# Redes Neuronales Artificiales Implementación teórica entropía cruzada, multi-label

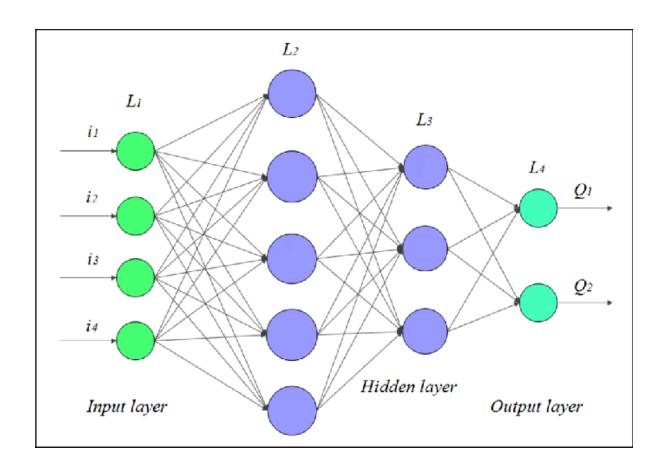
Implementación teórica de una red neuronal artificial usando la función sigmoide para todas las capas de la red (siendo en la capa de salida obligatorio su uso), y como función de coste la entropía cruzada

#### Antes de empezar

Utilizado para problemas de clasificación multivariable multietiquetar

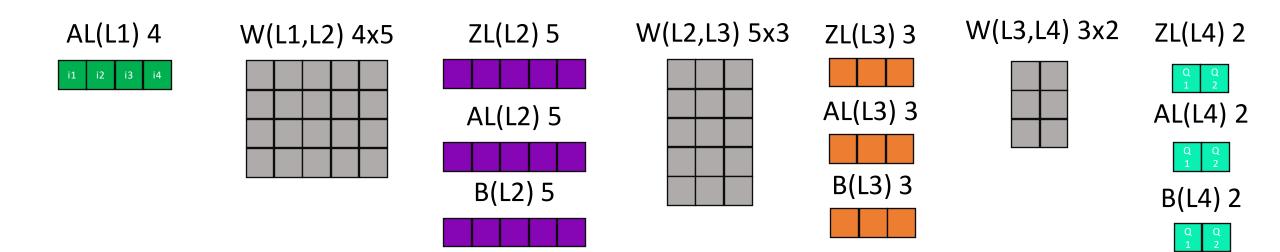
Aquí si es posible utilizar esto para problemas de múltiples etiquetas (multi-label), es decir que, por ejemplo, tengamos el vector [ 1, 1, 0 ] en caso de encontrar un perro y un gato, Ya que se utiliza una función de activación de salida, como sigmoide, que devuelve valores entre 0 y 1 (garantizando que las "probabilidades" son independientes entre sí), y se utiliza una función de coste de entropía cruzada diferente

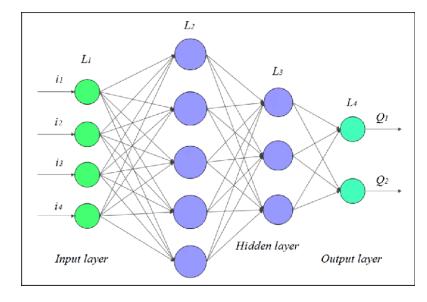
#### Nos basaremos en:



Una red neuronal artificial con esta estructura. Tiene **4 capas.**Las capas ocultas tienen la función de activación sigmoide, y la capa de salida, softmax

#### Representación red matricial:





**B**: vector donde se guardan los valores del bias de la neurona en la capa actual. Se suele inicializar con todos sus valores iguales a 0

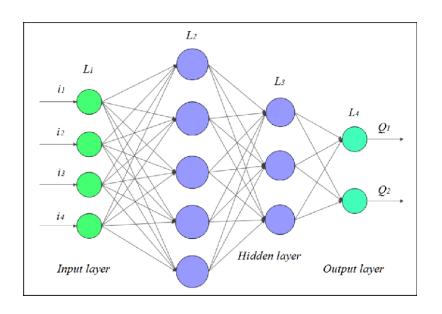
**W**: matriz con los valores de los pesos de las aristas. Se inicializa con valores aleatorios, hay distintas formas de inicializarlos, pero supongamos números entre 3.0 y - 3.0

**ZL**: vector donde se almacena o los valores de entrada (sólo primera capa) o el resultado para cada neurona de la capa actual el calcular el sumatorio del valor de cada neurona de la capa anterior por el peso de la arista que conecta la neurona de la capa actual, más el bias de dicha neurona (resto de capas). No importan sus valores iniciales

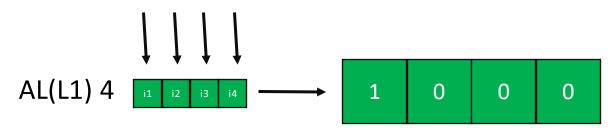
**AL**: vector donde se almacena el resultado de aplicar a cada elemento en ZL la función de activación de dicha capa. No importan sus valores iniciales

