Tema 2: Fundamentos de las redes neuronales profundas

Aprendizaje
Profundo

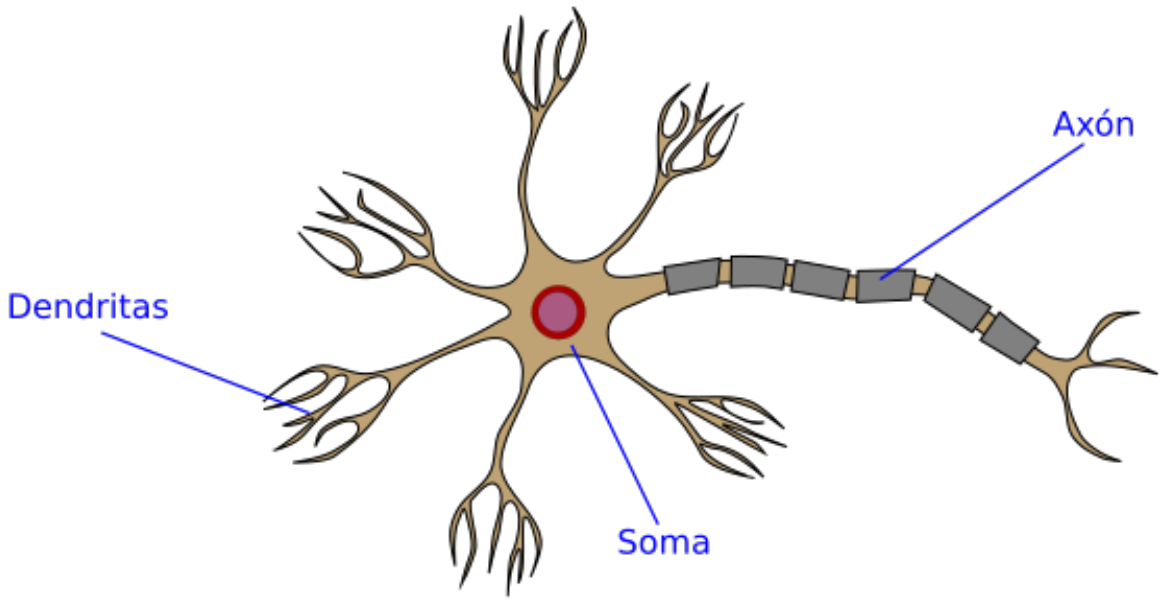
Grado en Ingeniería y Ciencia de datos (Universidad de Oviedo)

Pablo González, Pablo Pérez
{gonzalezgpablo, pabloperez}@uniovi.es
Centro de Inteligencia Artificial, Gijón

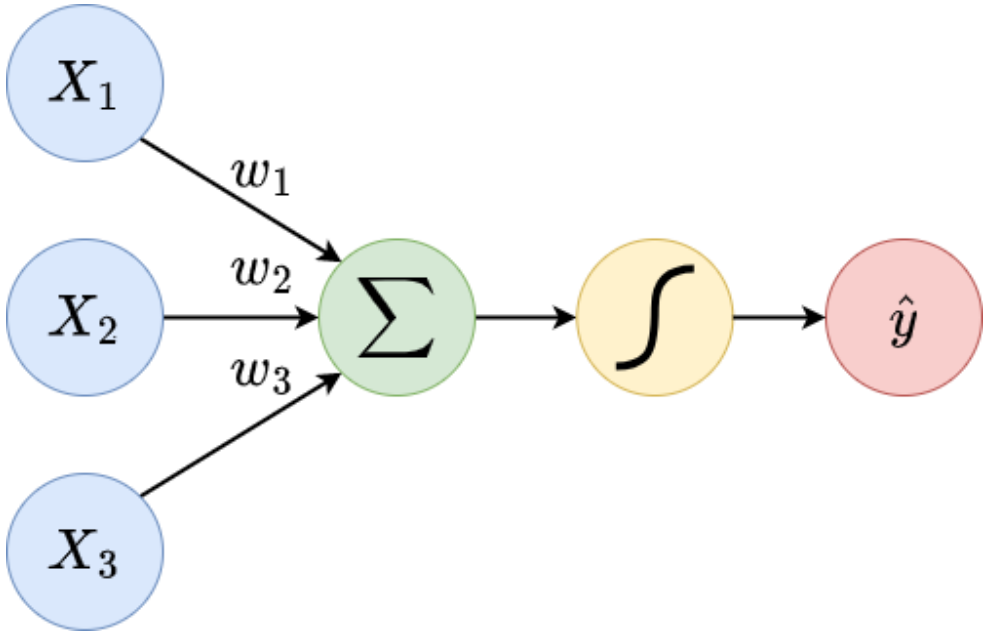
El perceptrón

El perceptrón: la pieza clave de una red neuronal

- El perceptrón es la pieza clave de cualquier red neuronal y por supuesto del aprendizaje profundo.
- Fue introducido en 1957 por Frank Rosenblatt.
- Es un modelo motivado por la biología



El perceptrón: la pieza clave de una red neuronal

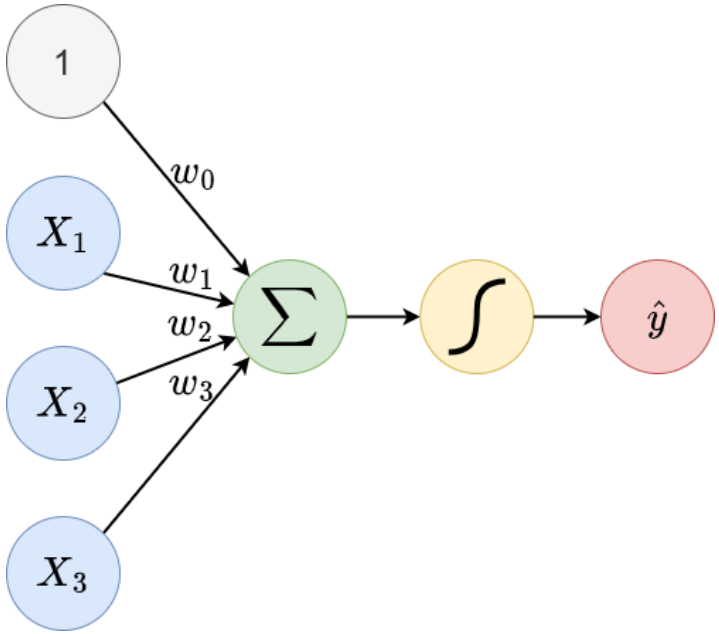


Salida de una perceptrón

Para evaluar la salida $\hat{y}$ de un perceptrón, multiplicamos las entradas X por los pesos w y aplicamos la función de activación g.

$$\hat{y} = g\left(\sum_{i=1}^{n} x_i w_i\right)$$

El perceptrón: la pieza clave de una red neuronal

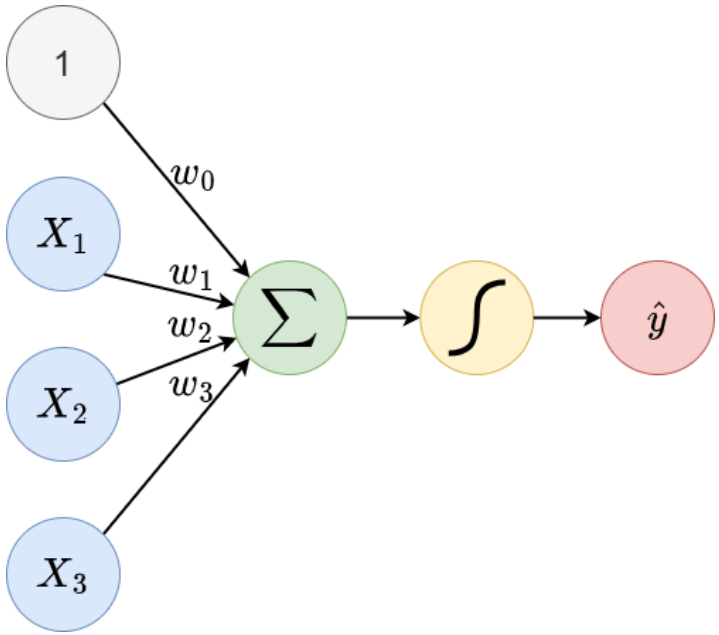


Bias

Un perceptrón incluye además un peso extra w_0, correspondiente al **bias**, que permite ajustar el umbral de activación del perceptrón.

$$\hat{y} = g\left(w_0 + \sum_{i=1}^{n} x_i w_i\right)$$

El perceptrón: la pieza clave de una red neuronal



Vista con operaciones matriciales

La evaluación de un perceptrón puede reescribirse utilizando vectores en lugar del sumatorio.

$$\hat{y} = g(w_0 + X^T W)$$

donde W es el vector con pesos y X es un vector con las entradas.

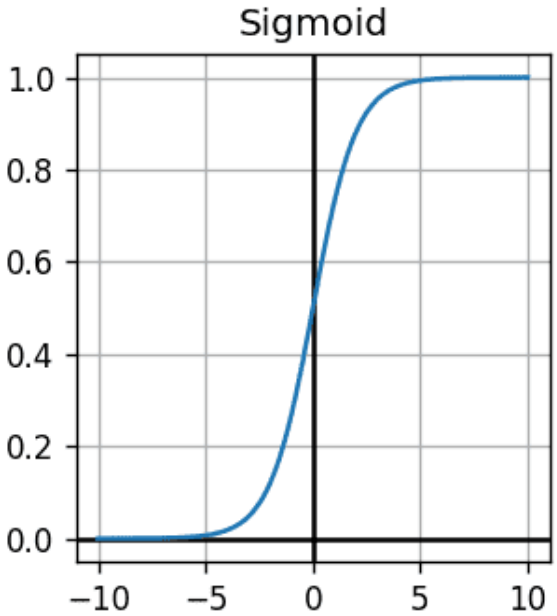
El perceptrón: Función de activación

La función de activación g juega un papel clave en el perceptrón

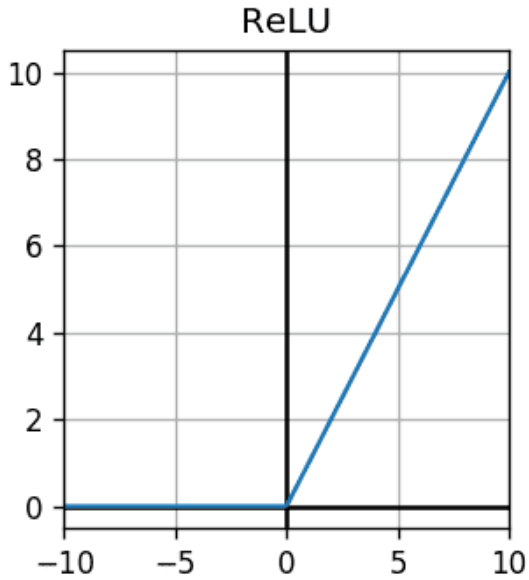
- La función de activación es una función matemática que se utiliza en un perceptrón para determinar si una neurona debe activarse o no.
- La función de activación toma la suma ponderada de las entradas y las pasa a través de una función **no lineal** para producir la salida de la neurona.
- La función de activación introduce **no linealidad** en el modelo, lo que permite al perceptrón aprender **patrones más complejos** en los datos de entrada.
- Hay varias funciones de activación comunes utilizadas en los perceptrones, como la función escalón, la función sigmoide y la función ReLU.

El perceptrón: Función de activación

Algunos ejemplos de funciones de activación



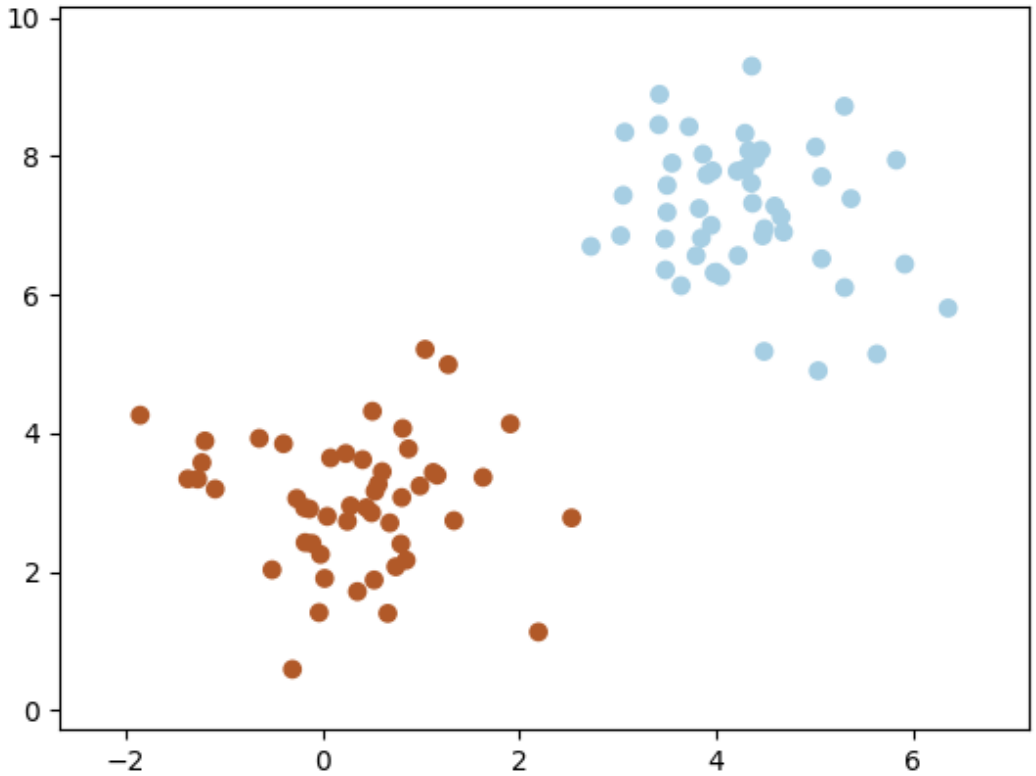
$$g(z) = \frac{1}{1+e^{-z}}$$



$$g(z) = max(0, z)$$

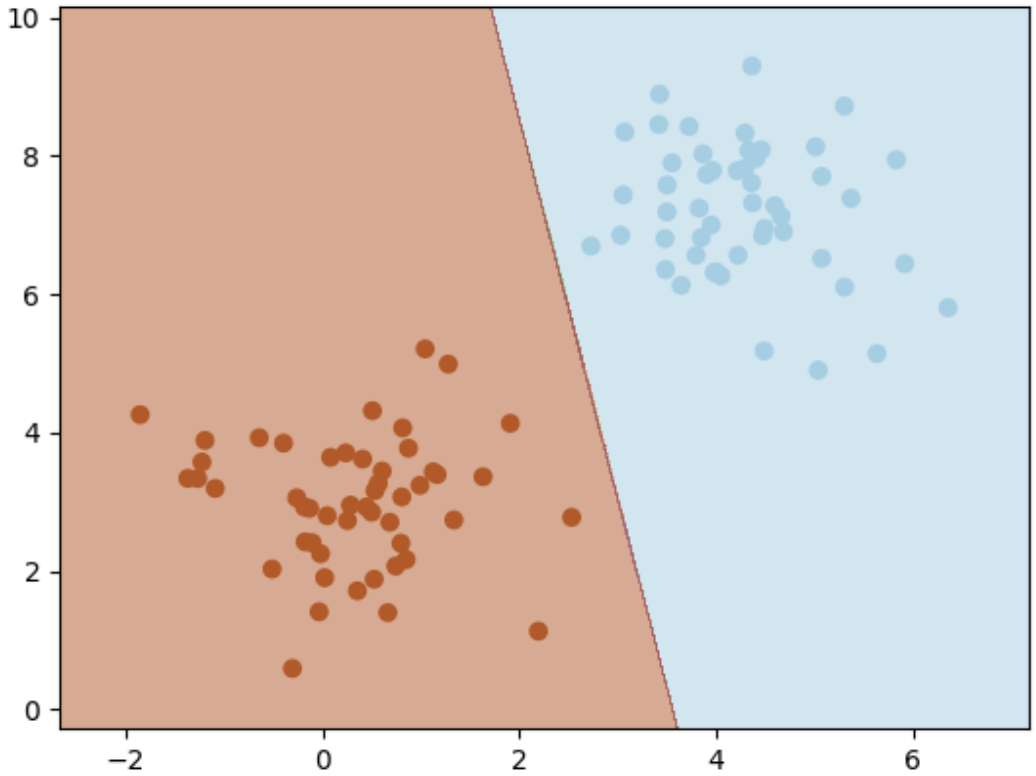
¿Cuál es la utilidad de la función de activación?

Qué sucede si no incluimos una función de activación. El perceptrón sería capaz de resolver problemas **linealmente separables**.



¿Cuál es la utilidad de la función de activación?

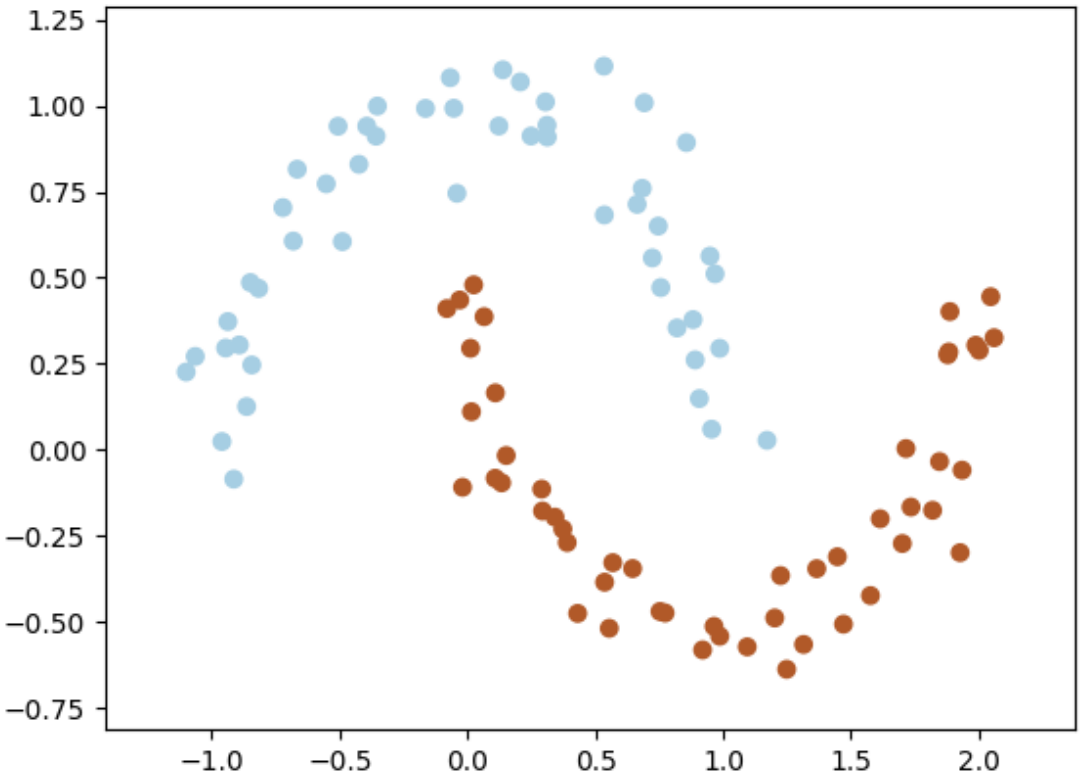
Qué sucede si no incluimos una función de activación. El perceptrón sería capaz de resolver problemas **linealmente separables**.



$$-1.15x_1 - 0.21x_2 + 4.1 = 0$$

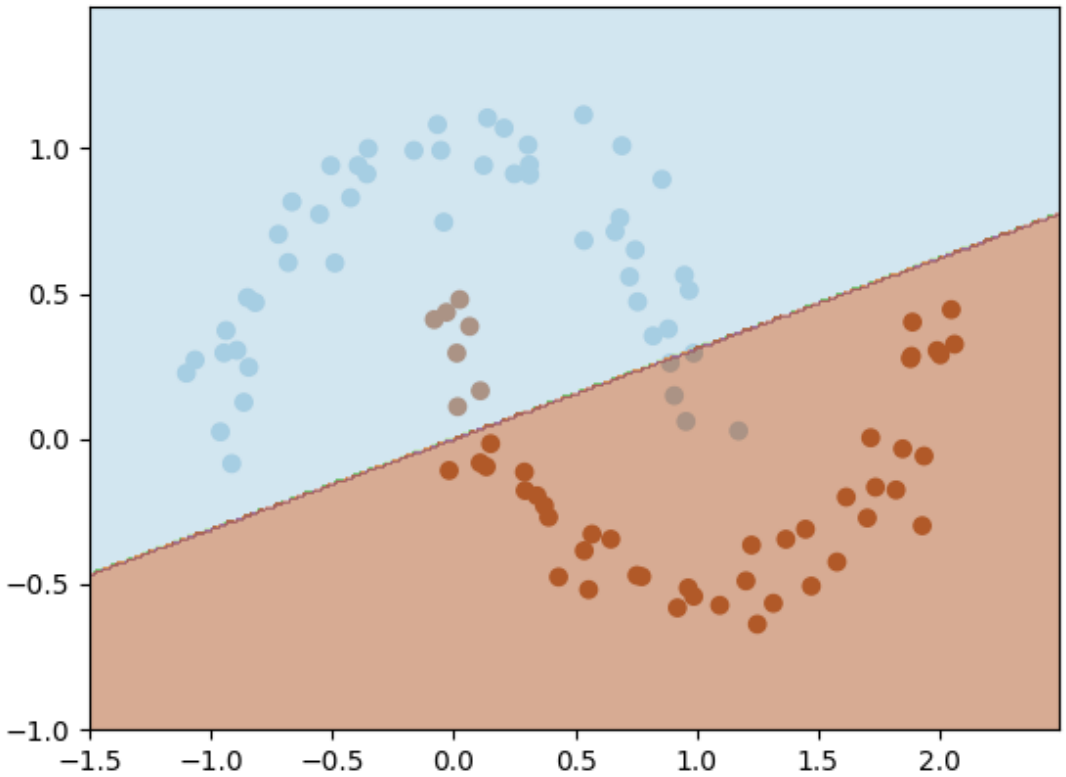
¿Cuál es la utilidad de la función de activación?

