2021-2022

Aprendizaje Automático

5. Redes Neuronales Multicapa

Francisco Casacuberta Nolla
(fcn@dsic.upv.es)

Enrique Vidal Ruiz
(evidal@dsic.upv.es)

Departament de Sistemas Informàtics i Computació (DSIC)

Universitat Politècnica de València (UPV)

Septiembre, 2021

Index

Index

Modelo conexionista

- Un conjunto de procesadores elementales densamente interconectados.
- Nombres alternativos:
  - Modelo conexionista.
  - Red neuronal artificial.
  - Procesado distribuido y paralelo.
- Perceptrón multicapa:
  - Modelo conexionista simple.
  - Fronteras de decisión complejas.
  - Optimización no convexa.
  - Entrenamiento de los pesos mediante descenso por gradiente: algoritmo de retropropagación del error.

Introducción: historia (I)

- 1943: McCulloch y Pitt introducen un modelo matemático simple de “neurona”.
- 1949: Hebb propone una regla que modela el aprendizaje en las neuronas. Rochester realiza una simulación en un computador IBM en 1950.
- 1957: *Rosenblatt* introduce *el Perceptrón* como un dispositivo hardware con capacidad de autoaprendizaje y Widrow y Hoff proponen el *Adaline* para la cancelación de ecos en redes telefónicas.
- 1969: *Minsky y Papert* demuestran que un perceptrón solo puede implementar funciones discriminantes lineales y que esta limitación no se puede superar mediante multiples perceptrones organizados en cascada: Para ello sería necesario introducir funciones no-lineales.
- 1970-1975: Diversos autores tratan de desarrollar algoritmos de descenso por gradiente adecuados para multiples perceptrones en cascada con funciones no-lineales. El cálculo de derivadas parciales se muestra esquivo.

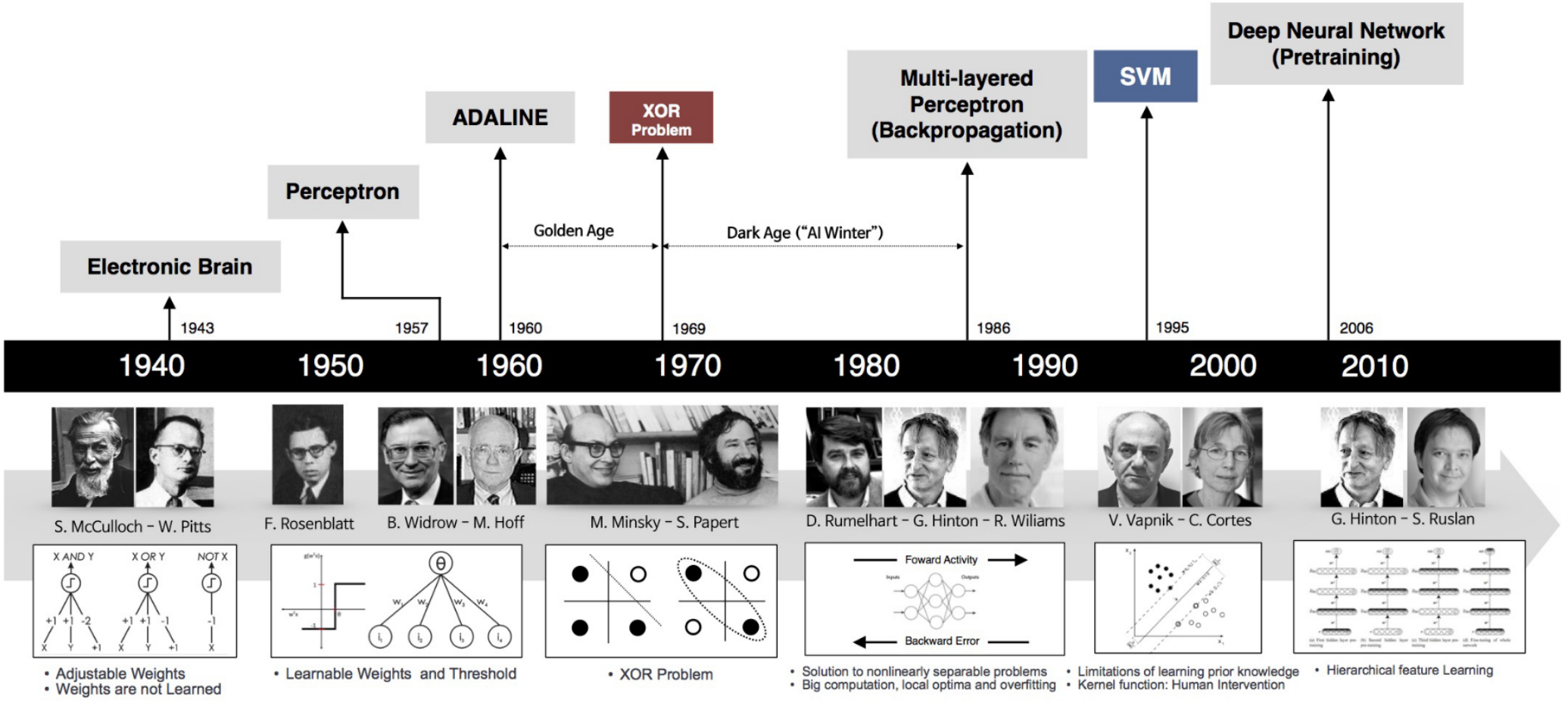
Introducción: historia (II)