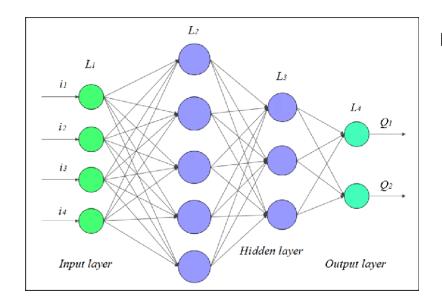
#### Representación red como listas

```
Red.numero capas = 4
Red.zl = [
  [ vector 5 elementos sin importar sus valores ],
  [ vector 3 elementos sin importar sus valores ],
  [ vector 2 elementos sin importar sus valores ]
Red.al = [
  [ vector 4 elementos sin importar sus valores ],
  [ vector 5 elementos sin importar sus valores ],
  [ vector 3 elementos sin importar sus valores ],
  [ vector 2 elementos sin importar sus valores ]
Red.bias = [
  [ vector 5 elementos todos sus valores 0 ],
  [ vector 3 elementos todos sus valores 0 ],
  [vector 2 elementos todos sus valores 0]
Red.pesos = [
  [ matriz 4x5 elementos todos sus valores aleatorios entre (3.0, -3.0)],
  [ matriz 5x3 elementos todos sus valores aleatorios entre (3.0, -3.0) ],
  [ matriz 3x2 elementos todos sus valores aleatorios entre (3.0, -3.0) ]
```

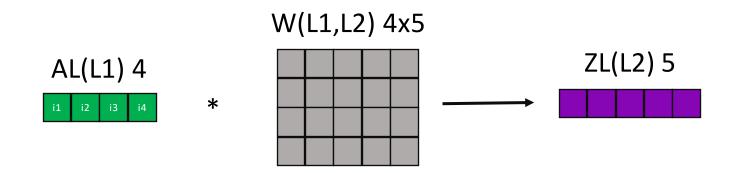


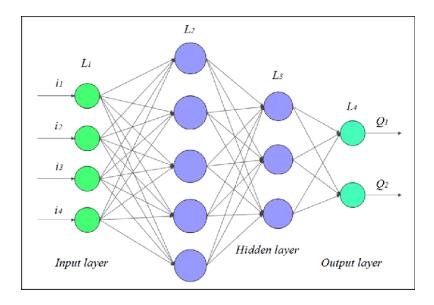
VALORES DE ENTRADA(LISTA) = [ 1, 0, 0, 0 ]



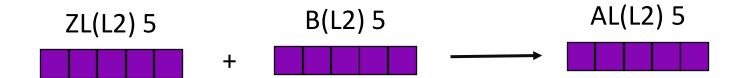


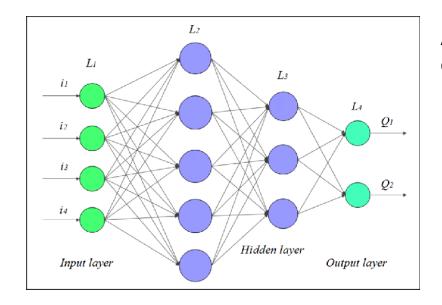
Pasamos los valores de entrada deseados a la primera lista al de la red





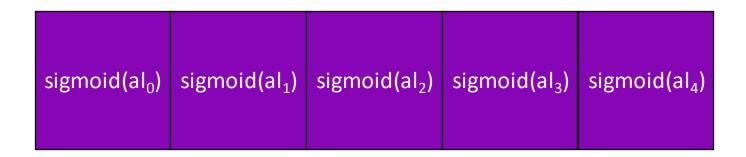
Hasta que no lleguemos a la capa final, calculamos el producto del vector al de la capa actual como matriz de 1 fila por la matriz de pesos de la capa actual. El resultado lo pasamos al vector zl de la capa siguiente. Empezamos desde la capa de entrada

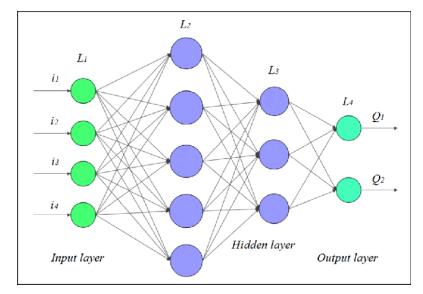




Ahora, sumamos el vector zl de la capa posterior con el vector b de la capa posterior, y copiamos el resultado al vector al de la capa posterior

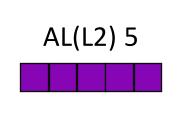
FUNCIÓN\_ACTIVACIÓN\_CAPA\_POSTERIOR ( AL(L2) 5

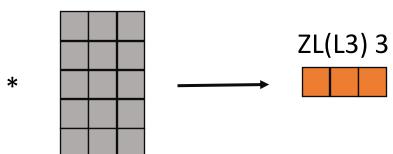


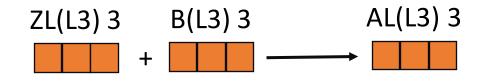


Ahora, aplicamos la función correspondiente a la capa posterior a cada elemento del vector al de la capa posterior. En este ejemplo, consideramos utilizar la función sigmoide para todas las capas, y denotamos cada elemento de al(l2) como a<sub>i</sub>, siendo i la posición de cada elemento en el vector.

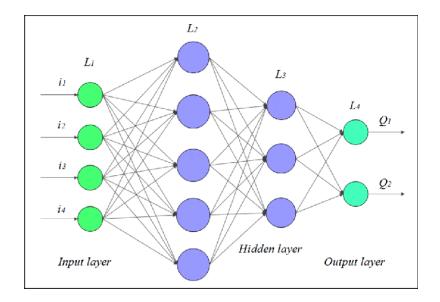
W(L2,L3) 5x3





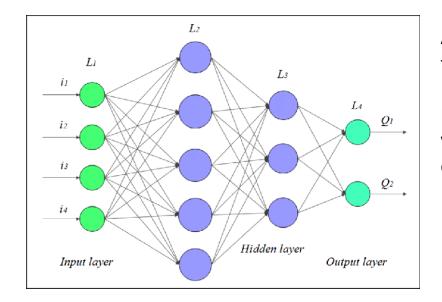


FUNCIÓN\_ACTIVACIÓN\_CAPA\_POSTERIOR ( AL(L3) 3 )