¿Qué sucede si el problema **no es linearmente separable**?



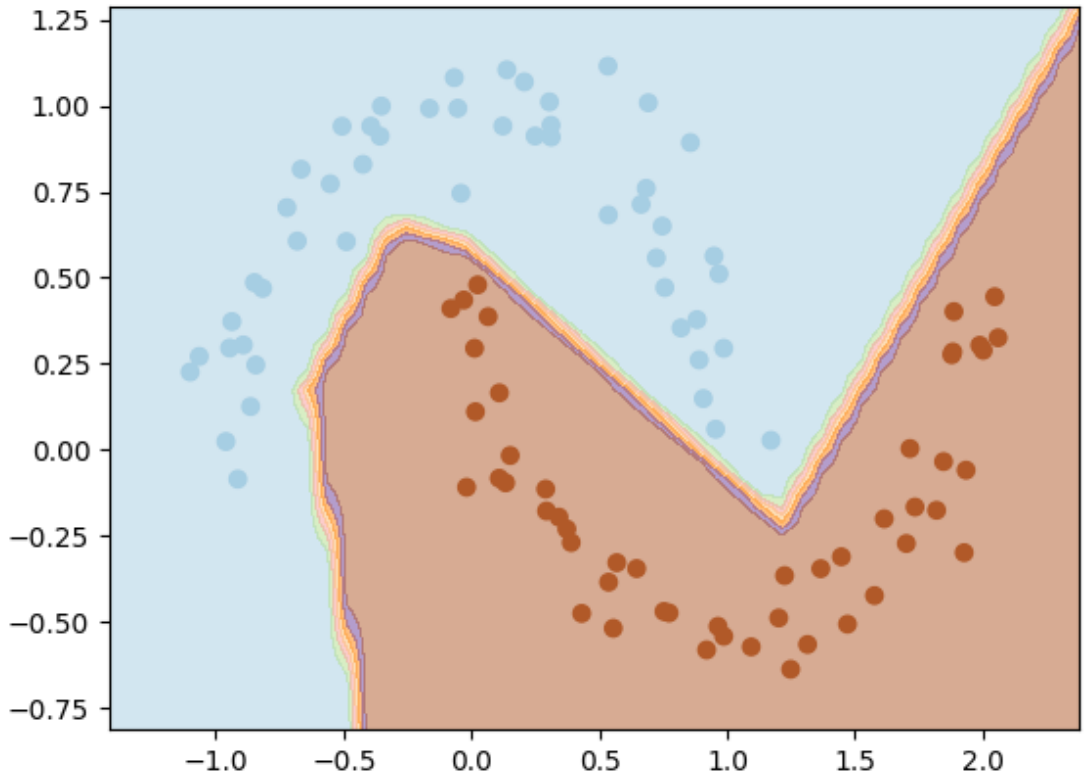
¿Cuál es la utilidad de la función de activación?

No es posible encontrar un plano que sea capaz de separar las dos clases de manera adecuada.



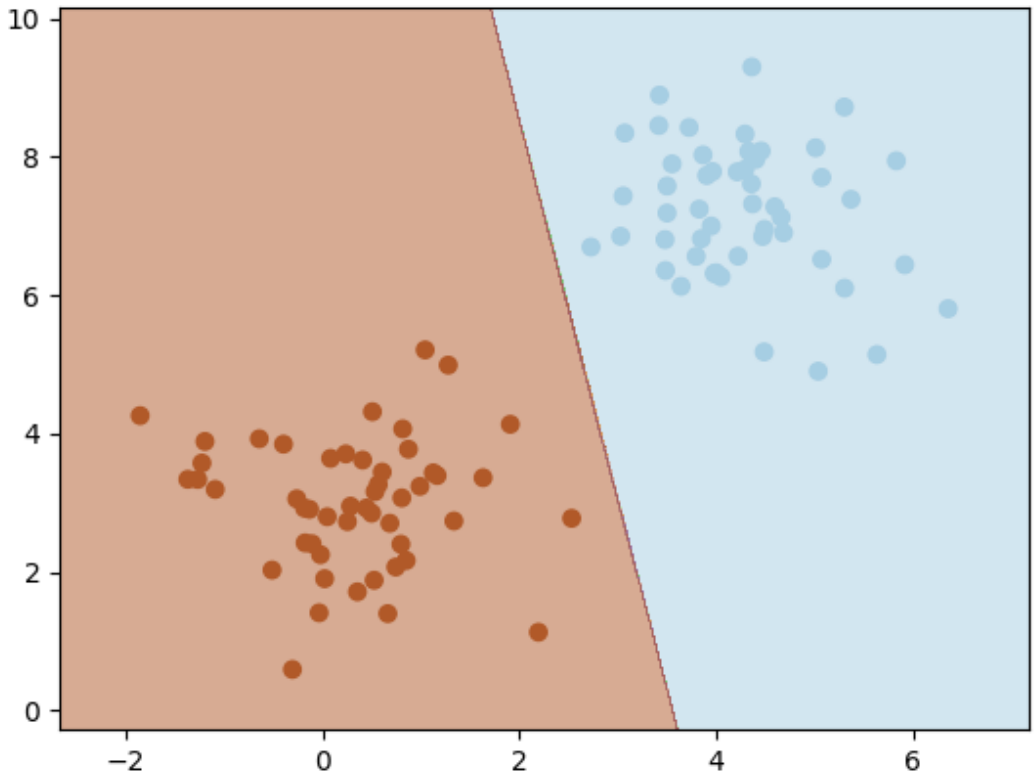
¿Cuál es la utilidad de la función de activación?

Gracias a las **funciones de activación no lineales** y la unión de **varias capas de perceptrones** es posible aproximar funciones de este tipo.



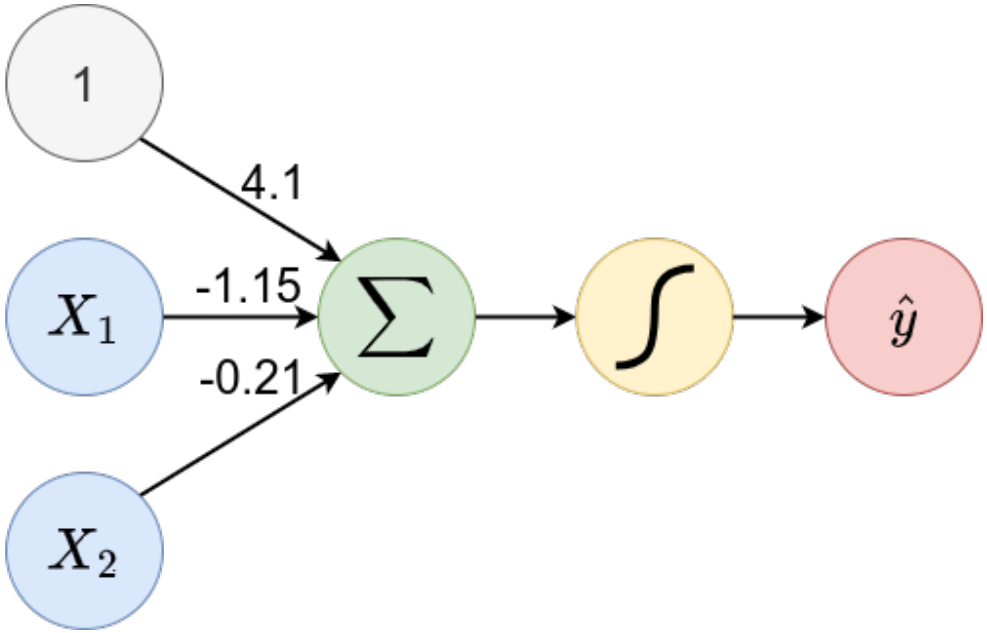
Ejemplo con un perceptrón

Dado el ejemplo anterior, con los datos separables, el modelo obtenido sería el siguiente: $\hat{y} = g(-1.15x_1 - 0.21x_2 + 4.1)$



Ejemplo con un perceptrón

El perceptrón tendría los siguientes pesos:



$$w_0 = 4.1 \text{ y } W = \begin{bmatrix} -1.15 \\ -0.21 \end{bmatrix}$$

$$\hat{y} = g(z) = g(w_0 + X^T W) = g\left(4.1 + \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} -1.15 \\ -0.21 \end{bmatrix}\right)$$

Ejemplo con un perceptrón

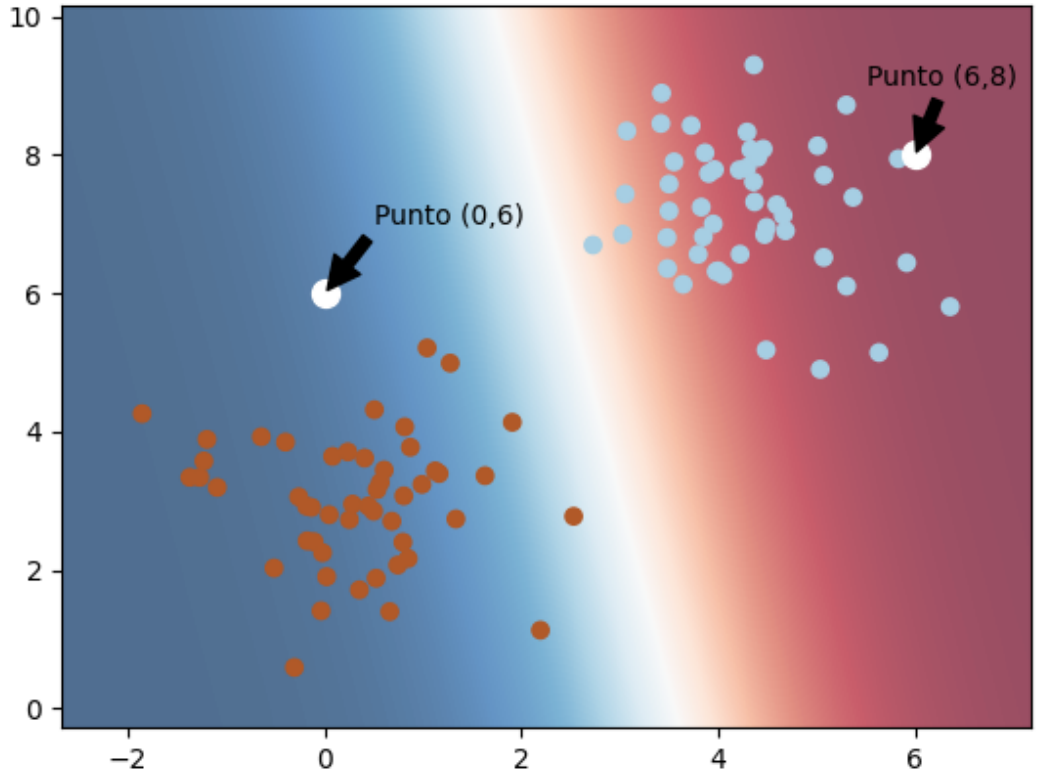
Asumiendo que g es la función sigmoide y que el punto que queremos evaluar es el (0,6):

$$\hat{y} = g\left(4.1 + \begin{bmatrix}0\\6\end{bmatrix}^T \begin{bmatrix}-1.15\\-0.21\end{bmatrix}\right) = g(4.1 + 6 * (-0.21)) = g(2.84) = 0.94$$

Con la función **sigmoide**, y cuando esta está en la capa de salida de la red, podemos convertir a una probabilidad la salida del perceptrón. Si $z < 0$, entonces $\hat{y} < 0.5$; si $z > 0$, entonces $\hat{y} > 0.5$

Ejemplo con un perceptrón

Valores de las probabilidades para todo el espacio de entrada:



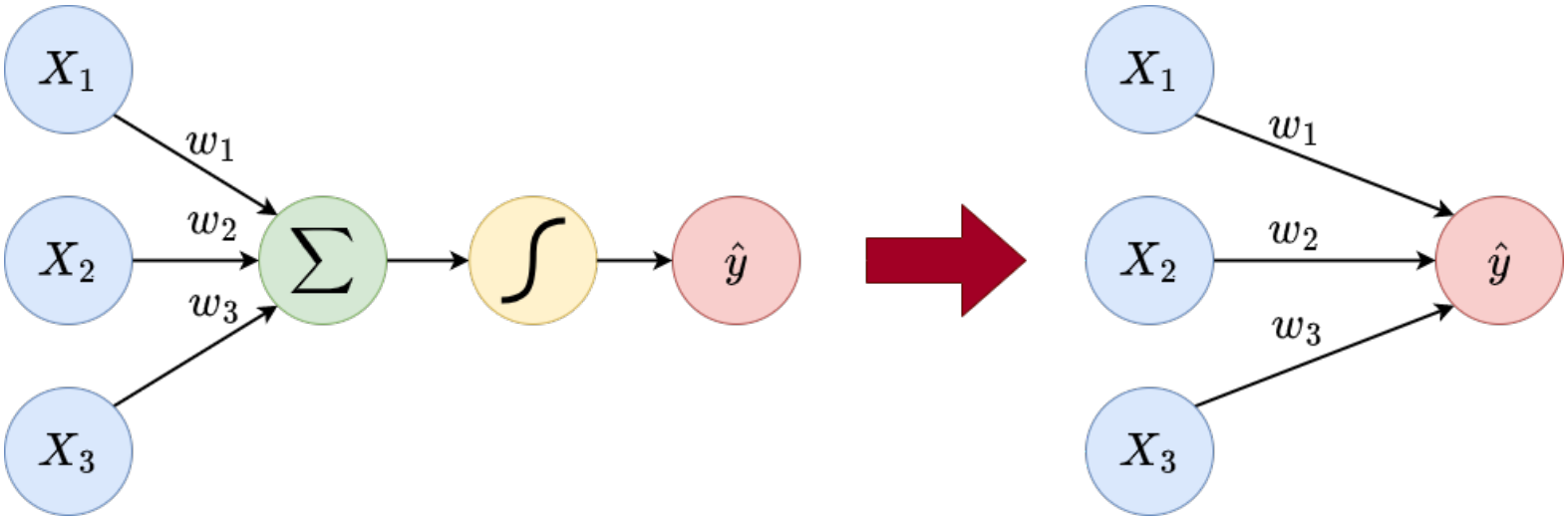
- Punto (0,6), $\hat{y} = 0.94$
- Punto (6,8), $\hat{y} = 0.01$ (realiza tú mismo el cálculo)

Redes totalmente conectadas

Uniendo varios perceptrones

Un solo perceptrón **está muy limitado** a funciones simples y lineales. La verdadera potencia de las redes neuronales viene al **unir varios perceptrones** en una misma red.

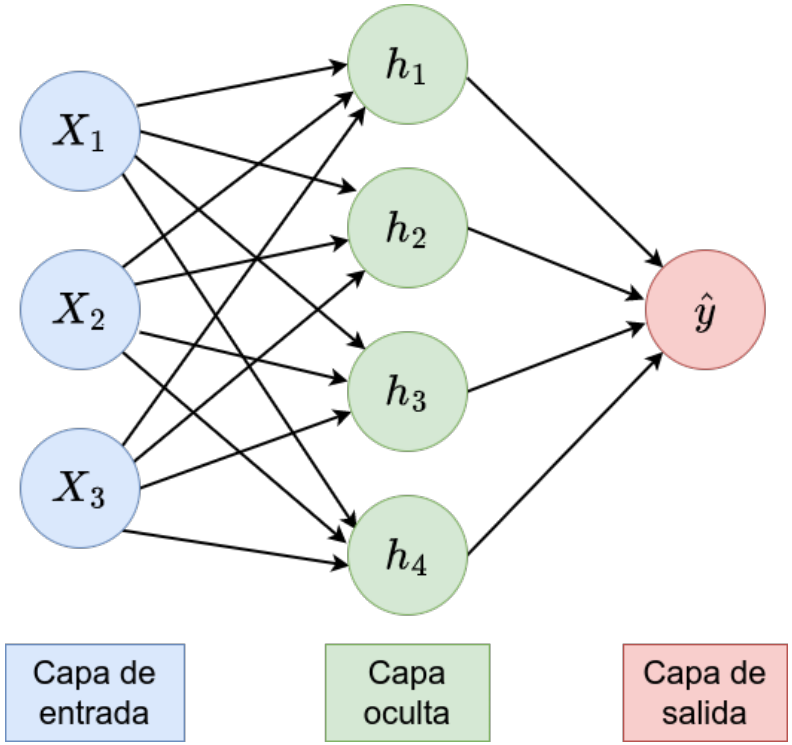
Antes de unir varios perceptrones vamos a **simplificar** su representación, para que los diagramas sean legibles:



Uniendo con varios perceptrones

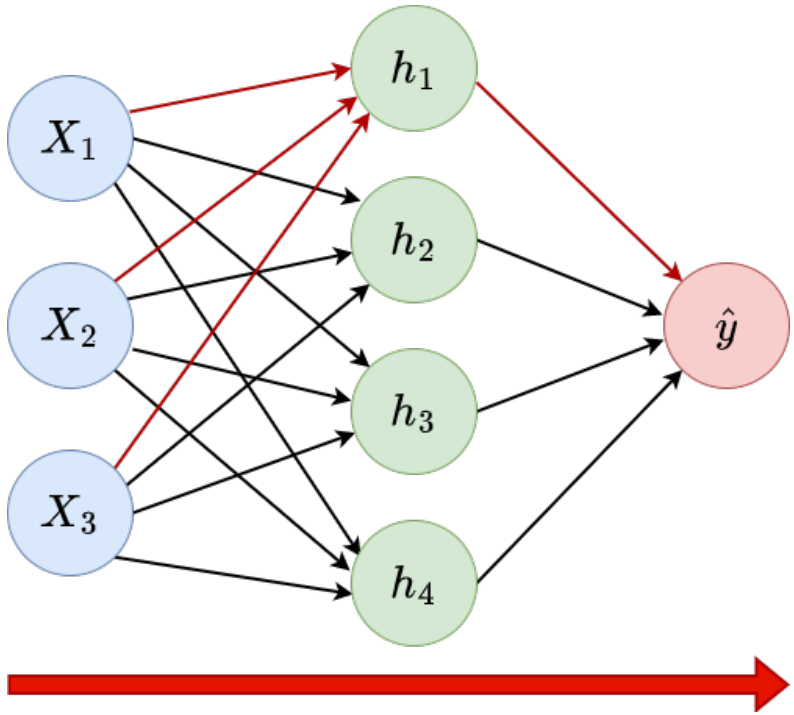
Las manera más común de unir varios perceptrones son con **capas totalmente conectadas**.

- Cada capa puede tener varias neuronas.
- Podemos utilizar varias capas, conectando unas con otras.