- 1986: *Rumelhart, Hinton y Williams* popularizan la técnica de *retropropagación del error*. Se basa en el uso de cierto tipo de funciones no lineales, llamadas "funciones de activación", con las que se simplifica el cálculo de derivadas parciales necesarias para descenso por gradiente. Al parecer, técnicas similares habían sido ya propuestas por *Linnainmaa* en 1970 y *Werbos* en 1974.

- 1996: *Bishop*, *Rippley*, *Ney*, entre otros, dan una interpretación probabilística a las redes neuronales y al algoritmo de retropropagación del error.

- 2006: *Hinton* publica en *Science* un artículo que inagura una nueva tendencia denominada *"redes profundas"*. Posteriormente, en 2015 *LeCun, Bengio y Hinton* publican un artículo sobre estas técnicas en *Nature*. Se desarrollan diversas técnicas que mejoran el uso del algoritmo de retropropagación en redes profundas y en redes recurrentes. Aplicadas con gran éxito en múltiples problemas.

Introducción: historia (III)



Funciones discriminantes lineales y función de activación

- FUNCIONES DISCRIMINANTES LINEALES (FDL)

$$\phi : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R} : \quad \phi(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\theta}) \; = \; \boldsymbol{\theta}^t \boldsymbol{x} \; = \; \sum_{i=0}^{d} \theta_i \; x_i$$

Notación en coordenadas homogéneas:

- $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{d+1}, \qquad \boldsymbol{x} = x_0, x_1, \ldots, x_d \,, \qquad x_0 \stackrel{\text{def}}{=} 1$
- $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^{D}, \qquad \boldsymbol{\theta} = \theta_0, \theta_1, \ldots, \theta_d \qquad D \stackrel{\text{def}}{=} d + 1$

La componente 0 del *vector de pesos* es el *umbral*, $\theta_0 \in \mathbb{R}$

Funciones discriminantes lineales y función de activación

- FUNCIONES DISCRIMINANTES LINEALES (FDL)

$$\phi : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R} : \quad \phi(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\theta}) \; = \; \boldsymbol{\theta}^t \boldsymbol{x} \; = \; \sum_{i=0}^{d} \theta_i \; x_i$$

Notación en coordenadas homogéneas:

- $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{d+1}, \qquad \boldsymbol{x} = x_0, x_1, \ldots, x_d \,, \qquad x_0 \stackrel{\text{def}}{=} 1$
- $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^{D}, \qquad \boldsymbol{\theta} = \theta_0, \theta_1, \ldots, \theta_d \qquad D \stackrel{\text{def}}{=} d + 1$

La componente 0 del *vector de pesos* es el *umbral*, $\theta_0 \in \mathbb{R}$

- FUNCIONES DISCRIMINANTES LINEALES CON ACTIVACIÓN (FDLA)

$$g \circ \phi : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R} : \quad g \circ \phi(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\theta}) \; = \; g(\boldsymbol{\theta}^t \boldsymbol{x})$$

$g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ es una función de activación [†]

[†] también denominada función logística y a la FDLA función discriminante lineal logística.