Nos movemos a la siguiente capa y repetimos el proceso





Al final, llegamos a la capa de salida, repetimos el mismo proceso que antes. Al aplicar la función de activación en la capa de salida, el algoritmo finaliza

Nota: en ocasiones, las funciones de activación en la capa de salida pueden depender de los valores del resto de neuronas en la capa de salida, como puede ser el caso de Softmax. En este caso utilizamos la sigmoide, por lo que no es necesario

Vector\_a\_matriz\_1\_fila: recibe como parámetro 1 vector, y devuelve 1 matriz de una fila y tantas columnas como nº elementos del vector Matriz\_1\_fila\_a\_vector: recibe como parámetro 1 matriz de 1 fila, y devuelve un vector equivalente a la fila de dicha matriz Producto\_matrices: recibe como parámetros dos matrices, en orden, m1 y m2, y devuelve otra matriz como el producto m1\*m2

Reemplazar\_valores\_vectores: recibe como parámetros dos vectores, en orden, v1 y v2, copia los valores de v2 en v1

Suma\_valores\_vectores: recibe como parámetros dos vectores, en orden, v1 y v2, suma los valores de v2 a v1

Aplicar funcion\_vector: recibe como parámetros, en orden, un vector v1 y una función f, y pasa el valor de cada elemento x de v1 a f(x)

```
sigmoid( x ):
    devolver 1 / (1 + e<sup>-x</sup>)

propagacion_hacia_delante( vector_valores_entrada, red, funcion_capas_ocultas, funcion_capa_final ):
    Reemplazar_valores_vectores( red.al[0], vector_valores_entrada)
    índice i desde 0 hasta Red.numero_capas-1 (incluídos):
    Reemplazar_valores_vectores( red.zl[i], Matriz_1_fila_a_vector( Producto_matrices( Vector_a_matriz_1_fila( red.al[i] ), red.pesos[i] )))
    Suma_valores_vectores( red.zl[i], red.bias[i] )
    Reemplazar_valores_vectores( red.al[i], red.zl[i] )
    Si i < Red.numero_capas-2:
    Aplicar_funcion_vector( red.al[i], funcion_capas ocultas )
    Sino:
    Aplicar_funcion_vector( red.al[i], funcion_capa final )
```

#### Ejemplo de ejecución:

```
Para cada ejemplo en conjunto_entrenamiento: propagacion_hacia_delante( ejemplo.entrada, Red, sigmoid, sigmoid ) #el primero por ejemplo sería el [ 1, 0, 0, 0 ] visto antes
```

Acción que permite a la red aprender de los errores que comete al realizar predicciones, modificando los valores de los pesos y biases

Existen algunas diferencias entre algunas redes y otras (a veces no se aplica la función de activación en la capa de salida de la red y las derivadas parciales en dicha capa no la incluyen, en otros casos se calcula el coste como un sumatorio de todos los errores de todos los ejemplos, mientras que en otros casos se calcula el vector gradiente separado para cada uno y luego se suma una media aritmética de dichos errores, en otros casos, se calculan las derivadas parciales del coste con respecto al valor esperado en vez de con respecto el valor predicho, etc.), pero en esencia, comparten las mismas ideas de cómo se calcula el vector gradiente

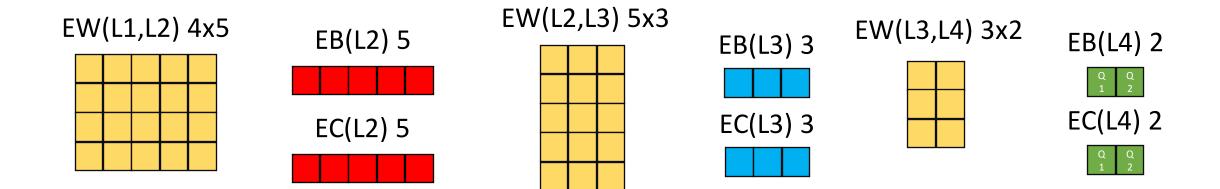
Aparte, existen diferentes funciones de pérdida para calcular el error cometido por un nodo en la capa de salida, acompañadas de una función de coste para evaluar el error total de la red (media aritmética de todas las funciones de pérdida). Nosotros utilizaremos la entropía cruzada como función de coste y de pérdida, siendo necesario que la función de la capa de activación de valores entre 0 y 1, como sigmoide.

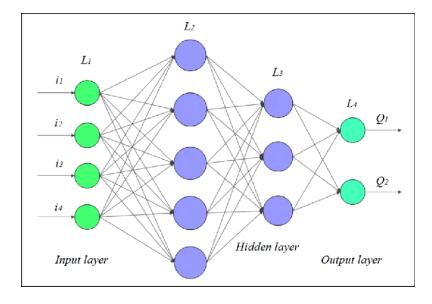
En esta diapositiva, se siguen los pasos de este vídeo: <a href="https://www.youtube.com/watch?v=tleHLnjs5U8&t=3s">https://prvnk10.medium.com/sigmoid-neuron-and-cross-entropy-962e7ad090d1</a>

Básicamente, la idea es primero calcular un vector que incluye todos los valores que servirán para ajustar los valores de los pesos y los biases de la red, llamado vector gradiente, uno para cada uno de los ejemplos del conjunto de entrenamiento. Después, se sumarán los valores en las mismas posiciones de los vectores gradiente calculados para todos los ejemplos del conjunto de entrenamiento.