Uniendo con varios perceptrones (1 capa oculta)

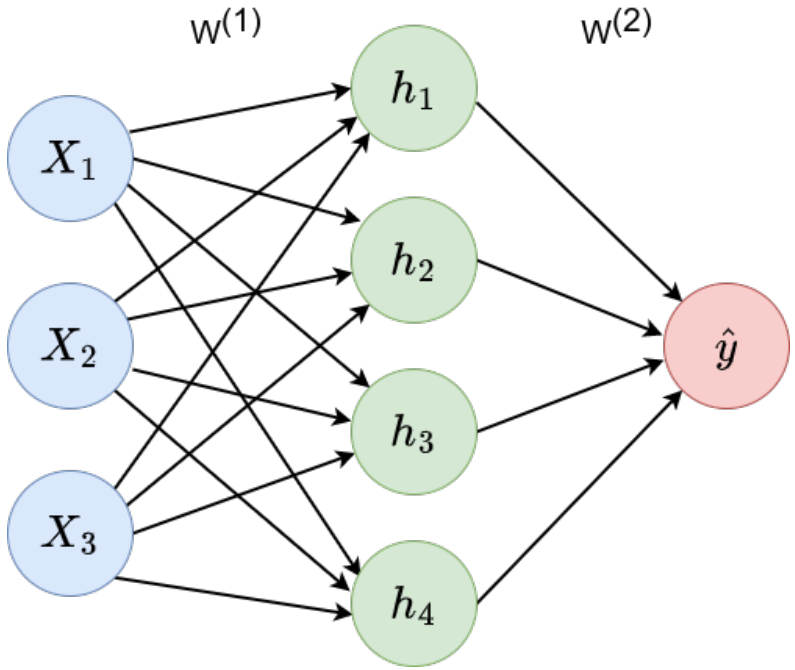
La idea es que la salida de cada perceptrón (neurona), sirva como entrada a las de la capa siguiente. De esta manera podríamos calcular la salida de la red (**pasada hacia delante**), de izquierda a derecha utilizando las reglas explicadas anteriormente.



Salida en una red totalmente conectada

Para evaluar la salida $\hat{y}$ a partir de las entradas X en una red totalmente conectada se procede de la siguiente manera:

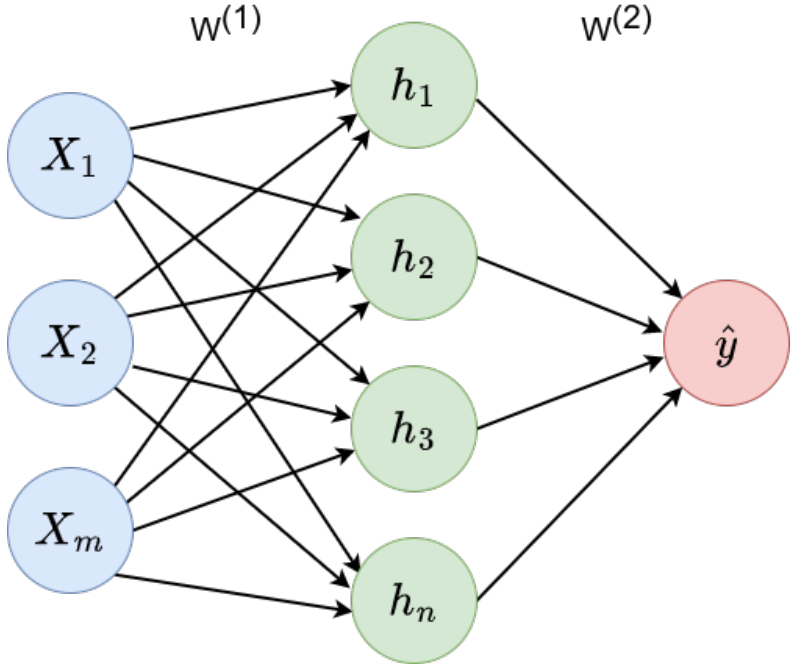
- Capa oculta: $h_i = b_i^{(1)} + \sum_{j=1}^{3} x_j w_{j,i}^{(1)}$
- Cada de salida: $\hat{y} = g(b^{(2)} + \sum_{j=1}^{4} h_j w_j^{(2)})$



Salida en una red totalmente conectada (1 capa oculta)

En general, para cualquier tamaño de red, tendríamos lo siguiente:

- Capa oculta: $h_i = b_i^{(1)} + \sum_{j=1}^{m} x_j w_{j,i}^{(1)}$
- Cada de salida: $\hat{y} = g(b^{(2)} + \sum_{j=1}^{n} h_j w_j^{(2)})$



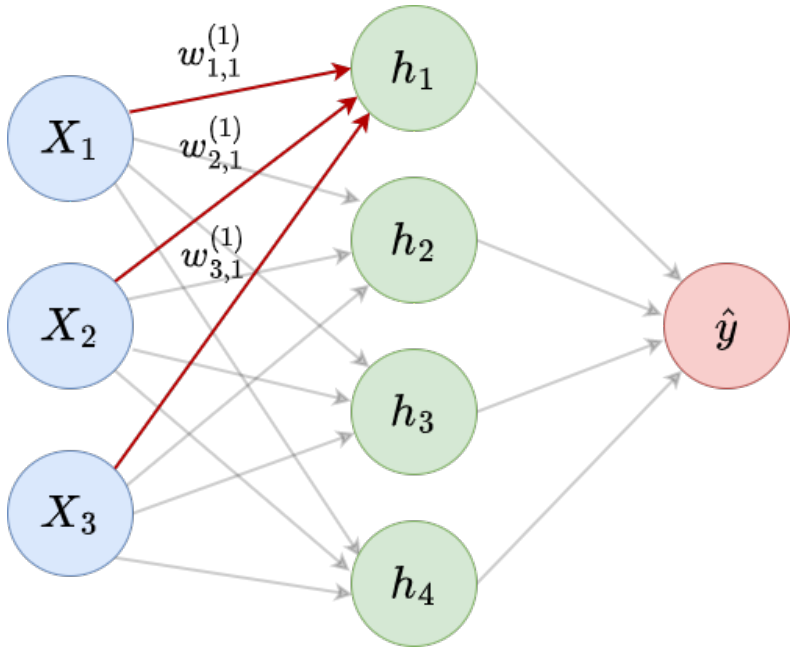
Nota

En el caso de querer aplicar una función de activación en la primera capa podríamos escribir: $h_i = g(b_i^{(1)} + \sum_{j=1}^{m} x_j w_{j,i}^{(1)})$

Salida en una red totalmente conectada (1 capa oculta)

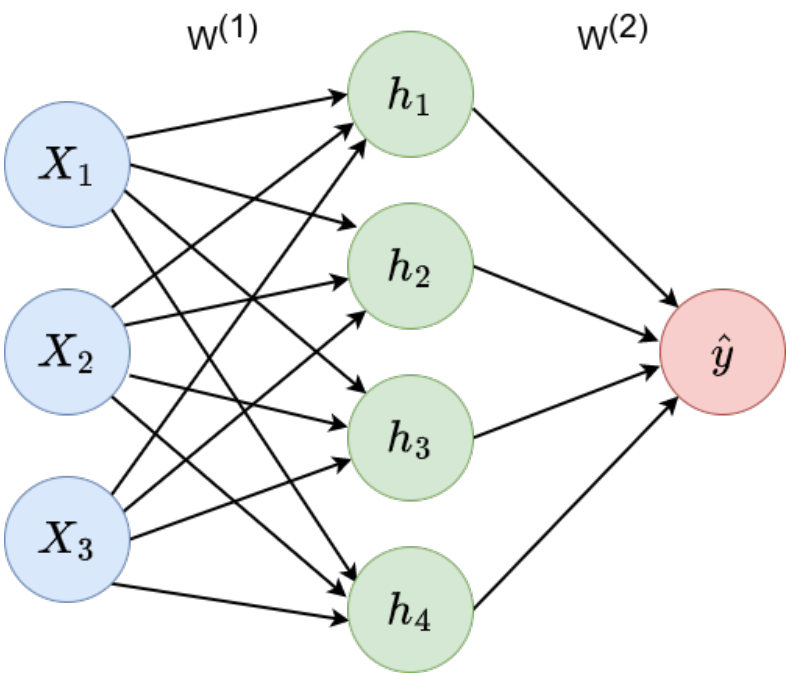
Un ejemplo para la neurona h_1 sería el siguiente:

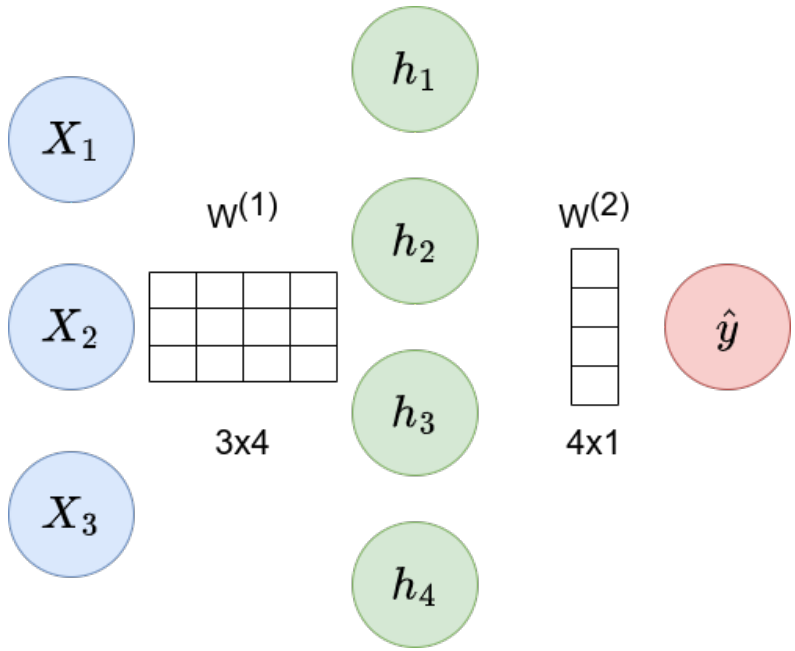
$$h_1 = b_1^{(1)} + \sum_{j=1}^{3} x_j w_{j,1}^{(1)} = b_1^{(1)} + x_1 w_{1,1}^{(1)} + x_2 w_{2,1}^{(1)} + x_3 w_{3,1}^{(1)}$$



Salida en una red totalmente conectada (1 capa oculta)

La clave de la evaluación de una red es la **multiplicación de matrices**:

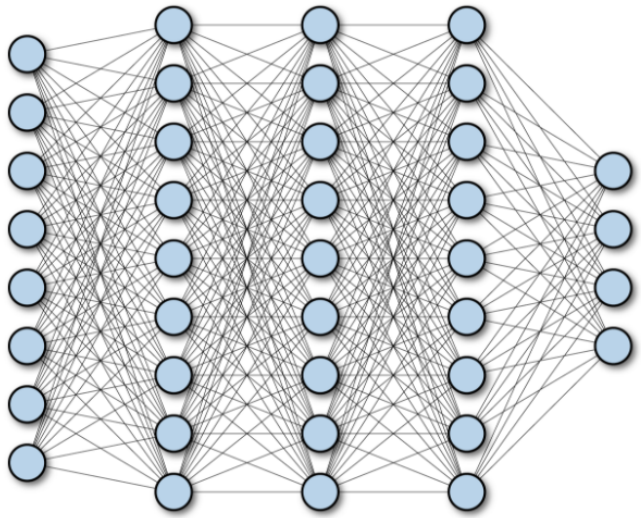




Múltiples capas totalmente conectadas

Podemos seguir añadiendo capas totalmente conectadas para hacer nuestra red más grande.

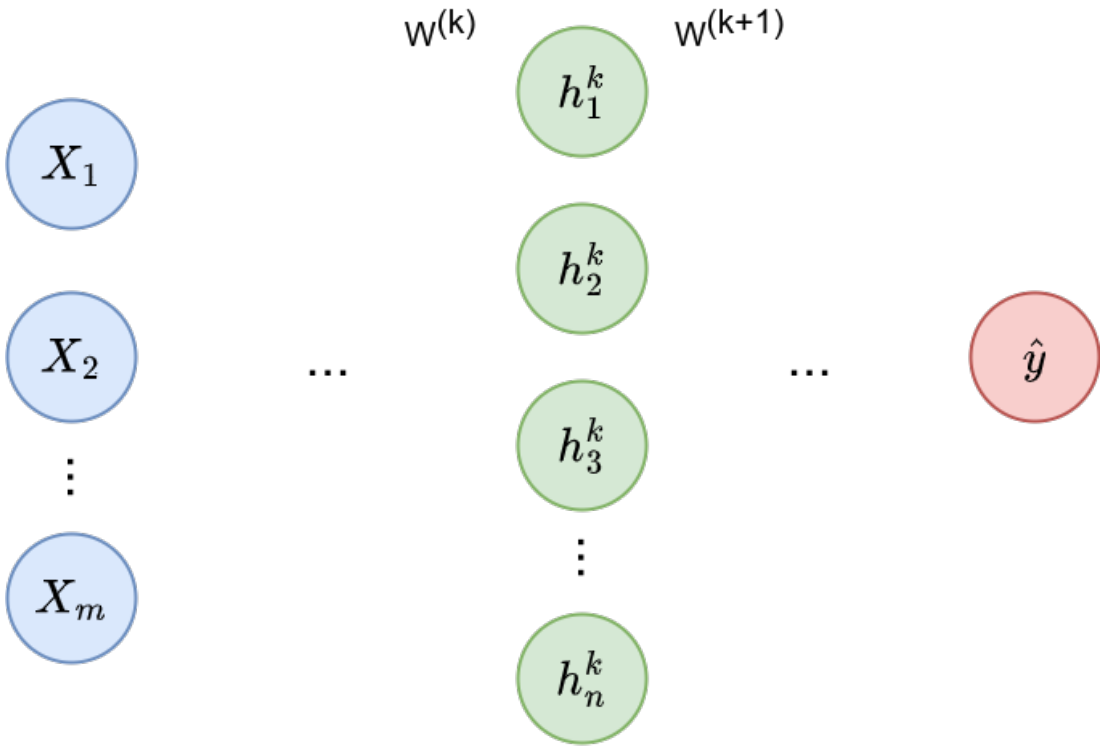
- El número de pesos crecerá muy rápido.
- La **dimensión** de las matrices a multiplicar será **mayor**.
- Pero el proceso explicado será exactamente el mismo independientemente de la dimensión de la red.



Evaluación de una red con varias capas

En general, para totalmente conectada con k capas ocultas, la podríamos evaluar de la siguiente manera:

$$h_i^{(k)} = g(b_i^{(k)} + \sum_{j=1}^{n_{k-1}} h_j^{(k-1)} w_{j,i}^{(k)})$$



Entrenamiento de una red: Función de pérdida

¿Cómo entrenar la red?

Hasta el momento hemos aprendido como evaluar la salida de una **red neuronal totalmente conectada**, a partir de los datos de entrada.

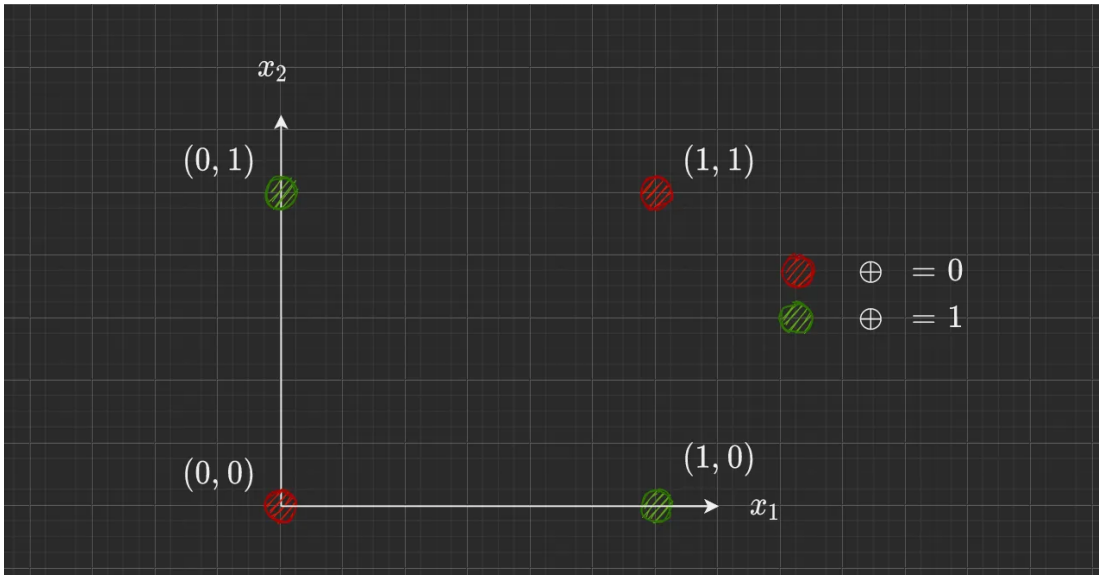
¿Cómo ser capaces de aprender los pesos de la red (W y b) para que representen los datos entrenamiento y para predecir nuevos ejemplos?

Ejemplo práctico: XOR

Supongamos que tenemos un conjunto de datos de entrada para el cual queremos entrenar un modelo con una red neuronal.

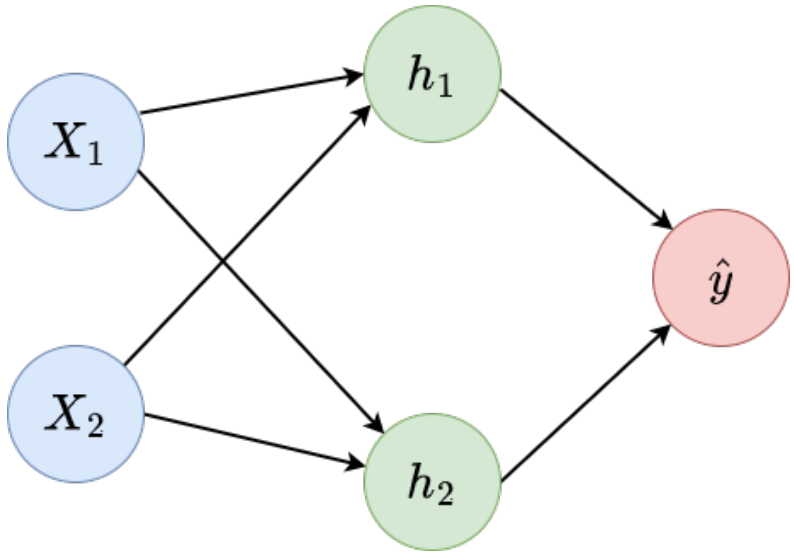
Ten en cuenta que este conjunto de datos **no es linearmente separable**.

x_1	x_2	y
0	0	0
0	1	1
1	0	1
1	1	0



Ejemplo práctico: XOR

Vamos a definir una red neuronal muy sencilla, con dos neuronas en la **capa de entrada**, dos neuronas en la **capa oculta**, y una neurona en la **capa de salida**.



La función de activación g en la capa oculta y en la salida será la **sigmoide**.

Ejemplo práctico: XOR

Inicializaremos las matrices de pesos $w^{(1)}$ y $w^{(2)}$ a valores aleatorios. Por simplicidad en este ejemplo, no consideraremos el bias.

$$w^{(1)} = \begin{bmatrix} 0.96 & 0.89 \\ 0.28 & 0.73 \end{bmatrix} \; w^{(2)} = \begin{bmatrix} 0.60 \\ 0.22 \end{bmatrix}$$

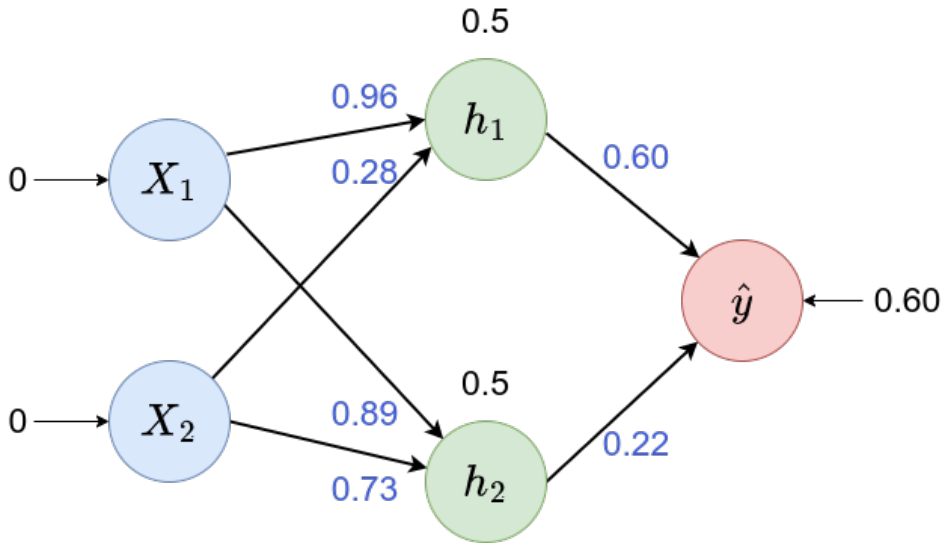
Veamos que sucede si evaluamos uno de los puntos del conjunto de datos, por ejemplo el punto (0,0).

