairment,” *Alzheimer’s & Dementia: Diagnosis, Assessment & Disease Monitoring*, vol. 10, pp. 737–749, 2018.
- [82] K. Gunawardena, R. Rajapakse, and N. Kodikara, “Applying convolutional neural networks for pre-detection of alzheimer’s disease from structural MRI data,” in *2017 24th International Conference on Mechatronics and Machine Vision in Practice (M2VIP)*, IEEE, 2017, pp. 1–7.
- [83] J. Islam and Y. Zhang, “Brain MRI analysis for Alzheimer’s disease diagnosis using an ensemble system of deep convolutional neural networks,” *Brain informatics*, vol. 5, no. 2, p. 2, 2018.
- [84] S. G. Mueller, M. W. Weiner, L. J. Thal, R. C. Petersen, C. R. Jack, W. Jagust, J. Q. Trojanowski, A. W. Toga, and L. Beckett, “Ways toward an early diagnosis in Alzheimer’s disease: The Alzheimer’s Disease Neuroimaging Initiative (ADNI),” *Alzheimer’s & Dementia*, vol. 1, no. 1, pp. 55–66, Jul. 2005. doi: 10.1016/j.jalz.2005.06.003. [Online]. Available: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S155252600500004X?via%5C%3Dihub>.
- [85] D. S. Marcus, T. H. Wang, J. Parker, J. G. Csernansky, J. C. Morris, and R. L. Buckner, “Open Access Series of Imaging Studies (OASIS): Cross-sectional MRI Data in Young, Middle Aged, Nondemented, and Demented Older Adults,” *Journal of Cognitive Neuroscience*, 2018. doi: 0898-929X. [Online]. Available: <https://dash.harvard.edu/handle/1/33896768>.
- [86] D. S. Marcus, A. F. Fotenos, J. G. Csernansky, J. C. Morris, and R. L. Buckner, “Open Access Series of Imaging Studies: Longitudinal MRI Data in Nondemented and Demented Older Adults,” en, *Journal of Cognitive Neuroscience*, vol. 22, no. 12, pp. 2677–2684, Dec. 2010, issn: 0898-929X, 1530-8898. doi: 10.1162/jocn.2009.21407. [Online]. Available: <http://www.mitpressjournals.org/doi/10.1162/jocn.2009.21407> (visited on 09/03/2019).
- [87] P. J. LaMontagne, S. Keefe, W. Lauren, C. Xiong, E. A. Grant, K. L. Moulder, J. C. Morris, T. L. Benzinger, and D. S. Marcus, “OASIS-3: LONGITUDINAL NEUROIMAGING, CLINICAL, AND COGNITIVE DATASET FOR NORMAL AGING AND ALZHEIMER’S DISEASE,” *Alzheimer’s & Dementia*, vol. 14, no. 7, P1097, Jul. 2018. doi: 10.1016/j.jalz.2018.06.1439. [Online]. Available: [https://www.alzheimersanddementia.com/article/S1552-5260\(18\)31611-X/fulltext](https://www.alzheimersanddementia.com/article/S1552-5260(18)31611-X/fulltext).
- [88] R. A. Poldrack, D. M. Barch, J. P. Mitchell, T. D. Wager, A. D. Wagner, J. T. Devlin, C. Cumba, O. Koyejo, and M. P. Milham, “Toward open sharing of task-based fMRI data: the OpenfMRI project,” *Frontiers in Neuroinformatics*, vol. 7, 2013. doi: 10.3389/fninf.2013.00012. [Online]. Available: <https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/fninf.2013.00012/full>.
- [89] A. Paszke, S. Gross, S. Chintala, G. Chanan, E. Yang, Z. DeVito, Z. Lin, A. Desmaison, L. Antiga, and A. Lerer, “Automatic Differentiation in PyTorch,” in *NIPS Autodiff Workshop*, 2017.
- [90] J. Howard *et al.*, *fastai*, 2019. [Online]. Available: <https://github.com/fastai/fastai>.
- [91] L. N. Smith and N. Topin, *Super-Convergence: Very Fast Training of Neural Networks Using Large Learning Rates*, 2017. arXiv: 1708.07120 [cs.LG].

- [92] I. Loshchilov and F. Hutter, “Fixing weight decay regularization in adam,” *arXiv preprint arXiv:1711.05101*, 2017.
- [93] N. Srivastava, G. Hinton, A. Krizhevsky, I. Sutskever, and R. Salakhutdinov, “Dropout: a simple way to prevent neural networks from overfitting,” *The journal of machine learning research*, vol. 15, no. 1, pp. 1929–1958, 2014.