Finalmente, cada valor se dividirá entre el número de ejemplos del conjunto de entrenamiento, y se multiplicará por un hiperparámetro del entrenamiento llamado tasa de aprendizaje, el cual suele ser un número decimal entre 1 y valores cercanos al 0, que permite controlar la velocidad a la que nos aproximamos a un punto dentro de la función de error

# Representación v. gradiente matricial:





**EB**: vector donde se guardan los valores de error del bias de la neurona en la capa actual. Sus valores se calcularán al realizar 1 vez la propagación hacia detrás

**EC:** vector donde se guardan los valores de error de dicha capa con respecto a la función de coste, calculado en la iteración anterior. Sus valores se calcularán al realizar 1 vez la propagación hacia detrás

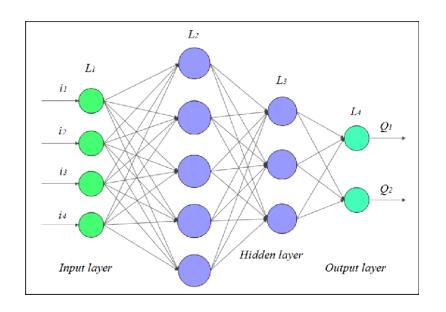
**EW**: matriz con los valores de los errores de los pesos de las aristas. Sus valores se calcularán al realizar 1 vez la propagación hacia detrás

Nota: no se almacena ni el error del bias ni el error de la capa, para la capa de entrada de la red

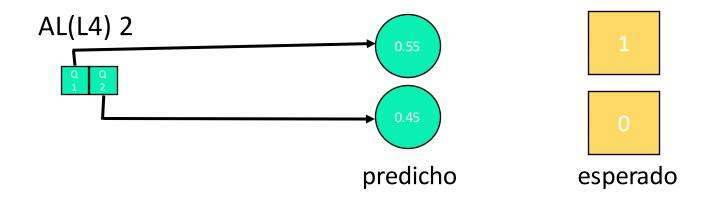
#### Representación v. gradiente como listas

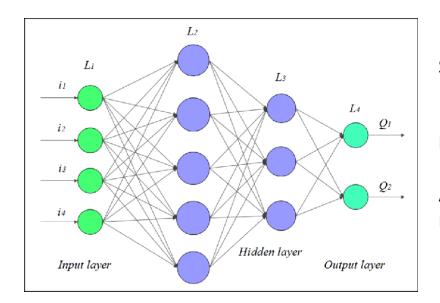
```
VGrad.err bias = [
   vector 5 elementos todos sus valores iguales a 0 ],
   vector 3 elementos todos sus valores iguales a 0],
   vector 2 elementos todos sus valores iguales a 0 ]
VGrad.err_capa = [
   vector 5 elementos todos sus valores iguales a 0],
   vector 3 elementos todos sus valores iguales a 0 ]
VGrad.err pesos = [
   matriz 4x5 elementos todos sus valores iguales a 0 ],
   matriz 5x3 elementos todos sus valores iguales a 0],
   matriz 3x2 elementos todos sus valores iguales a 0 ]
```

Nota: no se almacena el error del bias para la capa de entrada



propagacion\_hacia\_delante([1, 0, 0, 0], Red, sigmoid, sigmoid)





Empezamos calculando el vector gradiente para un ejemplo del conjunto de entrenamiento. Supongamos que sus valores son [ 1, 0, 0, 0 ].

Lo primero que hay que hacer es realizar la propagación hacia delante, para que los valores de los vectores al y zl de la red tengan los valores de la acción de predicción de la red

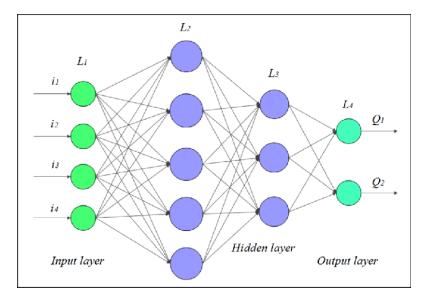
Ahora supongamos que en la capa de salida esperábamos obtener los valores [1, 0], pero nuestra red, sin ajustar, predice los valores [0.55, 0.45]

$$\begin{bmatrix} \frac{0.55}{1} - \frac{1}{1} & \frac{0.45}{1} - \frac{0}{1} \\ \frac{(1 - 0.55)}{(1 - 0.55)} & \frac{(1 - 0.45)}{(1 - 0.45)} & \frac{0.45}{1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1.818, 1.818 \end{bmatrix}$$

$$EC(L4) 2$$

$$[-1.818, 1.818] \longrightarrow {\tiny \begin{array}{c} 0 & 0 \\ 1 & 2 \\ \end{array}}$$

FC = sum(
$$-[(1-y)\log(1-\hat{y}) + y\log\hat{y})]$$
) / neuronas\_capa\_salida  
=  $-[((1-1)*\log(1-0.55) + 1*\log(0.55)) + ((1-0)*\log(1-0.55) + 0*\log(0.55))]/2 = 0,303212398$ 

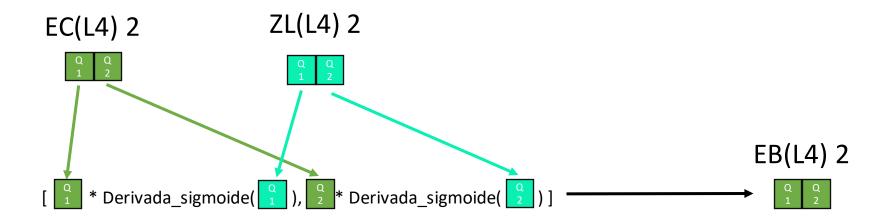


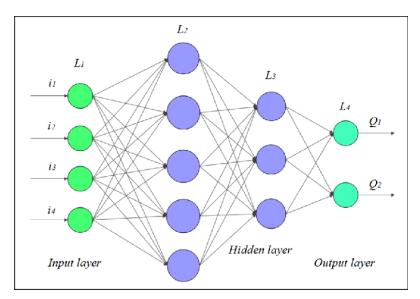
Primero, permaneciendo en la capa de salida, calcularemos el error de los biases de sus neuronas. EL primer paso es guardar en VGrad.err capa en la capa de salida los valores de esta derivada de la función de pérdida