Ejemplo práctico: XOR

$$X = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$h = g(X^T w^{(1)}) = g\left(\begin{bmatrix} 0 & 0 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} 0.96 & 0.89 \\ 0.28 & 0.73 \end{bmatrix} \right) = g(\begin{bmatrix} 0 & 0 \end{bmatrix}) = \begin{bmatrix} 0.5 & 0.5 \end{bmatrix}$$

$$\hat{y} = g(hw^{(2)}) = g\left(\begin{bmatrix} 0.5 & 0.5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.60 \\ 0.22 \end{bmatrix} \right) = g(0.41) = 0.60$$



Ejemplo práctico: XOR

Si observamos el valor real para el punto $(0, 0)$ vemos que $y = 0$, pero nuestra red está devolviendo $\hat{y} = 0.6$ (al ser un valor > 0.5 lo evaluaríamos como 1).

Estamos **cometiendo un error**, evidentemente porque nuestra red no está entrenada (sus pesos son aleatorios).

Podemos ver la salida $\hat{y}$ para el resto de puntos del dataset:

x_1	x_2	y	$\hat{y}$	Acierto
0	0	0	0.60	X
0	1	1	0.62	✓
1	0	1	0.64	✓
1	1	0	0.66	X

Ejemplo práctico: XOR

Llegados a este punto podríamos calcular el error cometido con una **función de pérdida**. Por ejemplo para problemas de clasificación una de las más utilizadas es la **cross entropy loss**:

$$\mathcal{L}(y, \hat{y}) = -\sum_{i=1}^{C} y_i \log \hat{y}_i$$

Donde C es el número de clases de nuestro problema. Si estamos en un problema binario:

$$\mathcal{L}(y, \hat{y}) = -(y \log \hat{y} + (1 - y) \log(1 - \hat{y}))$$

Funciones de pérdida

Trataremos las funciones de pérdida más adelante en el curso.

Ejemplo práctico: XOR

Calculo del error para cada ejemplo:

x_1	x_2	y	$\hat{y}$	Correcto	$L(y, \hat{y})$
0	0	0	0.60	X	0.92
0	1	1	0.62	✓	0.48
1	0	1	0.64	✓	0.44
1	1	0	0.66	X	1.07

¿Cómo ajustar los pesos de nuestra red para ser capaces de minimizar el error cometido?

Entrenamiento de una red: descenso del gradiente

¿Cómo entrenar una red neuronal?

El objetivo del entrenamiento es **minimizar la función de pérdida** alterando para ello los pesos de la red. En general, trataremos de minimizar la función de pérdida sobre los datos de entrenamiento.

Formalmente: $W^* = argmin \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \mathcal{L}(y_i, f(x_i, W))$

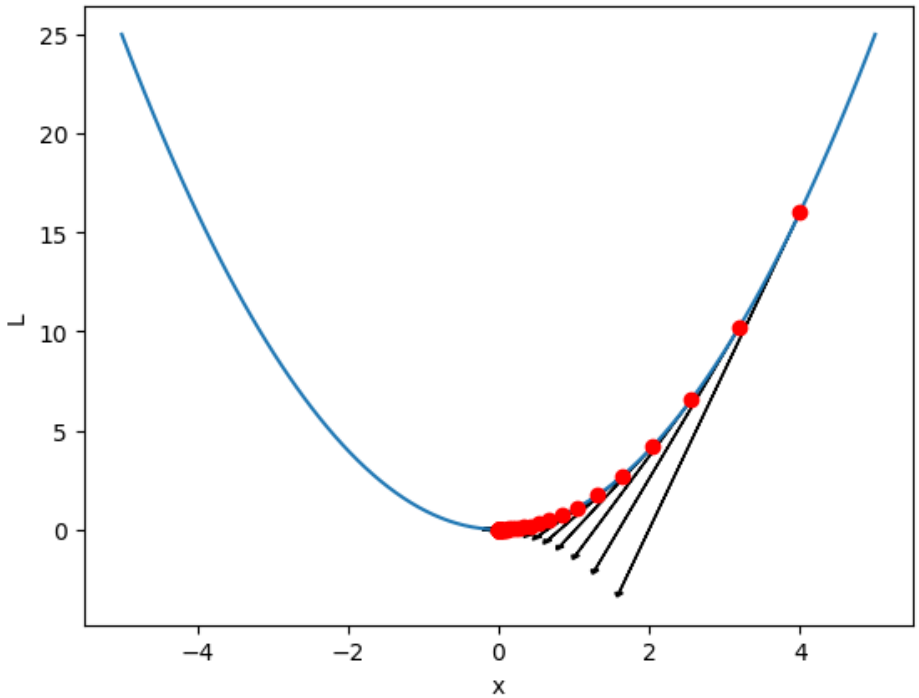
Este problema no se puede resolver de manera analítica ya que la función a minimizar es demasiado compleja. Para ello se utiliza una técnica de minimización conozida como **descenso de gradiente**.

Evaluación de la red

Es importante recordar la evaluación de la red se representa como $f(X, W)$, es decir, una función de los parámetros de la red y la entrada.

Descenso del gradiente

El descenso del gradiente es un algorítmo que nos permite encontrar el mínimo de una función basándonos en el concepto de **gradiente**.
Imaginemos la función $f(x) = x^2$. Como sabemos su mínimo está en cero.
Dado un x aleatorio, utilizaremos el descenso de gradiente para encontrar su mínimo.



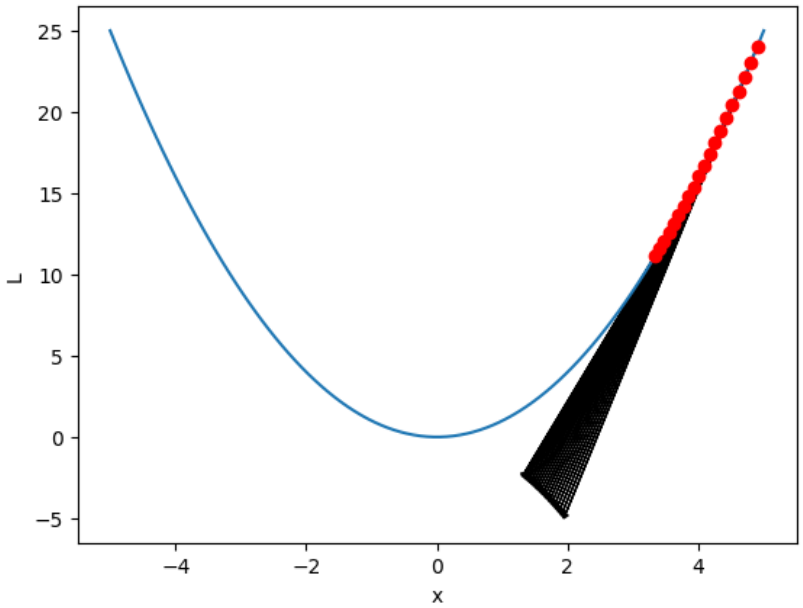
Descenso del gradiente

El algoritmo de **descenso de gradiente** se basa en los siguientes pasos:

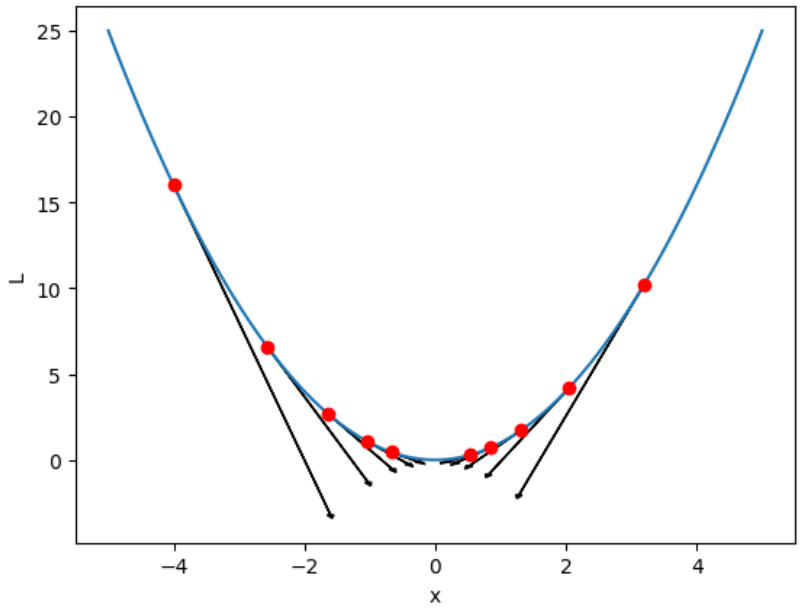
1. Partir de un valor aleatorio de x
2. Calcular el gradiente de la función en el punto $\frac{\partial f}{\partial x}$. Esto nos indicará hacia donde crece la función.
3. Actualizar $x = x - \eta \frac{\partial f}{\partial x}$. η es conocido como el **learning rate**.
4. Repetir 2 y 3 hasta la convergencia.

Descenso del gradiente

El **learning rate** es un parámetro crítico en este algoritmo.



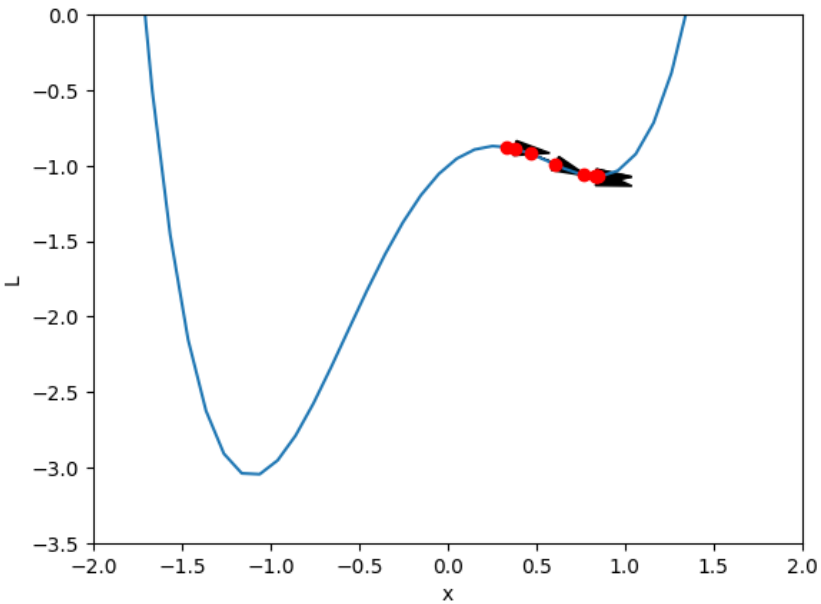
Learning rate muy pequeño



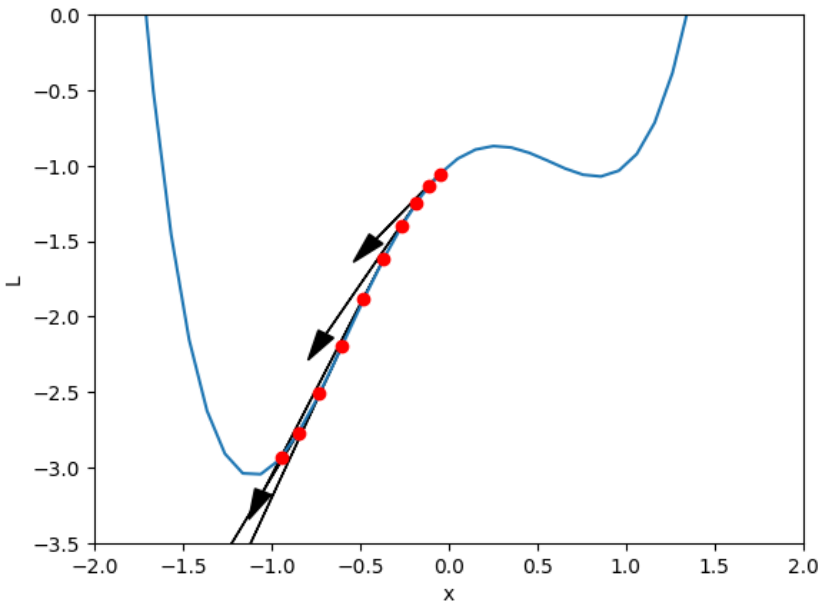
Learning rate demasiado grande

Descenso del gradiente

Además del learning rate, la **elección de los pesos iniciales** de la red también tiene un efecto importante. Imaginemos la función $f(x) = x^4 - 2x^2 + x - 1$. Esta función tiene un **mínimo global** y un **mínimo local**.



$x_0 = 0.3$



$x_0 = 0$

Descenso del gradiente

Una técnica para elegir los pesos iniciales suele ser **inicializarlos aleatoriamente** siguiendo una **distribución normal** $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$.

En cuanto al learning rate, se considera un **hiperparámetro** a ajustar.

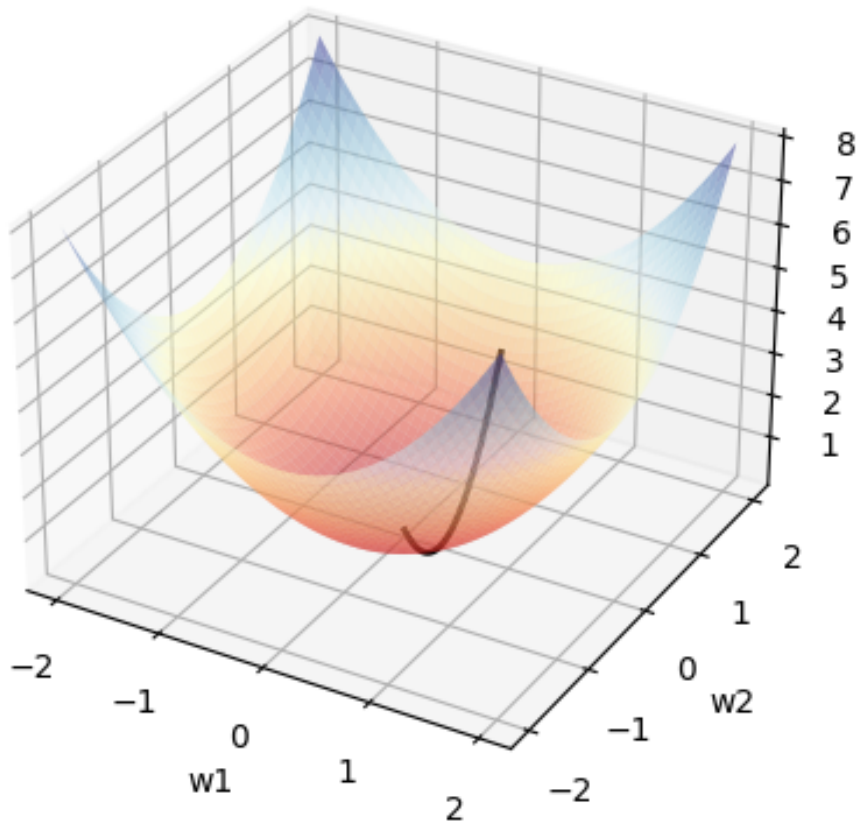
- Learning rates muy bajos pueden hacer que la red tarde mucho en converger. Por otra parte, un learning rate muy bajo puede ser más propenso a caer en mínimos locales.
- Learning rates muy altos pueden resultar en la no convergencia de la red en el mínimo global, como hemos visto anteriormente.

Probar y ganar experiencia

No existe una receta única para establecer el learning rate. En próximas lecciones aprenderemos más sobre este tema y veremos software específico que nos ayudará a elegir el learning rate más adecuado.

Descenso del gradiente

A continuación se muestra el mismo ejemplo pero en una función con dos variables de entrada $f(w1, w2)$. Esto podría representar a una red neuronal con dos pesos.



Descenso del gradiente

Descenso del gradiente:

- Es un algoritmo usado en varias areas (no solo en la IA), inventado hace más de 150 años.
- La dificultad en las redes neuronales consiste en el computo de las derivadas parciales de cada uno de los parámetros/pesos con respecto a la función de pérdida.
- Recuerda que una red, y más en el aprendizaje profundo, puede tener **miles de millones** de parámetros.
- ¿Cómo **calcular de manera eficiente los gradientes** de cada uno de los parámetros con respecto a la función de pérdida?

Entrenamiento de una red: Backpropagation

Propagación hacia atrás

El objetivo de la propagación hacia atrás (**backpropagation**) es calcular las derivadas parciales $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w}$ y $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial b}$, es decir, el gradiente de cada peso (w) y bias (b) con respecto a la función de pérdida.

Este algoritmo responde a la pregunta de como el **cambio de un parámetro** de la red **afecta a la salida** de la función de pérdida.

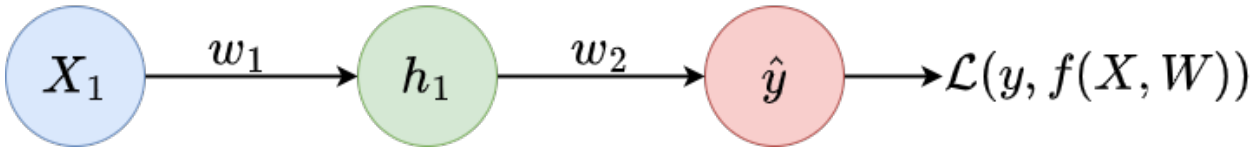
El nombre "propagación hacia atrás" viene de que el error (salida de la función de pérdida), **se propaga hacia atrás** a través de la red, desde la salida hasta la capa de entrada.

Descubrimiento de la propagación hacia atrás

La propagación hacia atrás fue descubierta a mitad de la década de los 80. Aunque el perceptrón había sido descubierto antes, fue este hecho el que permitió empezar a entrenar las redes neuronales de manera eficiente.

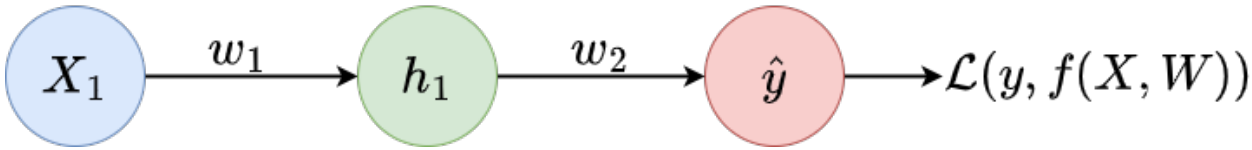
Propagación hacia atrás

Imaginemos la red más sencilla posible, con una neurona en la capa de entrada, una neurona en la capa intermedia y una neurona en la capa de salida.



Recuerda que la salida de la red es una función de los pesos y los datos de entrada. $\mathcal{L}$ es la función de pérdida utilizada.

Propagación hacia atrás



¿Cómo podemos calcular el gradiente de los pesos con respecto a la función de pérdida, es decir, $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_1}$ y $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_2}$?

La herramienta matemática que utilizaremos será la **regla de la cadena**. Nos permitirá calcular las derivadas parciales cuando la función a derivar es la composición de otras funciones.

Regla de la cadena

La regla de la cadena se usa para calcular derivadas con la forma:

$$y = f(g(x))$$
$$y' = f'[g(x)]g'(x)$$

donde f corresponde a la **función externa** y g a la **función interna**.

La regla de la cadena también se puede escribir de la siguiente forma:

$$y = f(u), \text{ con } u = g(x)$$
$$\frac{\partial y}{\partial x} = \frac{\partial y}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x}$$

Importante

Una red neuronal no es es más que una composición de muchas funciones por tanto la regla de la cadena es muy útil para calcular las derivadas parciales con respecto a los parámetros de la misma.

Regla de la cadena: Ejemplo

Supongamos una función polinómica y, como por ejemplo:

$$y = (6x^2 + 2)^4$$

Regla de la cadena: Ejemplo

Supongamos una función polinómica y, como por ejemplo:

$$y = (6x^2 + 2)^4$$

en este caso, podemos considerar y como una composición de dos funciones:

- La **función externa**: la potencia a la cuarta
- La **función interna**: lo que hay en el paréntesis.

Regla de la cadena: Ejemplo

Supongamos una función polinómica y, como por ejemplo:

$$y = (6x^2 + 2)^4$$

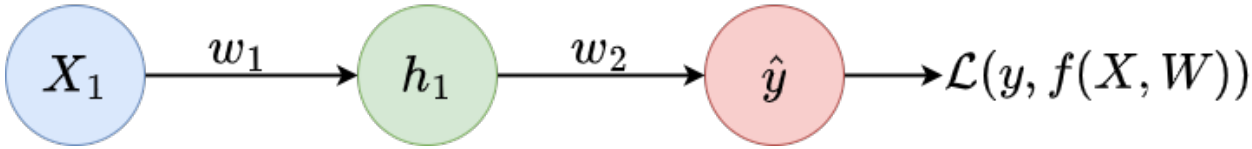
en este caso, podemos considerar y como una composición de dos funciones:

- La **función externa**: la potencia a la cuarta
- La **función interna**: lo que hay en el paréntesis.