La fórmula de la función de pérdida, recordando que escogimos la entropía cruzada, para un solo ejemplo la del coste,  $-[(1-y)\log(1-\hat{y})+y\log\hat{y})]$ 

La derivada de dicha fórmula con respecto a y\_pred queda:  $\frac{y-y}{(1-\hat{y})\hat{y}}$ 

La función de coste (FC) es sumatorio las funciones de pérdida entre el número neuronas 18

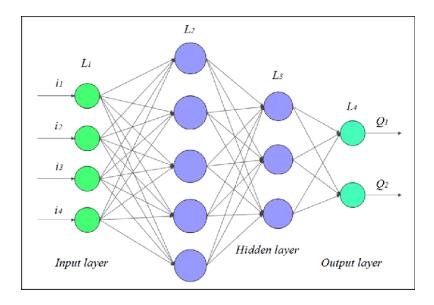




Seguimos en la capa de salida, ahora calcularemos por fin el valor del bias para las neuronas de la capa de salida. Para ello, multiplicaremos cada valor de vector VGrad.err\_capa en la capa de salida, calculado anteriormente, por el valor de cada elemento del vector Red.zl en la capa de salida, aplicado a la derivada de la función de activación de esta capa. Pasaremos estos valores al vector VGrad.err bias de la capa de salida

Podemos expresar la derivada de la función sigmoide como esta función:

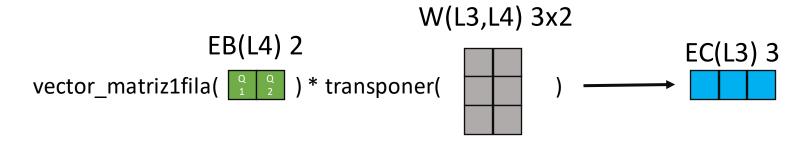
Derivada\_sigmoide(x):
return sigmoide(x) \* (1 - sigmoide(x))

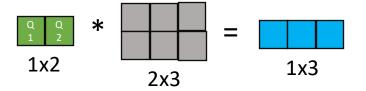


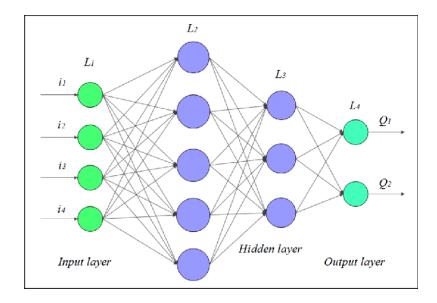
Ahora calcularemos el error de los pesos de las aristas de la capa actual. Para ello, simplemente, calcularemos este producto de matrices. EL resultado lo pasaremos a VGrad.err\_pesos en la capa anterior a la capa de salida

La función vector\_matriz1fila convierte un vector en una matriz de 1 fila igual al vector

Aparte, la función transponer, transpone la matriz pasada como argumento



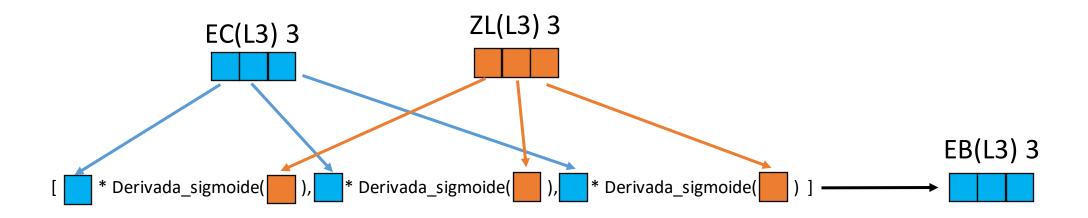


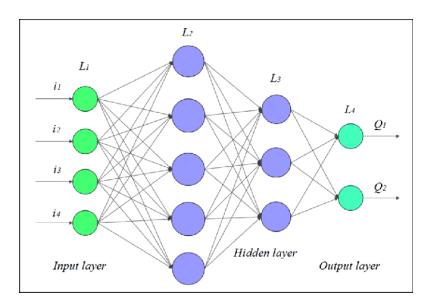


Para terminar en la capa de salida, calcularemos el vector de errores para la capa anterior. EL resultado lo pasaremos a VGrad.err\_capa en capa anterior a la capa de salida, convirtiendo la matriz de una fila obtenida como un vector

La función vector\_matriz1fila convierte un vector en una matriz de 1 fila igual al vector

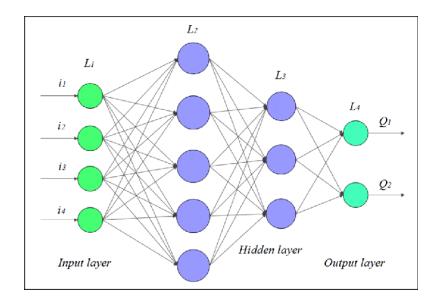
Aparte, la función transponer, transpone la matriz pasada como argumento





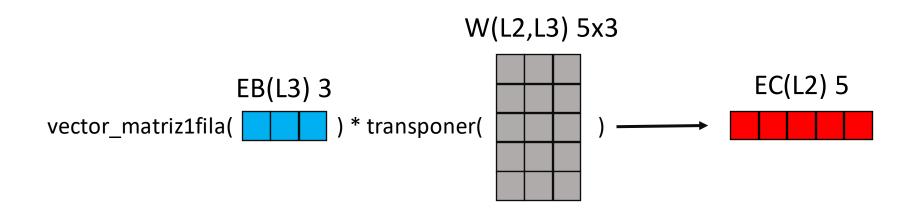
Repetimos los 3 mismos pasos realizados anteriormente, pero ahora con la capa anterior, y ahora sí, multiplicando cada elemento del vector de error de la capa por la derivada parcial de cada valor de salida de la capa que ahora es la actual, sin aplicar la función de activación

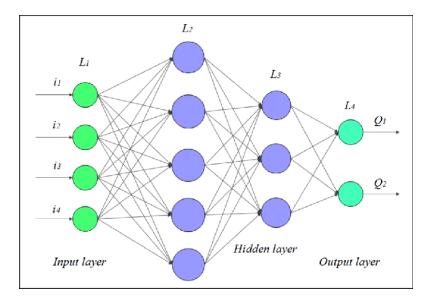
Empezamos calculando los errores del bias para la que ahora es la capa actual



Repetimos los 3 mismos pasos realizados anteriormente, pero ahora con la capa anterior

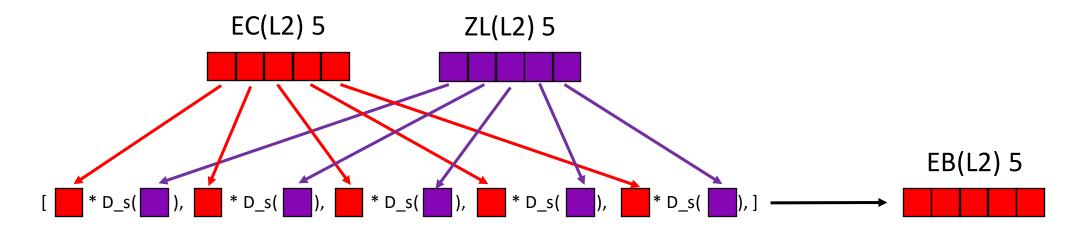
Después calculamos los errores de los pesos para la que ahora es la capa actual

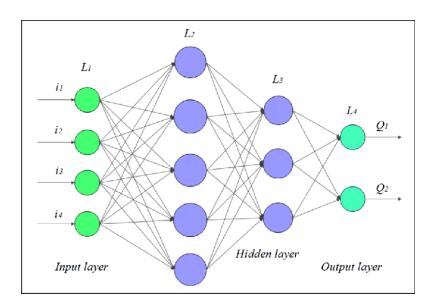




Repetimos los 3 mismos pasos realizados anteriormente, pero ahora con la capa anterior

Para terminar, calculamos el error de la capa anterior con respecto a la que ahora es la capa actual

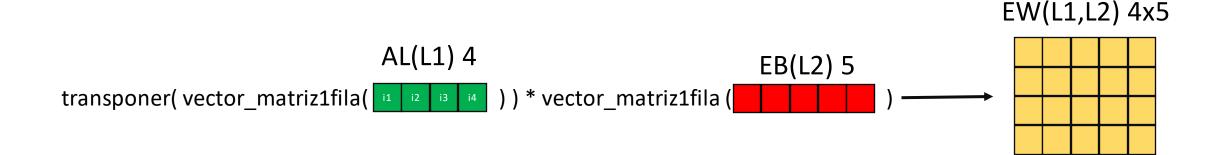


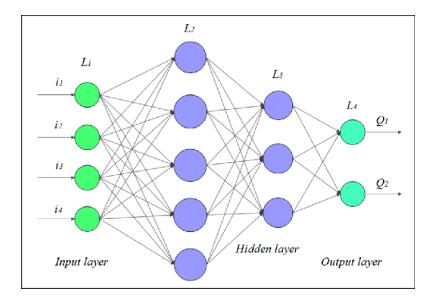


Al retroceder ahora a la capa anterior, en nuestro caso L2, podemos darnos cuenta de que la capa anterior es L1. Recordemos que la capa de entrada no se considera como una capa de neuronas, y es por ello que no hay que calcular ningún error para la capa anterior.

Por ello, solamente nos queda calcular los errores del bias y de los pesos para la capa L2

Aquí calculamos el error del bias. Acortamos Derivada\_sigmoide por D\_s





Al retroceder ahora a la capa anterior, en nuestro caso L2, podemos darnos cuenta de que la capa anterior es L1. Recordemos que la capa de entrada no se considera como una capa de neuronas, y es por ello que no hay que calcular ningún error para la capa anterior.