Por tanto aplicaríamos la regla de la cadena de la siguiente forma:

$$y' = 4(6x^2 + 2)(12x)$$

Propagación hacia atrás



Podemos utilizar la **regla de la cadena** para calcular las derivadas parciales con respecto a los parámetros de la red.

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_2} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{y}} \frac{\partial \hat{y}}{\partial w_2}$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_1} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{y}} \frac{\partial \hat{y}}{\partial w_1} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{y}} \frac{\partial \hat{y}}{\partial h_1} \frac{\partial h_1}{\partial w_1}$$

Importante

La **regla de la cadena** nos permite dividir el cálculo de los gradientes de la función de pérdida con respecto a los pesos de la red en un serie de **cálculos más pequeños y simples**.

Propagación hacia atrás

La propagación hacia atrás tiene varios problemas. El primero es que necesita **calcular los gradientes para todos los parámetros de la red por cada uno de los ejemplos** del dataset.

Esto significa calcular $\frac{1}{|d|}\sum_{x_i,y_i\in d}\mathcal{L}(y_i, f(x_i; W))$. De esta manera promediamos el gradiente en cada parámetro para todos ejemplos del conjunto de datos.

A esta técnica se la conoce comúnmente como **Batch Gradient Descent**. Su principal implicación es que **la complejidad** de la realización de una actualización de los pesos **aumenta linealmente** con respecto al tamaño del conjunto de datos de entrenamiento d.

Variaciones del descenso de gradiente

Tipos de descenso de gradiente

Existen varias soluciones para este problema, cada una con sus ventajas en inconvenientes:

- Descenso de gradiente por lotes (**Batch Gradient Descent**). Es la alternativa mencionada anteriormente. El gradiente se calcula para todos los ejemplos antes de actualizar los pesos.
- Descenso de gradiente por mini-lotes (**Mini-Batch Gradient Descent**). Variante del anterior. En lugar de considerar el conjunto de entrenamiento completo se coge un lote de ejemplos (mini-batch).
- Descenso de gradiente estocástico (**Stochastic Gradient Descent**). En este caso se calcula el gradiente y se actualizan utilizando un único ejemplo elegido aleatoriamente.

Descenso de gradiente por lotes

En el descenso de gradiente por lotes (**Batch Gradient Descent**):

- El conjunto de entrenamiento es **procesado completamente** antes de realizar una actualización de los pesos.
- La actualización de los pesos se basa en la **media de los gradientes** calculados para cada ejemplo.
- Es un algoritmo **determinista** (siempre que los pesos iniciales sean los mismos).
- **Converge lentamente**, especialmente en datasets grandes.
- Es un algoritmo **estable**.
- Tiene a quedarse en **mínimos locales** (especialmente si la función de pérdida no es convexa).

Descenso de gradiente estocástico

En el descenso de gradiente estocástico (**Stochastic Gradient Descent, SGD**):

- Se selecciona **un único ejemplo aleatorio** en cada iteración para calcular el gradiente.
- Tiene una **convergencia más rápida** porque los pesos se actualizan más frecuentemente.
- Es más **inestable** que las otras versiones ya que los gradientes son calculados para un solo ejemplo.
- Es menos propenso a quedarse atrapado en **mínimos locales**.

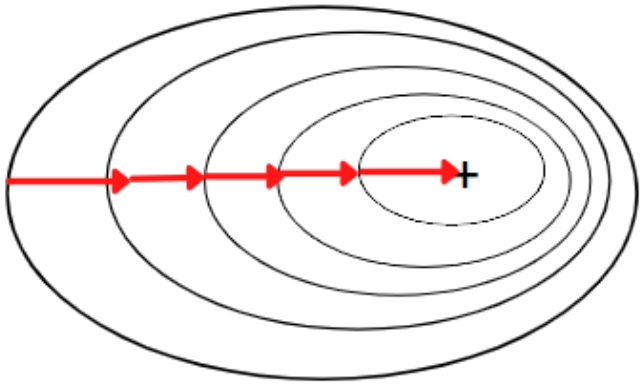
Descenso de gradiente por mini-lotes

El descenso de gradiente por mini-lotes (**Mini-Batch Gradient Descent**):

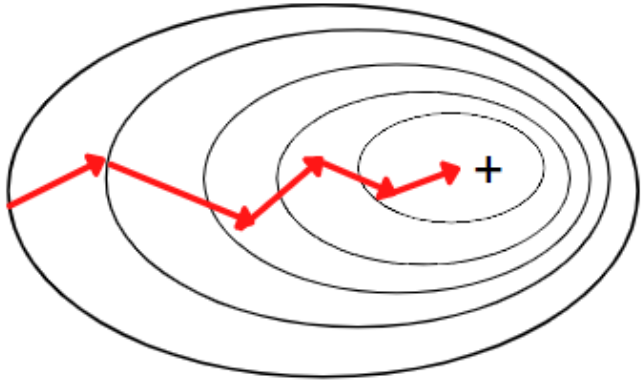
- Es un **punto intermedio** entre las dos soluciones anteriores.
- Las actualizaciones de los pesos de la red se realiza después de procesar un un **subconjunto de los datos** de entrenamiento.
  - El tamaño de este subconjunto se suele llamar **batch size**. Se suelen escoger valores como 32, 64, 128 (potencia de dos). Este valor se considera un hiper-parámetro del proceso de entrenamiento.
- Tiene una **convergencia más rápida** que en la versión por lotes porque actualiza los pesos más frecuentemente.
- Es menos preciso que el descenso de gradiente por lotes ya que **el gradiente calculado es solo una aproximación**.
- Es algoritmo **menos estable** y con más ruido pero esto puede ayudarle a salir de mínimos locales.

Comparativa entre las diferentes versiones

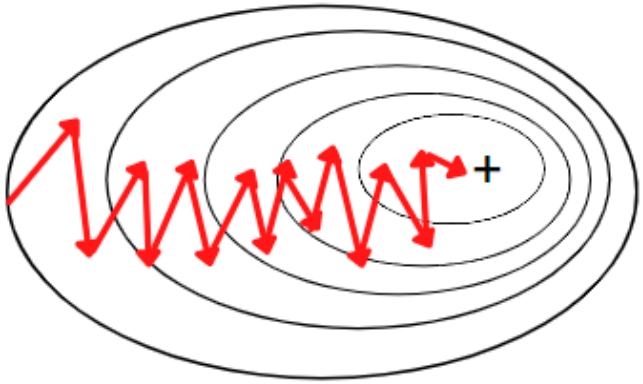
Batch Gradient Descent



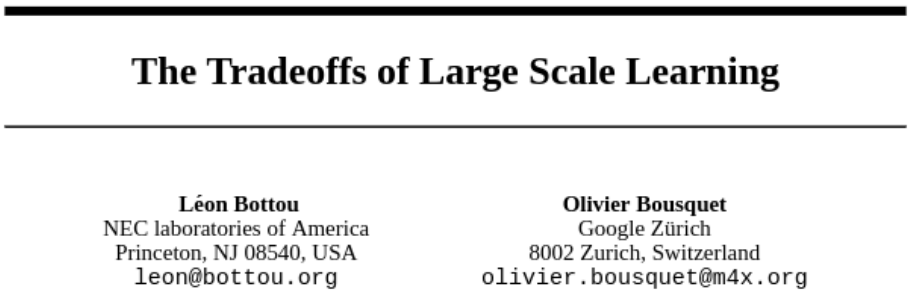
Mini-Batch Gradient Descent



Stochastic Gradient Descent



¿Qué algoritmo de optimización elegir?



The Tradeoffs of Large Scale Learning

Léon Bottou
NEC laboratories of America
Princeton, NJ 08540, USA
leon@bottou.org

Olivier Bousquet
Google Zürich
8002 Zurich, Switzerland
olivier.bousquet@m4x.org

Un resultado importante descubierto por Bottou and Bousquet (2011) indica lo siguiente:

- SGD no es el algoritmo más efectivo en términos de minimizar el error de entrenamiento.
- Pero, generalmente obtiene **modelos que generalizan mejor**.

Generalización con respecto a sobreajuste

Aunque estudiaremos este tema en más profundidad, recuerda que lo que nos interesa es ser capaces de generalizar lo aprendido y no simplemente memorizar el conjunto de entrenamiento (sobreajuste).

¿Qué algoritmo de optimización elegir?

Generalmente, Mini-Batch Gradient Descent será una buena elección inicial ya que combina las fortalezas de los otros dos enfoques.

Realmente que algoritmo de optimización utilizar depende del problema en concreto y de la arquitectura de la red. De todas maneras, es útil entender los algoritmos de optimización existentes para ser capaces de ajustar hiper-parámetros como por ejemplo el **batch-size** o el **learning rate**.

Otros algoritmos de optimización

En próximas unidades veremos otros algoritmos de optimización más avanzados, como Adam, AdamW o RMSProp, etc. Estos algoritmos trabajan con conceptos como el **momento** o los **learning rates** adaptativos.

Desvanecimiento del gradiente y sus soluciones

Desvanecimiento del gradiente

¿Qué es el desvanecimiento del gradiente?

- El **desvanecimiento del gradiente** es un problema que puede ocurrir durante el entrenamiento de redes neuronales profundas.
- Como hemos visto anteriormente, la actualización de los pesos depende de los gradientes de la función de pérdida con respecto a los parámetros de la red neuronal. Estos **se vuelven muy pequeños** a medida que se retropropagan a través de varias capas.
  - Si estos gradientes son muy pequeños puede hacer que los pesos en ciertas capas apenas cambien.
- Este problema puede hacer que la red neuronal **converja muy lentamente** o incluso que **no converja en absoluto**.

Desvanecimiento del gradiente

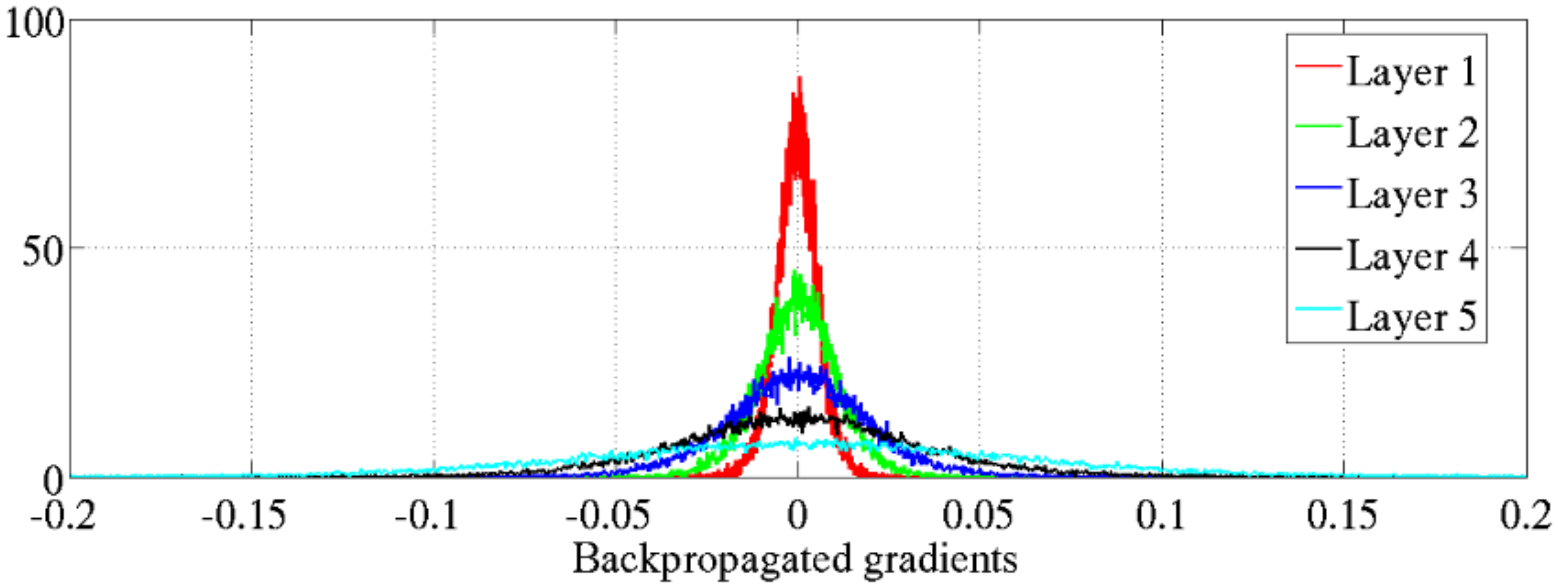
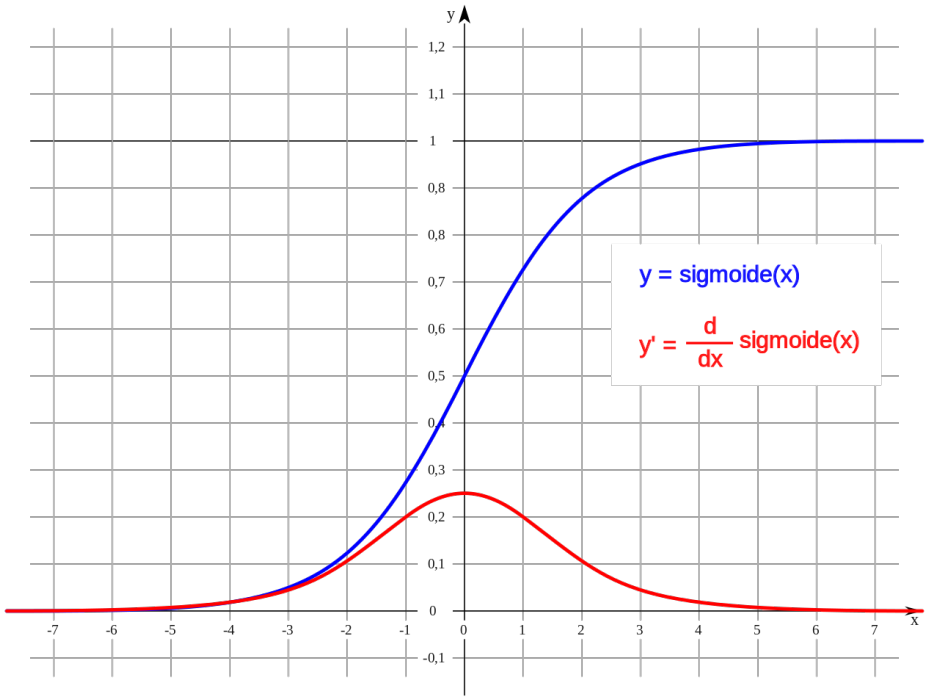


Figure: Figura extraída del paper "Understanding the difficulty of training deep feedforward neural networks" de Xavier Glorot y Yoshua Bengiom, 2010.

Causas del desvanecimiento del gradiente

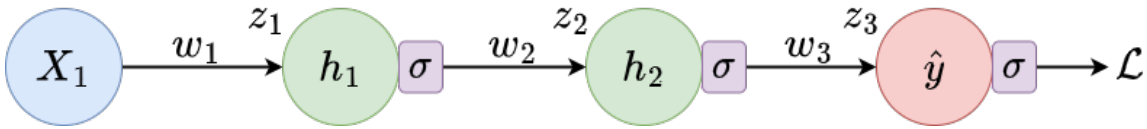
Las principales causas del desvanecimiento del gradiente son:

- Esto puede ocurrir cuando se utilizan **funciones de activación que tienen gradientes muy pequeños**, como la función sigmoide.
- También puede ocurrir cuando se utiliza una **inicialización inapropiada de los pesos** de la red neuronal.



Desvanecimiento del gradiente: ejemplo

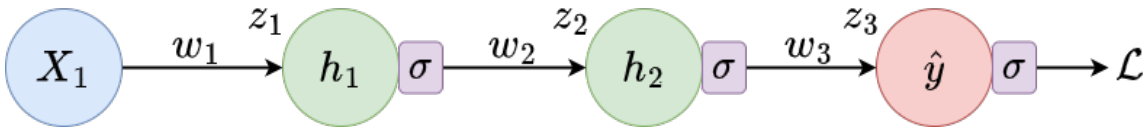
Imaginemos una red neuronal, con dos capas ocultas y funciones de activación (σ) sigmoides, inicializada con unos pesos de una Gausiana, con media 0 y desviación pequeña, tal que generalmente $-1 < w_i < 1$.



En este caso, como ya sabemos, podemos evaluar la red de la siguiente manera:

$$z_1 = w_1 x_1$$
$$h_1 = \sigma(z_1)$$
$$z_2 = w_2 h_1$$
$$h_2 = \sigma(z_2)$$
$$z_3 = w_3 h_2$$
$$\hat{y} = \sigma(z_3)$$

Desvanecimiento del gradiente: ejemplo



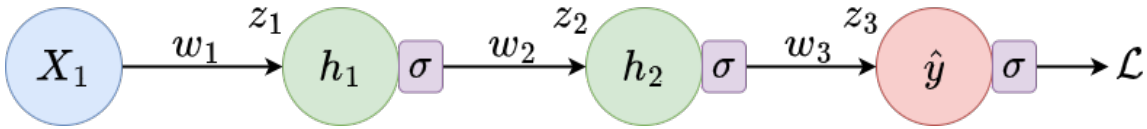
Resumiendo, la evaluación de la red sería:

$$\hat{y} = \sigma(w_3(\sigma(w_2(\sigma(w_1 x_1)))$$

Si ahora queremos calcular la derivada de $\mathcal{L}$ con respecto al peso w_1, tendríamos:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_1} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{y}} \frac{\partial \hat{y}}{\partial z_3} \frac{\partial z_3}{\partial h_2} \frac{\partial h_2}{\partial z_2} \frac{\partial z_2}{\partial h_1} \frac{\partial h_1}{\partial z_1} \frac{\partial z_1}{\partial w_1}$$

Desvanecimiento del gradiente: ejemplo



$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_1} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{y}} \frac{\partial \hat{y}}{\partial z_3} \frac{\partial z_3}{\partial h_2} \frac{\partial h_2}{\partial z_2} \frac{\partial z_2}{\partial h_1} \frac{\partial h_1}{\partial z_1} \frac{\partial z_1}{\partial w_1}$$

Dónde:

$$\frac{\partial z_1}{\partial w_1} = w_1, \frac{\partial z_2}{\partial h_1} = w_2, \frac{\partial z_3}{\partial h_2} = w_3$$

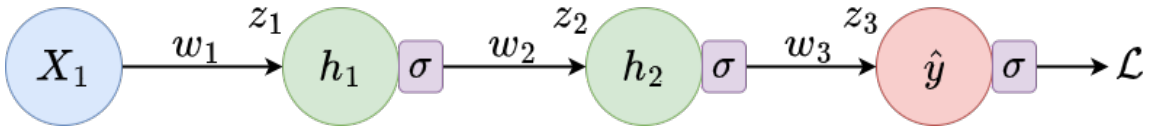
y:

$$\frac{\partial h_1}{\partial z_1} = \frac{\partial \sigma(z_1)}{\partial z_1}, \frac{\partial h_2}{\partial z_2} = \frac{\partial \sigma(z_2)}{\partial z_2}, \frac{\partial \hat{y}}{\partial z_3} = \frac{\partial \sigma(z_3)}{\partial z_3}$$

El cálculo del gradiente puede entonces reescribirse como:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_1} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{y}} \frac{\partial \sigma(z_3)}{\partial z_3} w_3 \frac{\partial \sigma(z_2)}{\partial z_2} w_2 \frac{\partial \sigma(z_1)}{\partial z_1} w_1$$

Desvanecimiento del gradiente: ejemplo



$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_1} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{y}} \frac{\partial \sigma(z_3)}{\partial z_3} w_3 \frac{\partial \sigma(z_2)}{\partial z_2} w_2 \frac{\partial \sigma(z_1)}{\partial z_1} w_1$$

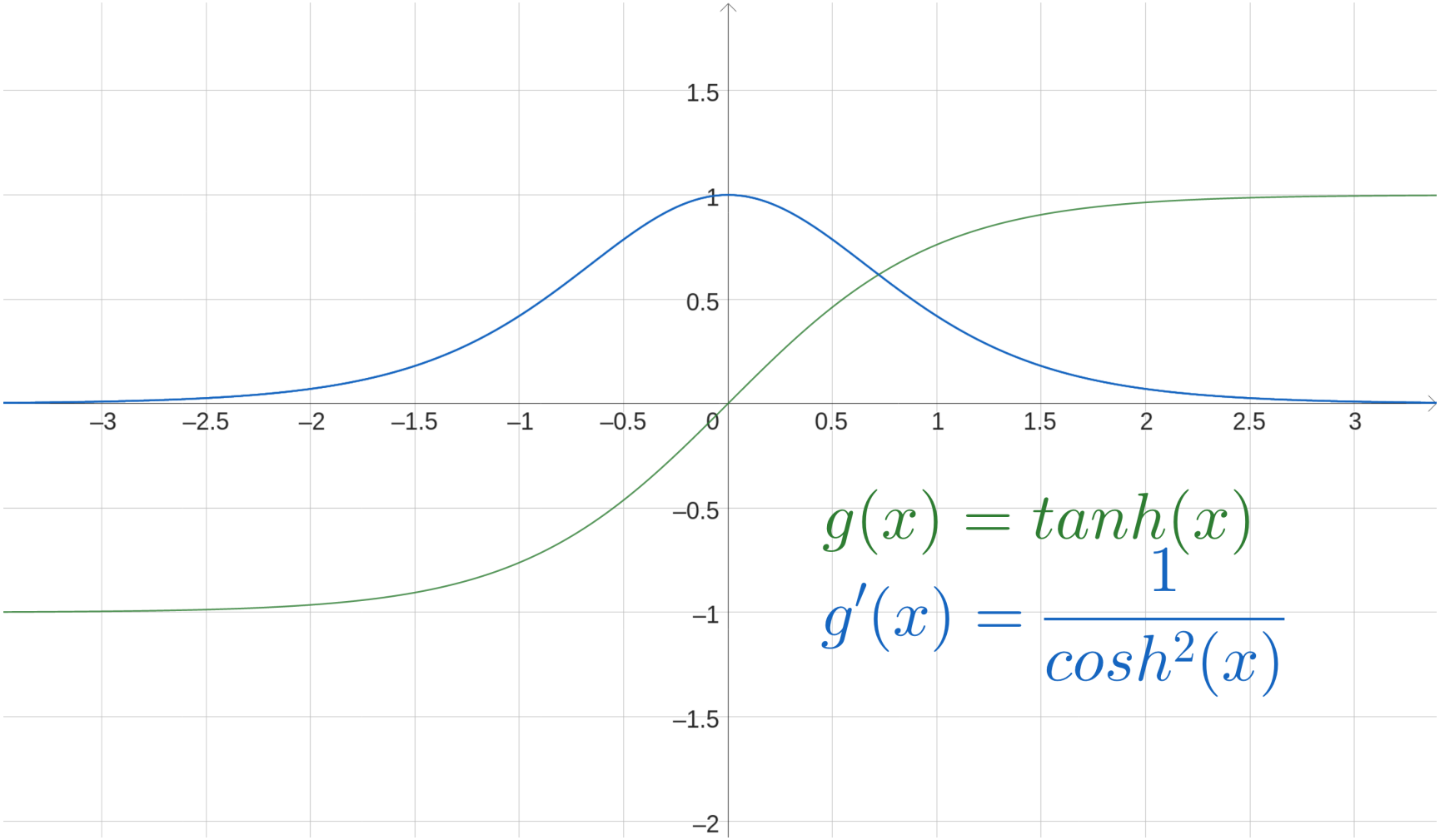
De esta ecuación debemos hacer dos observaciones:

- Los pesos w_j tendrán un valor entre -1 y 1.
- $\sigma'(z_j)$ valdrá como mucho 0.25.