Por ello, solamente nos queda calcular los errores del bias y de los pesos para la capa L2

Aquí calculamos el error de los pesos

#### Funciones:

Constructor\_vgrad: devuelve una lista con la estructura de la diapositiva 16, pero sin VGrad.error\_capa. Recibe una red como parámetro. Vector\_mat1fila: recibe como parámetro 1 vector, y devuelve 1 matriz de una fila y tantas columnas como nº elementos del vector Mat1fila\_vector: recibe como parámetro 1 matriz de 1 fila, y devuelve un vector equivalente a la fila de dicha matriz Producto\_matrices: recibe como parámetros dos matrices, en orden, m1 y m2, y devuelve otra matriz como el producto m1\*m2 Transponer\_matriz: toma una matriz m como argumento y devuelve su transpuesta, es decir, m<sup>T</sup>
Reemplazar\_valores\_vectores: recibe como parámetros dos vectores, en orden, v1 y v2, copia los valores de v2 en v1
Reemplazar\_valores\_matrices: recibe como parámetros dos matrices, en orden, m1 y m2, copia los valores de m2 en m1

Se propone una implementación sin necesidad de guardar un vector de error por cada capa

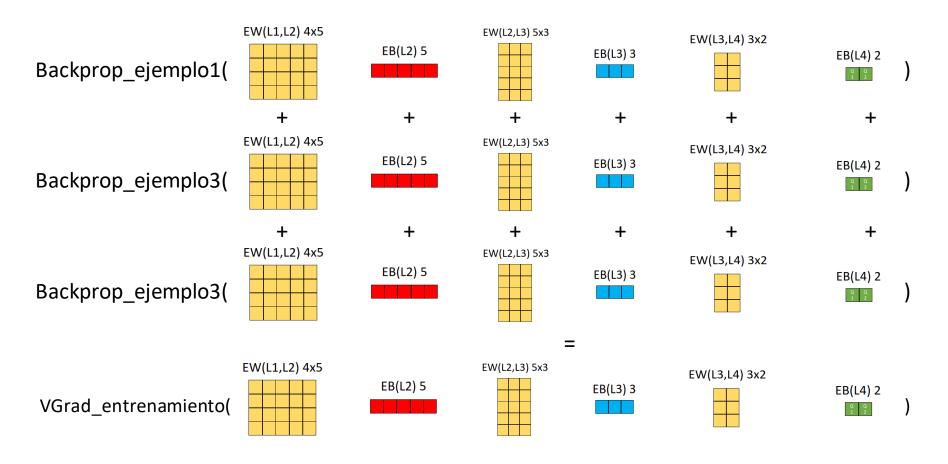
```
sigmoid(x):
                                              derivative sigmoid( x ):
     devolver 1/(1+e^{-x})
                                                 devolver sigmoid(x) * (1 - sigmoid(x))
vector gradiente( vector vals salida esp, red, d funcion capas ocultas, d funcion capa salida ):
  vgrad = Constructor vgrad(Red)
  err_sal = [ Floss( vector_vals_salida_esp[i], red.al[red.numero_capas-1][i] ) para Índice i desde 0 hasta tamaño( red.al[red.numero_capas-1] ) ]
  bcs = [d funcion capa salida(red.zl[red.numero capas-2][i])*err sal[i] para Índice i desde 0 hasta tamaño( err sal ) ]
  Índice i desde Red.numero capas-2 hasta 0 (incluídos):
    Reemplazar valores vectores (vgrad.err bias[i], bcs)
    err pesos = Producto matrices( Transponer matriz( Vector mat1fila( red.al[i] ) ), Vector mat1fila( bcs ) )
    Reemplazar_valores_matrices( vgrad.err_pesos[i], err_pesos)
    Si i > 0:
      err capa ant = Mat1fila vector( Producto matrices( Vector mat1fila( bcs ), Transponer matriz( red.pesos[i] ) ) )
      bcs = [d funcion capas ocultas(red.zl[i-1][j])*err capa ant[j] para Índice j desde 0 hasta tamaño(err capa ant)]
  Devolver vgrad
```

#### Ejemplo de ejecución (primero se debe hacer la propagación hacia delante):

```
Para cada ejemplo en conjunto_entrenamiento:

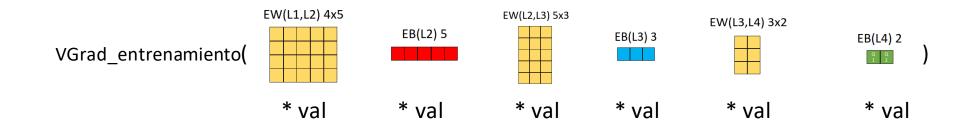
propagacion_hacia_delante( ejemplo.entrada, Red, sigmoid, sigmoid) #el primero por ejemplo sería el [1, 0, 0, 0] visto antes

vgrad_calc = vector_gradiente( ejemplo.salida, Red, derivative_sigmoid, derivative_sigmoid)
```

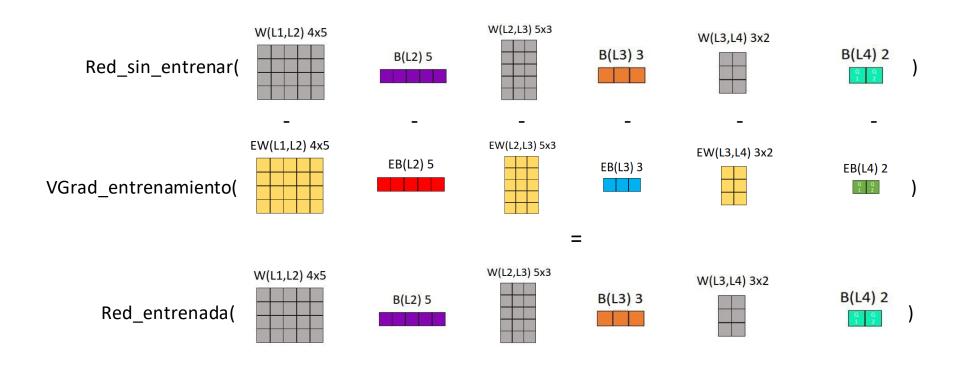


Para pasar el vector gradiente a la red para que esta aprenda, teóricamente, primero se van calculando los vectores gradiente para todos los ejemplos del conjunto de entrenamiento con el que queremos entrenar nuestra red, y se suman sus valores. Supongamos que tenemos 3 ejemplos, para cada uno calculamos su vector gradiente, luego sumamos sus valores (para sus matrices de pesos y vectores de biases) y obtenemos un vector gradiente resultado

val = tasa\_aprendizaje / numero\_ejemplos\_entrenamiento = "número decimal entre 1 y cercano a 0" / 3