Esto hace que cuanto más productos encadenemos (cuanto más profunda sea la red), mayor será la probabilidad de que el **gradiente sea muy cercano a cero**.

Como podemos ver, **la inicialización de los pesos es muy importante** ya que si tomamos todo ceros por ejemplo, el gradiente siempre valdría cero.

Otras funciones de activación con el mismo problema



$$g(x) = tanh(x)$$

$$g'(x) = \frac{1}{cosh^2(x)}$$

Función de activación ReLU

La función ReLU tiene las siguientes características:

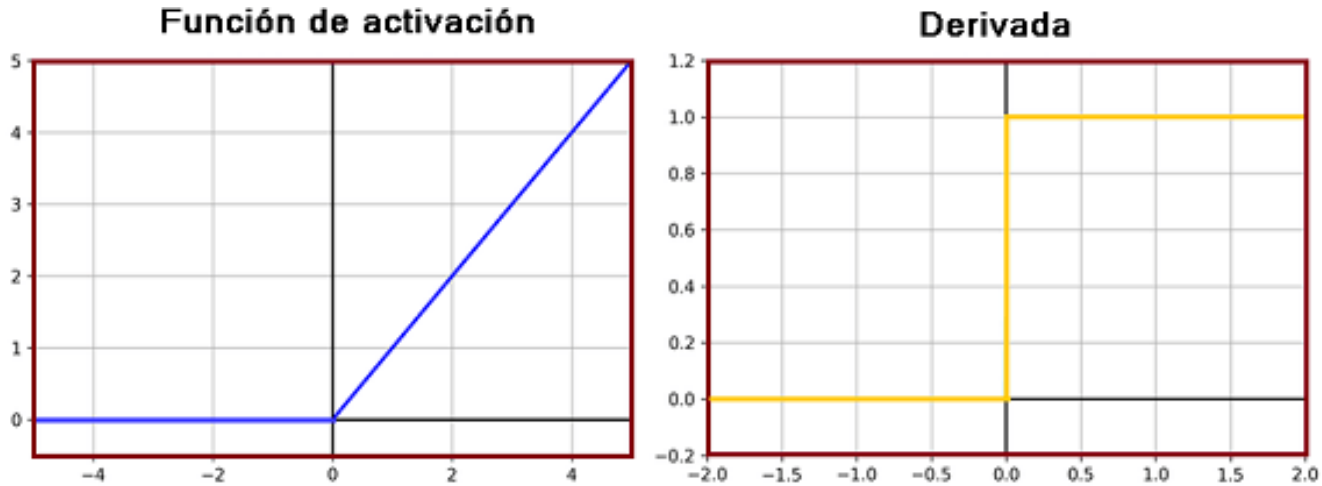
- Si el valor es mayor que cero, la activación es 1, por tanto **resuelve el problema del desvanecimiento del gradiente**.
- Es más rápida de calcular.

La función ReLU tiene el problema de que cuando el valor es negativo, su derivada es cero, cortando la propagación hacia atrás (**neuronas muertas**).

ReLU

$\max(0, x)$

$$f(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x > 0 \\ 0 & \text{otro caso} \end{cases}$$

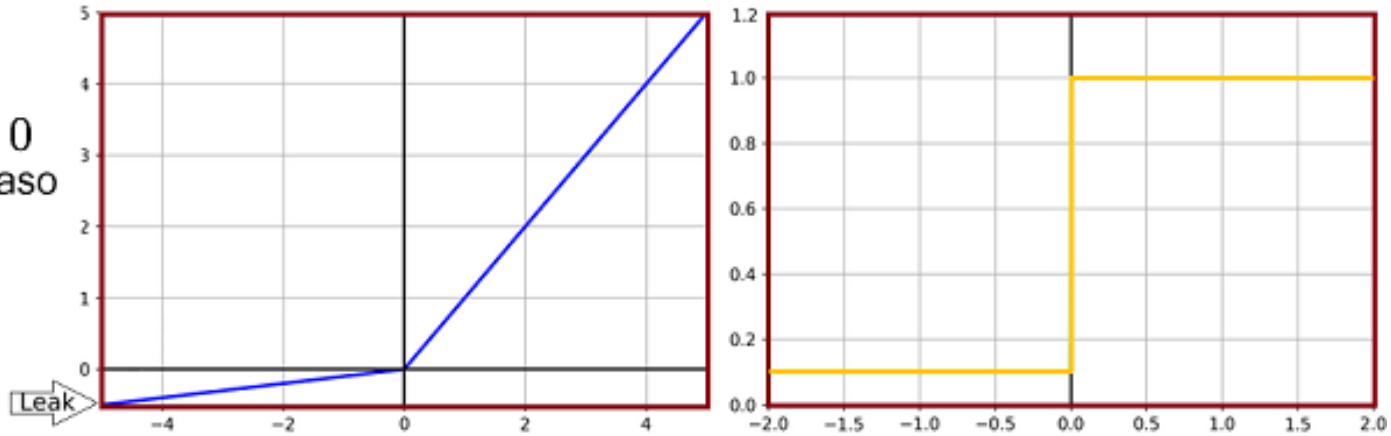


Función de activación LeakyReLU

Leaky ReLU

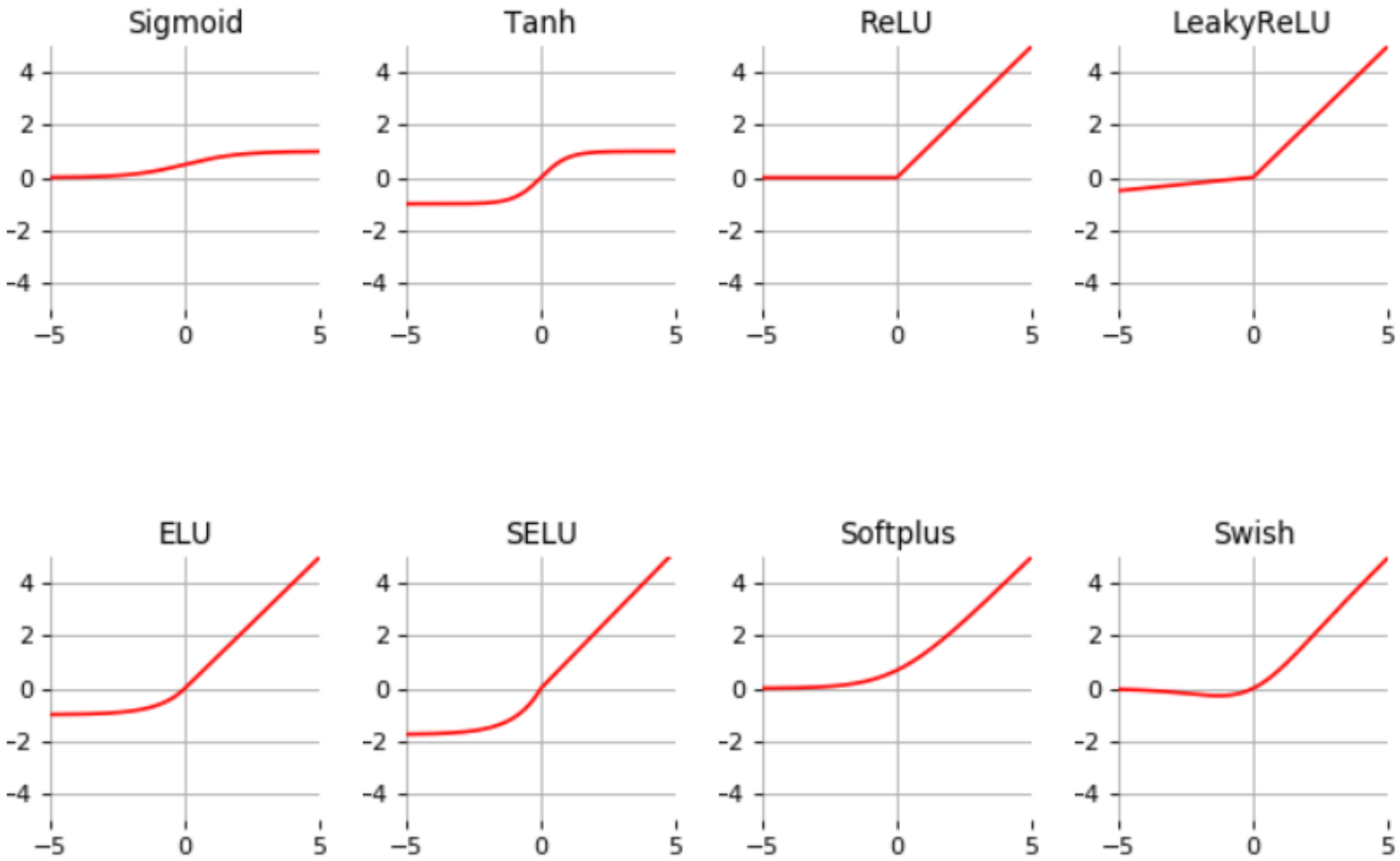
$\max(0{,}1x, x)$

$$f(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x > 0 \\ 0{,}01 & \text{otro caso} \end{cases}$$

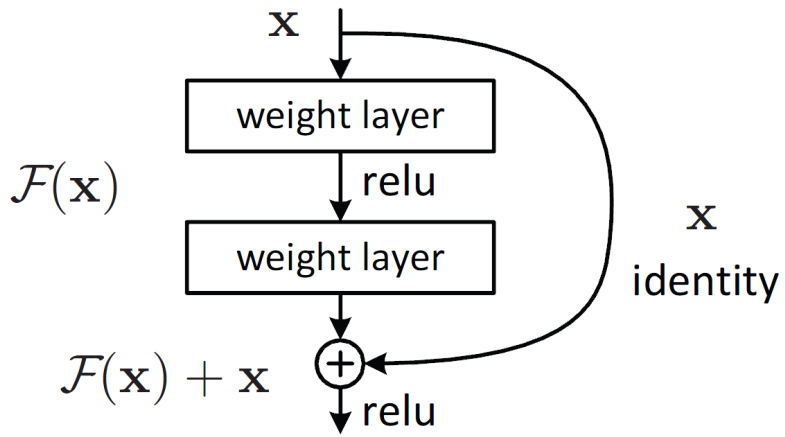


Esta función de activación garantiza que haya un valor distinto de cero para valores negativos, resolviendo parcialmente los problemas de la función ReLU.

Otras funciones de activación



Otras soluciones: Redes Residuales

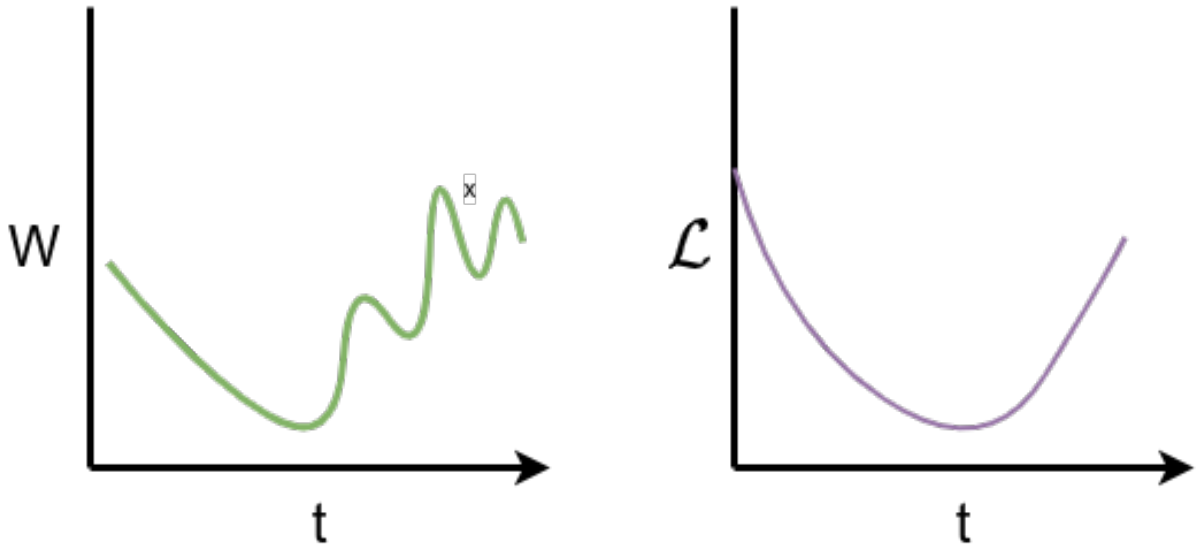


Las **ResNet** (Residual Networks) ofrecen varios beneficios para abordar el problema del desvanecimiento del grandiente:

- Facilitan el entrenamiento de redes más profundas al permitir que **los gradientes se propaguen directamente a través de las conexiones residuales**.
- Evitan la degradación del rendimiento a medida que se aumenta la profundidad de la red.
- Permiten el entrenamiento de arquitecturas extremadamente profundas con **cientos o incluso miles de capas**.

El problema del Exploding Gradient

El "exploding gradient" es otro desafío común en el entrenamiento de redes neuronales profundas. Ocurre cuando **los gradientes se vuelven cada vez más grandes** a medida que se propagan hacia atrás en las capas más profundas de la red. Esto puede llevar a **inestabilidad en el proceso de optimización** y dificultar el entrenamiento de la red.



Como detectar y monitorizar estos problemas

Esta parte la veremos en prácticas pero existe software específico que nos permite **monitorizar los pesos de una red neuronal** durante el entrenamiento de la misma.

Otras funciones de activación importantes: Softmax

La función de activación **softmax** es muy utilizada en redes neuronales cuando tratamos con problemas de clasificación. Tiene como entrada un vector $\mathbf{x}$ y produce una distribución de probabilidad $\mathbf{p}$ sobre K clases.

Está definida como:

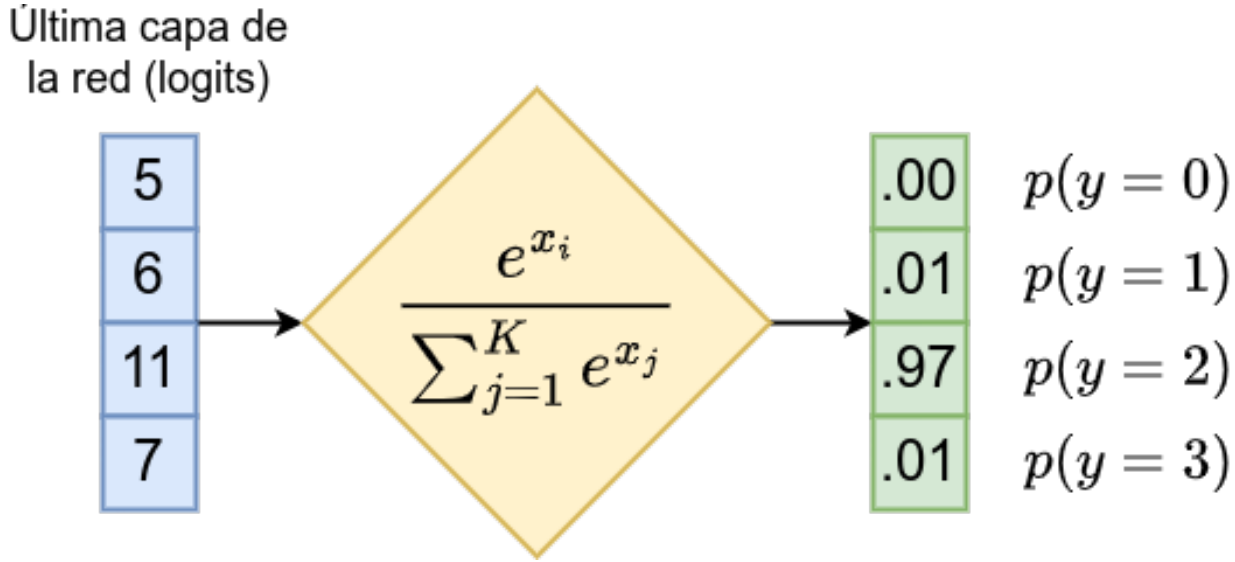
$$\text{softmax}(\mathbf{x}_i) = \frac{e^{x_i}}{\sum_{j=1}^{K} e^{x_j}} \quad \text{para } i = 1, 2, \ldots, K$$

Las principales propiedades de la función softmax son:

- La salida siempre es **positiva y suma uno**.
- Los valores de salida representan las **probabilidades de cada clase**.
- Evidentemente, es una **función diferenciable** (sino no se podría usar en una red).

Otras funciones de activación importantes: Softmax

Ejemplo de uso de la función softmax:



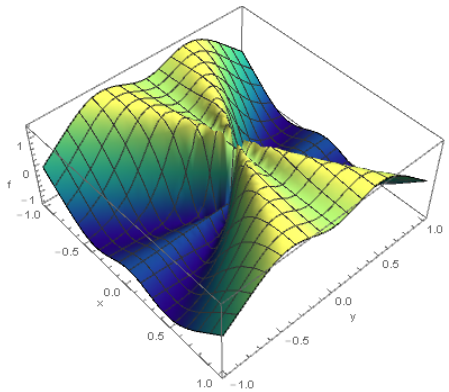
Importante

Ten en cuenta que esta función de activación se usa generalmente en la **última capa de la red** para convertir la salida de la red a probabilidades de pertenecer a cada clase. Como veremos más adelante no es adecuada para clasificación binaria (la sigmoide sería más adecuada), solo para clasificación multiclase.

Diferenciación automática y grafos computacionales

Diferenciación automática

- Como hemos visto en este tema, la **diferenciación** es una pieza clave para el **cálculo de los gradientes** y por tanto para el entrenamiento de una red neuronal.
- Frameworks como **PyTorch** y **TensorFlow** proporcionan herramientas que son capaces de calcular los gradientes para cualquier arquitectura de red propuesta.
- Estos frameworks implementan un mecanismo llamado **grafo computacional** para realizar el cálculo de gradientes de manera eficiente.