Después hay que multiplicar a cada elemento de cada matriz de pesos y vector de biases, un valor val, el cual es igual a dividir la tasa de aprendizaje escogida entre el número de ejemplos del conjunto de entrenamiento con los cuales se calculó un vector gradiente



Finalmente, restamos a la red sin entrenar, para sus correspondientes matrices de pesos y vectores de biases, las matrices de error de pesos y vectores de error de biases del vector gradiente del entrenamiento ajustado del paso anterior. Con ello, ahora nuestra red se habrá ajustado para encajar en nuestro conjunto de datos.

Para que la red aprenda de manera efectiva, todo lo visto hasta ahora se repite cientos, miles o más veces.

#### Funciones:

Constructor\_vgrad: devuelve una lista con la estructura de la diapositiva 16, pero sin VGrad.error\_capa. Recibe una red como parámetro.

**Suma\_valores\_vectores:** recibe como parámetros dos vectores, en orden, v1 y v2, suma los valores de v2 a v1

Suma valores matrices: recibe como parámetros dos matrices, en orden, m1 y m2, suma los valores de m2 a m1

**Resta\_valores\_vectores:** recibe como parámetros dos vectores, en orden, v1 y v2, resta los valores de v2 a v1

**Resta\_valores\_matrices:** recibe como parámetros dos matrices, en orden, m1 y m2, resta los valores de m2 a m1

Multiplicar\_a\_vector: recibe como parámetros, en orden, un vector v y un número n, y pasa el valor de cada elemento x de v a n\*x

Multiplicar\_a\_matriz: recibe como parámetros, en orden, una matriz m y un número n, y pasa el valor de cada elemento x de m a n\*x

```
propagacion_hacia_detrás_softmax( conjunto_entrenamiento, red, fun_act, d_fun_act ):
    vgrad = Constructor_vgrad( Red )
    para cada ejemplo en conjunto_entrenamiento:
        propagacion_hacia_delante( ejemplo.valores_entrada, Red, fun_act, softmax )
        vcalc = vector_gradiente_softmax( ejemplo.valores_salida, Red, d_fun_act )
        Para índice i desde 0 hasta tamaño( vgrad.err_bias ): Suma_valores_vectores( vgrad.err_bias[i], vcalc.err_bias[i] )
        Para índice i desde 0 hasta tamaño( vgrad.err_pesos ): Suma_valores_matrices( vgrad.err_pesos[i], vcalc.err_pesos[i] )
        Para índice i desde 0 hasta tamaño( vgrad.err_bias ):
        Multiplicar_a_vector( vgrad.err_bias[i], tasapren/tamaño(conjunto_entrenamiento) )
        Resta_valores_vectores( red.bias[i], vgrad.err_pesos ):
        Multiplicar_a_matriz( vgrad.err_pesos[i], tasapren/tamaño(conjunto_entrenamiento) )
        Resta_valores_matrices( red.pesos[i], vgrad.err_pesos[i] )
```

Ejemplo de ejecución: propagacion\_hacia\_detrás\_softmax( conjunto\_entrenamiento, Red, sigmoid, derivative\_sigmoid )

En teoría, como se puede ver, se calcula vgrad en función de todos los ejemplos del conjunto de entrenamiento, pero en la práctica, este conjunto de entrenamiento se divide en secciones o baterías (batches en inglés), y se llama a esta función tantas veces como el número de baterías en las que se haya dividido dicho conjunto

Ojo también, aquí hemos considerado utilizar todas las funciones sigmoide, no tiene por qué, por ejemplo, en la capa de salida, se podría haber escogido utilizar Softmax.

Cada vez que se hacen todas las operaciones de propagación hacia detrás, hasta ajustar una vez la red al restar el vector gradiente calculado, se está realizando una época de entrenamiento. Se suelen hacer cientos, miles o más épocas para un mismo conjunto de datos, para que la red aprenda mejor, como se mencionó anteriormente.

Como mencionamos, en la práctica no se calcula un vector gradiente de todo el conjunto de entrenamiento, sino que este conjunto se separa en otros subconjuntos llamados baterías (batches en inglés), en cada uno de ellos se ordenan sus elementos de manera aleatoria, y para cada uno de ellos se ejecuta la propagación hacia detrás. Este proceso además se suele repetir varias épocas, hasta conseguir entrenar el modelo para que tenga un mejor rendimiento

Para hacer una aproximación a cómo implementar una red neuronal artificial, se ha mostrado que la tasa de aprendizaje es un hiperparámetro de la red fijo que se escoje para todo el entrenamiento. Sin embargo, esto no es práctico, y se suelen utilizar algunos algoritmos, como ADAM, para ir variando esta tasa de aprendizaje en función de la función de coste y otros criterios, el cual permite llegar a un mínimo local de la función de coste antes (es decir, que permite aprender bien hasta un cierto punto sin desaprender) y además acelerar el proceso de llegada a dicho punto

Aparte, se pueden utilizar diferentes funciones de activación, y sobre todo, para la capa de salida con respecto al resto de capas ocultas, como por ejemplo Softmax, la cual utilizando otra función de coste y de pérdida llamada entropía cruzada, es posible entrenar a las redes neuronales artificiales para resolver mejor problemas de clasificación que una red neuronal como la vista en estas diapositivas (fución de pérdida del error cuadrático y todas las funciones de activación sigmoide)