Grafo computacional

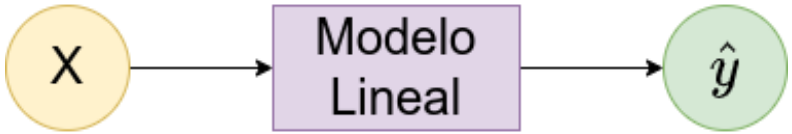
- En PyTorch y TensorFlow, las operaciones se representan mediante un **grafo computacional**.
- El grafo está compuesto por **nodos** que representan las **operaciones** y los **artistas** que indican las **dependencias entre las operaciones**.
- El grafo captura la estructura de cómputo de un modelo y permite el cálculo de gradientes eficientemente.
- Durante la **pasada hacia adelante**, el grafo se construye registrando todas las operaciones realizadas.
- Durante el **propagación hacia atrás**, el grafo se utiliza para calcular los gradientes mediante la regla de la cadena.

Ejemplo

A continuación veremos un ejemplo práctico de un grafo computacional para un problema simple de regresión lineal.

Grafo computacional: Ejemplo

Supongamos que queremos usar una red neuronal con una sola neurona para construir un **modelo lineal** para aprender un problema de **regresión lineal**.



El modelo a aprender, con una sola neurona, será le siguiente:

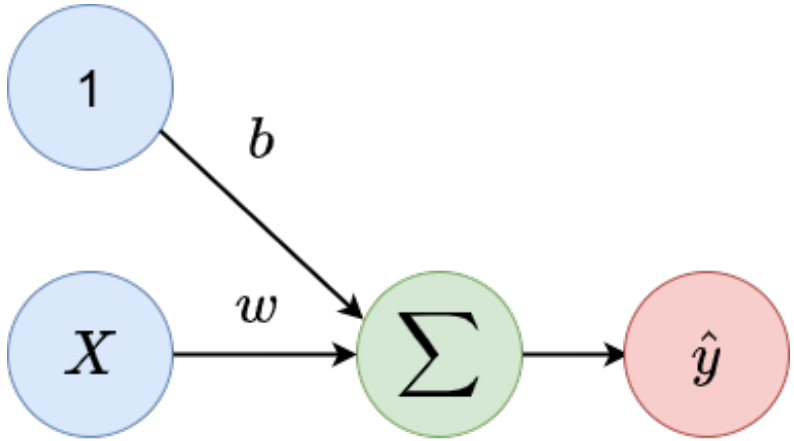
$$\hat{y} = wx + b$$

La función de pérdida que utilizaremos será el **error cuadrático**:

$$\mathcal{L} = (\hat{y} - y)^2$$

Grafo computacional: Ejemplo

Siguiendo la notación que hemos usado en transparencias previas, el modelo ($\hat{y} = wx + b$) se podría representar de la siguiente manera:

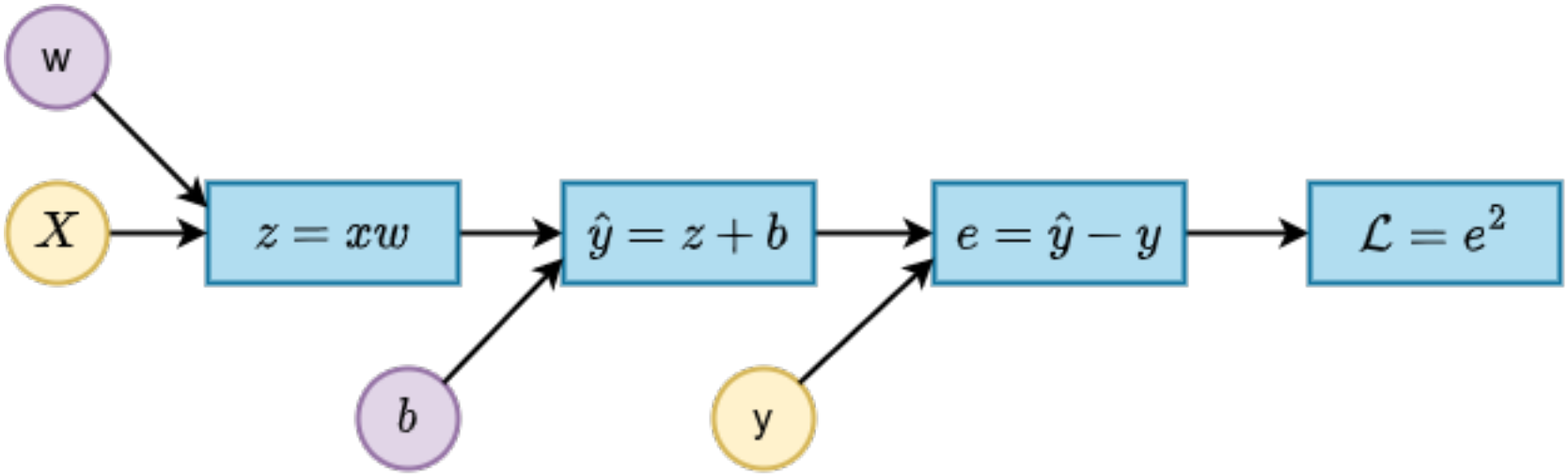


Importante

Ten en cuenta que como la entrada solo tiene una dimensión y solo tenemos un peso, hemos evitado el uso de subíndices. El término bías, también es un parámetro a aprender indicado por la letra b.

Grafo computacional: Ejemplo

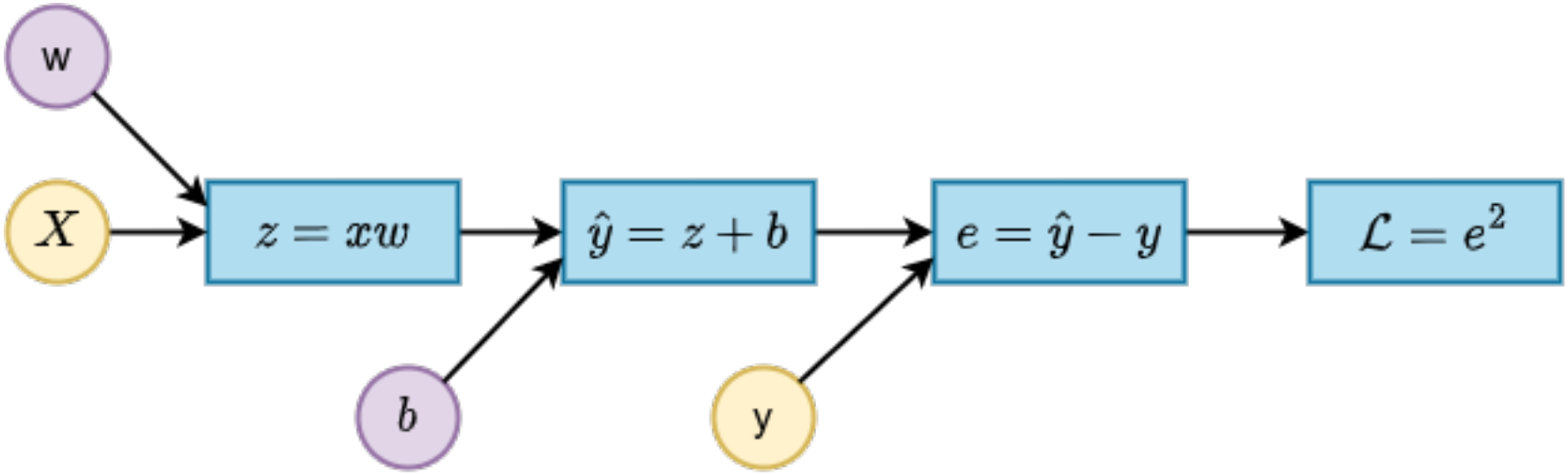
El **grafo computacional** del modelo sería el siguiente:



Importante

Ten en cuenta que el grafo computacional representa las operaciones a realizar, divididas en **operaciones básicas** de las cuales **su derivada es conocida**.

Grafo computacional: Ejemplo

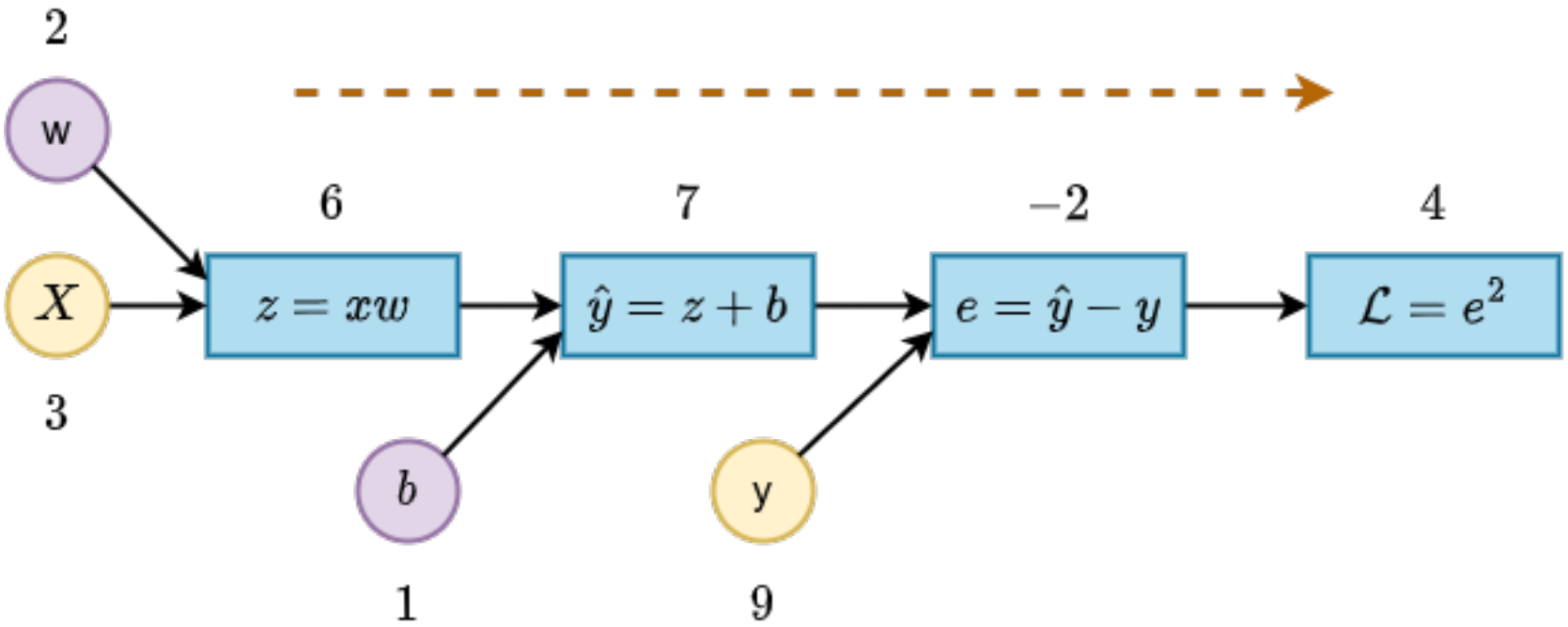


En este grafo computacional, tenemos tres tipos de nodos:

- **Nodos de entrada**, en amarillo, representan los puntos de entrada pertenecientes al conjunto de entrenamiento.
- **Nodos de parámetros**, en violeta, corresponden a los parámetros del modelo.
- **Nodos de computación**, en cajas azules, que representan las operaciones intermedias necesarias para hacer una pasada hacia adelante del modelo.

Grafo computacional: Ejemplo

Dado este grafo computacional, es muy sencillo hacer una **pasada hacia adelante**:



Valores iniciales

Ten en cuenta que se ha considerado unos valores para los pesos $w = 2$, $b = 1$. También se ha considerado un punto de entrada $(3, 9)$.

Grafo computacional: Ejemplo

Para realizar una **pasada hacia atrás**, deberíamos de calcular los gradientes de la función de pérdida $\mathcal{L}$ con respecto a cada parámetro de la red (w y b en este caso). Ejemplo de cálculo de $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w}$:

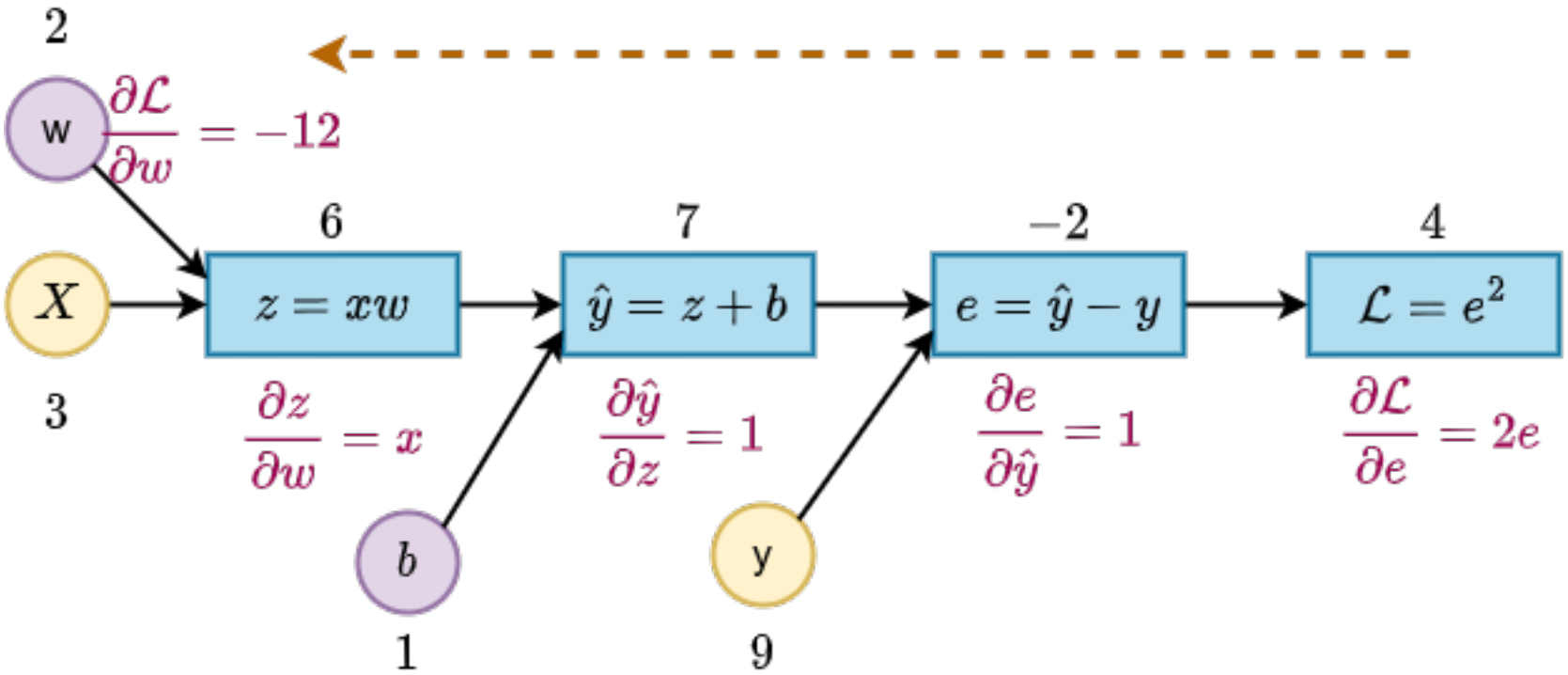
$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial e}\frac{\partial e}{\partial w} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial e}\frac{\partial e}{\partial \hat{y}}\frac{\partial \hat{y}}{\partial w} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial e}\frac{\partial e}{\partial \hat{y}}\frac{\partial \hat{y}}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial w}$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial e} = 2e;\ \frac{\partial e}{\partial \hat{y}} = 1;\ \frac{\partial \hat{y}}{\partial z} = 1;\ \frac{\partial z}{\partial w} = x = 3$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w} = -12$$

Grafo computacional: Ejemplo

Podemos visualizar la **pasada hacia atrás** gráficamente:



Grafo computacional: Ejemplo

El mismo cálculo se podría hacer para calcular el gradiente de b, $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial b}$:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial b} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial e}\frac{\partial e}{\partial b} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial e}\frac{\partial e}{\partial \hat{y}}\frac{\partial \hat{y}}{\partial b}$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial e} = 2e;\ \frac{\partial e}{\partial \hat{y}} = 1;\ \frac{\partial \hat{y}}{\partial b} = 1;$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial b} = -4$$

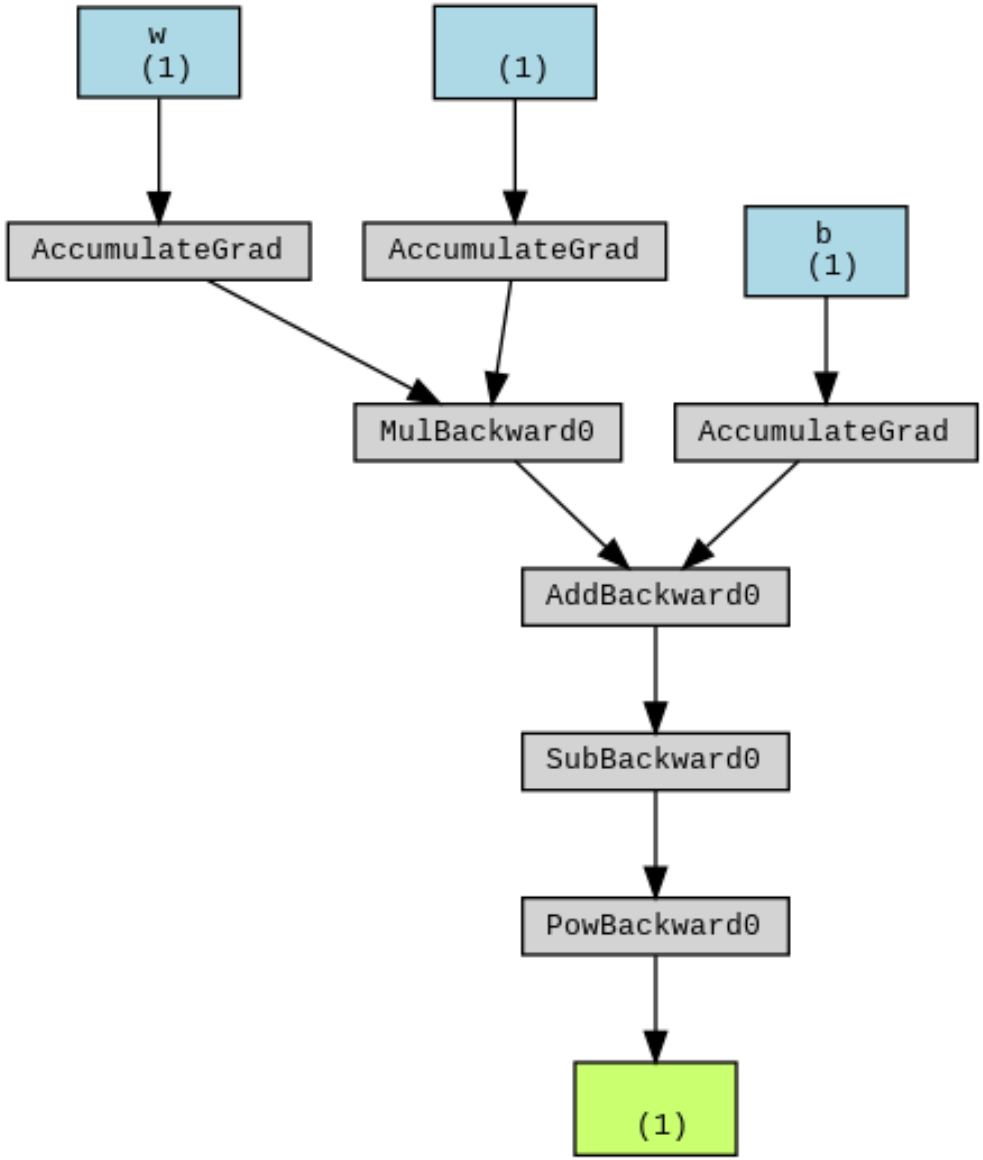
Importante

Como puedes ver en este ejemplo, hay varias derivadas parciales que son **comunes** para diferentes parámetros de la red. Los mecanismos de diferenciación automáticos son capaces de almacenar y **reutilizar** estos valores para evitar calcularlos multiples veces.

Grafo computacional: Ejemplo

Ejemplo de este gráfico computacional generado por **PyTorch** y su sistema de diferenciación automática **AutoGrad**:

```
z = w*x
y_hat = z + b
e = (y_hat - y_true)
l = e ** 2
l.backward()
```



Diferenciación automática

Para que un sistema de diferenciación automática pueda funcionar:

- Los **bloques** de la red tienen que ser **diferenciables**, incluida la función de pérdida.
- Los **bloques** de la red deben estar **implementados** en el framework correspondiente.
- Los frameworks de aprendizaje profundo proveen maneras de **extenderlos** creando nuevos bloques para los que nosotros mismos indicamos la manera de derivarlos.

Nota

Los frameworks de aprendizaje profundo proveen los bloques más comunes para la creación de redes neuronales, incluyendo funciones de pérdida, funciones de activación, etc. Esto hace que **la diferenciación sea un aspecto transparente** para los usuarios.

Redes DAG

Redes DAG

Hasta ahora todos los conceptos que hemos visto se basan en **redes totalmente conectadas**. Realmente muchas de las arquitecturas de redes neuronales van más allá de esta arquitectura, utilizando por ejemplo:

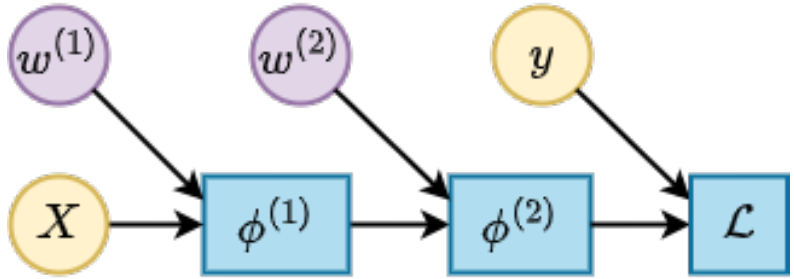
- **Conexiones no lineales**, es decir, cuando la salida de una capa no se conecta necesariamente con la entrada de la siguiente (un ejemplo son las ResNet vistas anteriormente).
- **Reutilización de pesos** en diferentes partes de la red. Por ejemplo en las redes convolucionales.

Redes DAG

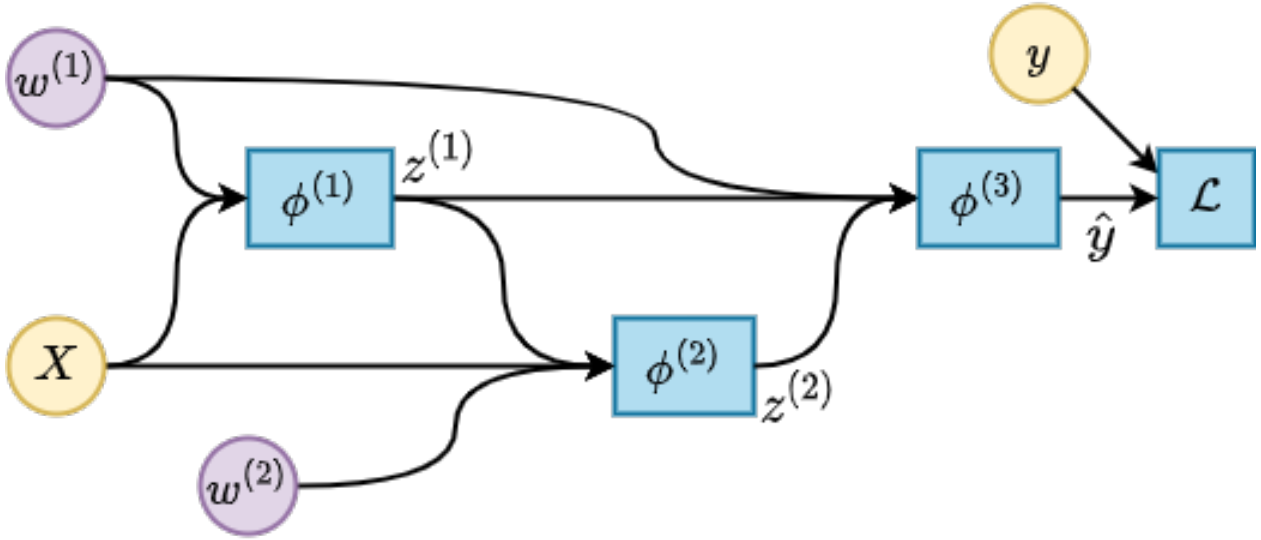
Las redes DAG (Grafo Dirigido Acíclico) permiten generalizar el concepto de red totalmente conectada para permitir arquitecturas más complejas.

Redes DAG

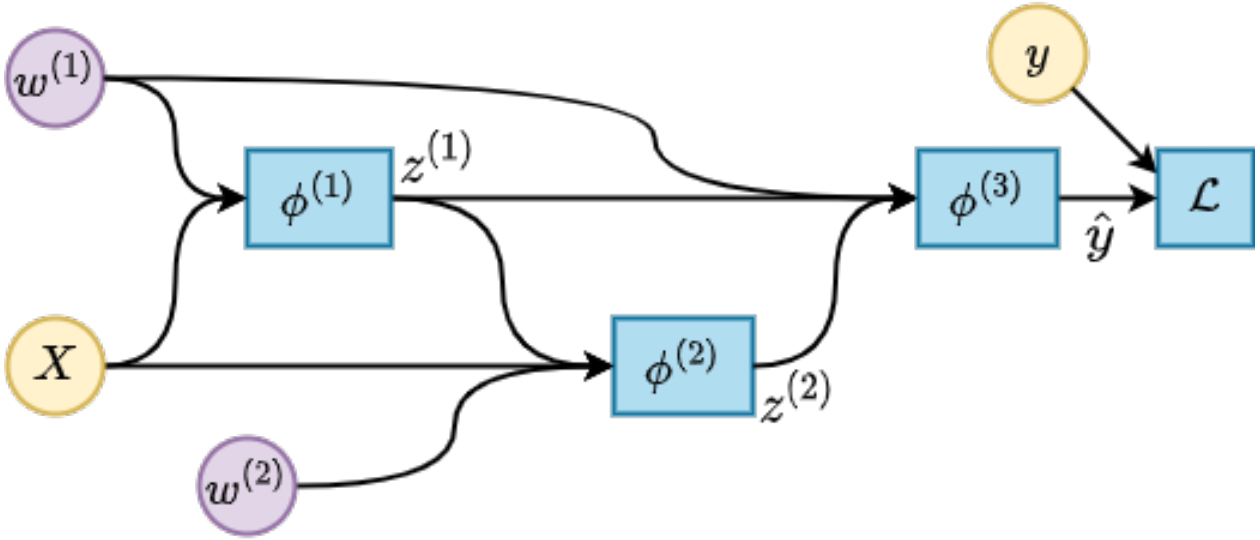
Vamos a simplificar el grafo computacional de una red totalmente conectada con dos capas:



Con las redes DAG, podemos representar otros tipos de arquitecturas:



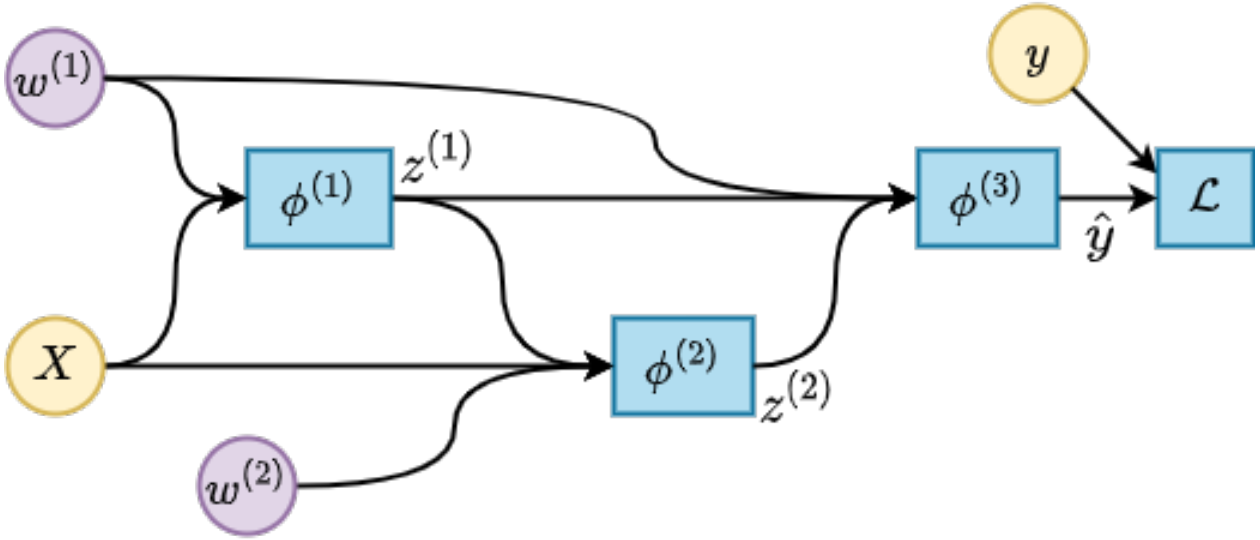
Redes DAG: Pasada hacia adelante



Donde:

$$z^{(1)} = \phi^{(1)}(X; w^{(1)}) = w^{(1)}X$$

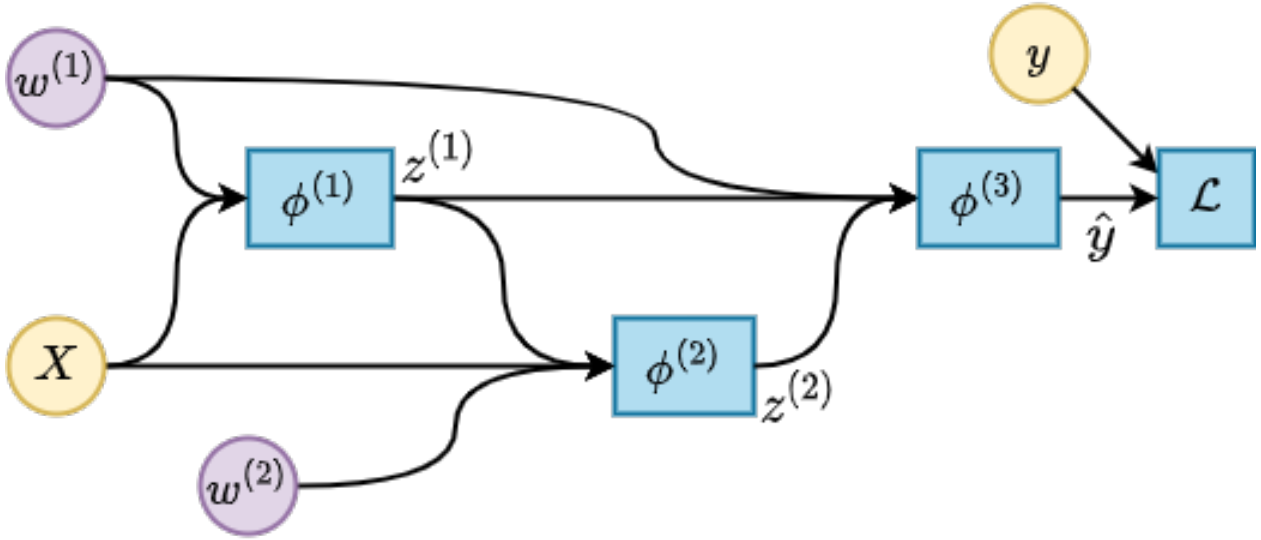
Redes DAG: Pasada hacia adelante



Donde:

$$z^{(1)} = \phi^{(1)}(X; w^{(1)}) = w^{(1)}X$$
$$z^{(2)} = \phi^{(2)}(X, z^{(1)}; w^{(2)}) = w^{(2)}(z^{(1)} + X)$$

Redes DAG: Pasada hacia adelante



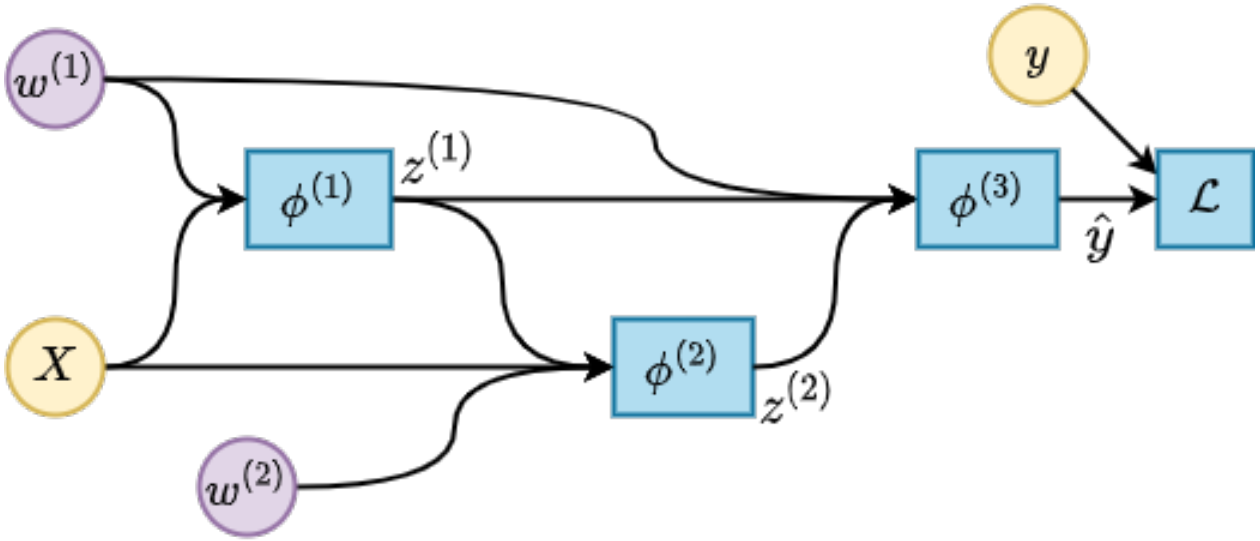
Donde:

$$z^{(1)} = \phi^{(1)}(X; w^{(1)}) = w^{(1)}X$$
$$z^{(2)} = \phi^{(2)}(X, z^{(1)}; w^{(2)}) = w^{(2)}(z^{(1)} + X)$$
$$\hat{y} = \phi^{(3)}(z^{(1)}, z^{(2)}; w^{(1)}) = w^{(1)}(z^{(1)} + z^{(2)})$$

Nota

Ten en cuenta que podríamos haber definido las funciones ϕ de otra manera y obtener un gráfico computacional diferente.

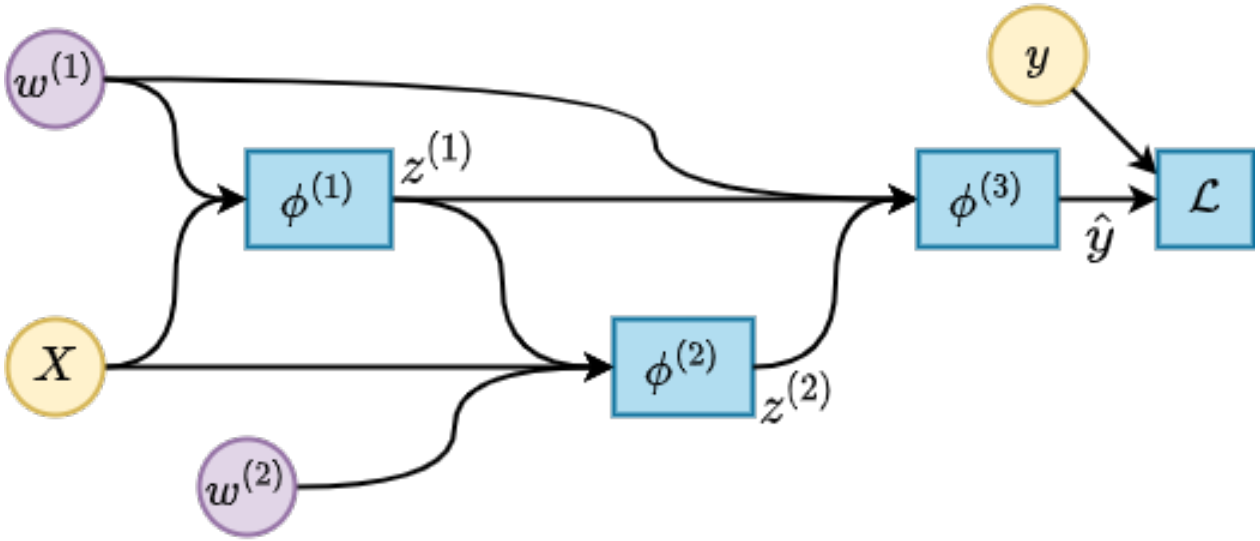
Redes DAG: Pasada hacia atrás



Como siempre, en la **pasada hacia atrás**, estamos interesados en calcular el gradiente, es decir, la derivada parcial la función de pérdida $\mathcal{L}$ con respecto a los pesos:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w^{(1)}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{y}} \frac{\partial \hat{y}}{\partial w^{(1)}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{y}} \left(\frac{\partial \hat{y}}{\partial z^{(1)}} \frac{\partial z^{(1)}}{\partial w^{(1)}} + \frac{\partial \hat{y}}{\partial z^{(2)}} \frac{\partial z^{(2)}}{\partial w^{(1)}} \right)$$

Redes DAG: Pasada hacia atrás

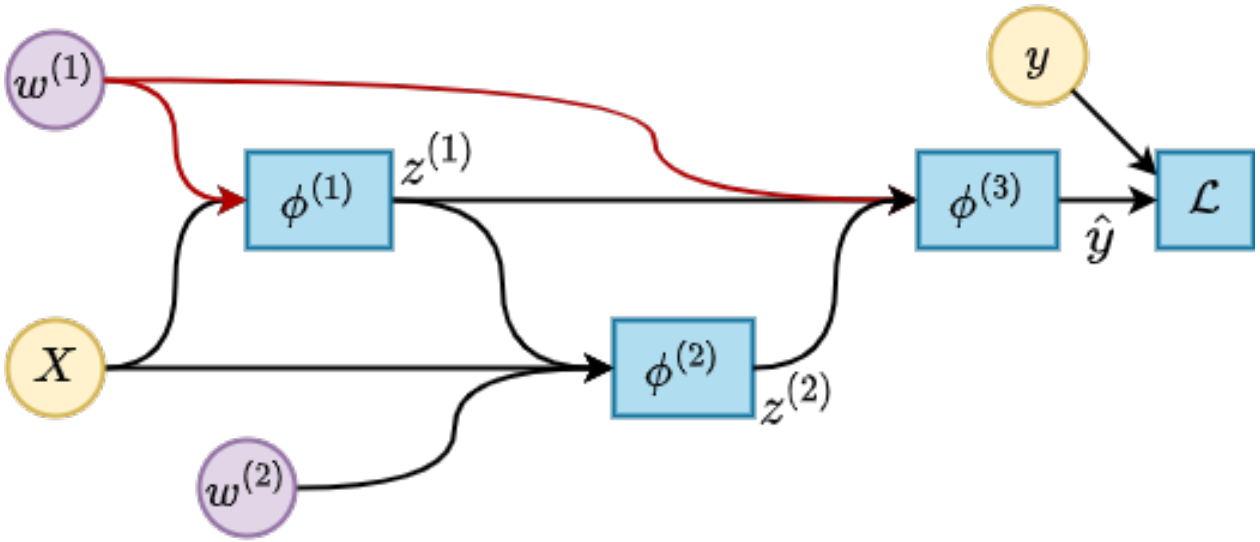


Como siempre, en la **pasada hacia atrás**, estamos interesados en calcular el gradiente, es decir, la derivada parcial la función de pérdida $\mathcal{L}$ con respecto a los pesos:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w^{(1)}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{y}} \frac{\partial \hat{y}}{\partial w^{(1)}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{y}} \left(\frac{\partial \hat{y}}{\partial z^{(1)}} \frac{\partial z^{(1)}}{\partial w^{(1)}} + \frac{\partial \hat{y}}{\partial z^{(2)}} \frac{\partial z^{(2)}}{\partial w^{(1)}} \right)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w^{(2)}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{y}} \frac{\partial \hat{y}}{\partial w^{(2)}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{y}} \frac{\partial \hat{y}}{\partial z^{(2)}} \frac{\partial z^{(2)}}{\partial w^{(2)}}$$

Redes DAG: Reutilización de pesos



En la red anterior podemos ver como el peso $w^{(1)}$ se **reutiliza** en dos partes de la red. Veremos como esto será un procedimiento común en varias arquitecturas que veremos en temas posteriores.

Redes DAG: Grafo computacional

A la derecha se muestra el **gráfico computacional** en PyTorch correspondiente a la red anterior, considerando que la función de pérdida es MSE y tenemos una función de activación sigmoide antes de la última capa.

Nota

Puedes comprobar como los frameworks de aprendizaje profundo permiten definir este tipo de arquitecturas y operar con ellas sin ningún tipo de problema.