Funciones de activación y sus derivadas

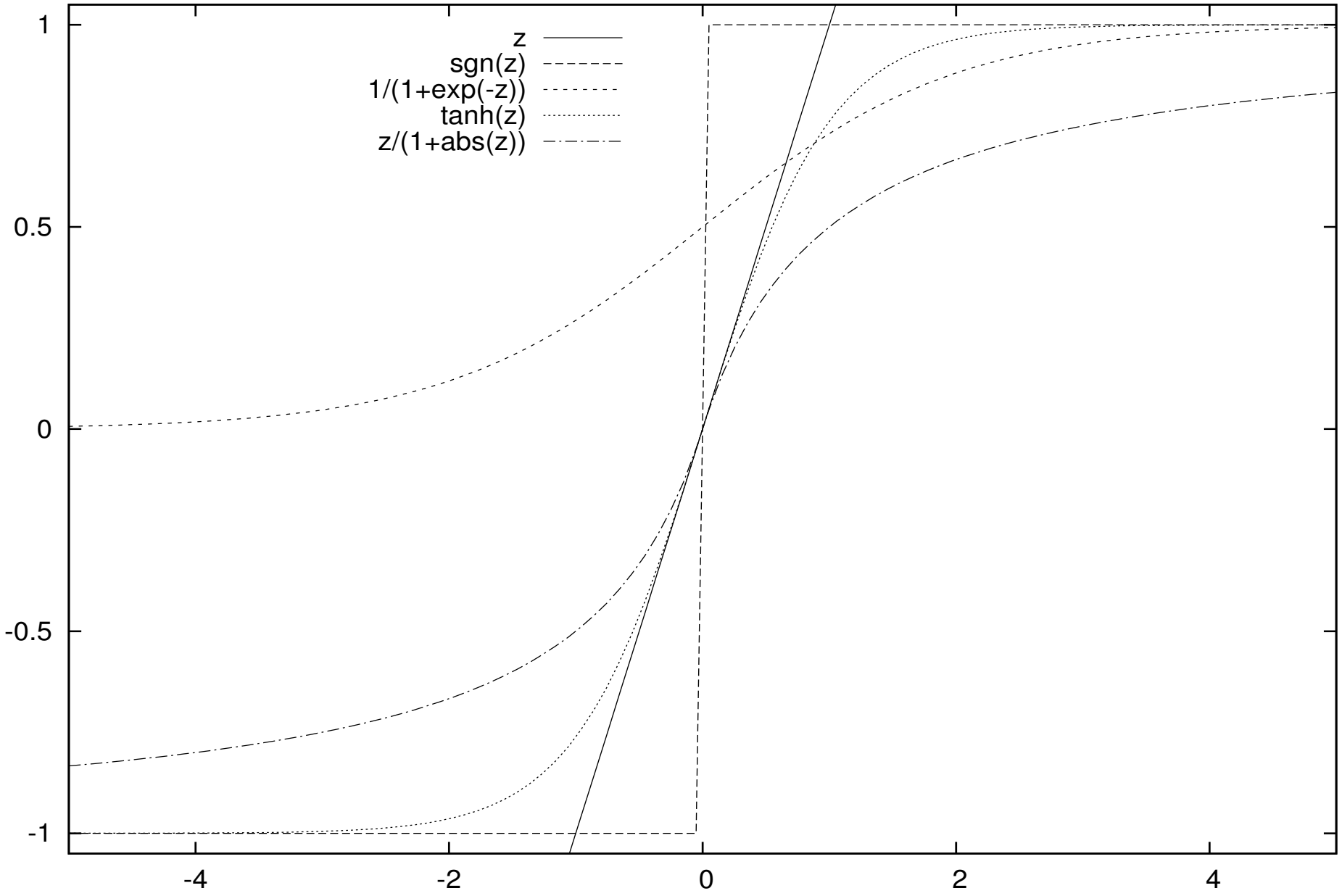
Sea $g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ y $z \in \mathbb{R}$:

- LINEAL: $g_L(z) = z \;\Rightarrow\; g'_L(z) = \dfrac{d\, g_L}{d\, z} \;=\; 1$
- RELU (rectified linear unit): $g_U(z) = \max(0, z) \;\Rightarrow\; g'_U(z) = \begin{cases} 0 & \text{si } \; z < 0 \\ 1 & \text{si } \; z > 0 \\ \text{no definida} & \text{si } \; z = 0 \end{cases}$
- ESCALÓN†: $g_E(z) = \operatorname{sgn}(z) \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} +1 & \text{si } z > 0 \\ -1 & \text{si } z < 0 \end{cases} \Rightarrow\; g'_E(z) = \begin{cases} \text{no definida} & \text{si } z = 0 \\ 0 & \text{si } z \neq 0 \end{cases}$
- SIGMOID: $g_S(z) = \dfrac{1}{1 + \exp(-z)} \;\Rightarrow\; g'_S(z) = g_S(z)\,(1 - g_S(z))$
- TANGENTE HIPERBÓLICA: $g_T(z) = \dfrac{\exp(z) - \exp(-z)}{\exp(z) + \exp(-z)} \;\Rightarrow\; g'_T(z) = 1 - (g_T(z))^2$
- RÁPIDA: $g_F(z) = \dfrac{z}{1 + |z|} \;\Rightarrow\; g'_F(z) = \dfrac{1}{(1 + |z|)^2} = \left(\dfrac{g_F(z)}{z}\right)^2$
- SOFTMAX: Para $z_1, \ldots, z_n \in \mathbb{R}$, $g_M(z_i) = \dfrac{\exp(z_i)}{\sum_j \exp(z_j)} \;\Rightarrow\; g'_M(z_i) = g_M(z_i)\,(1 - g_M(z_i))$

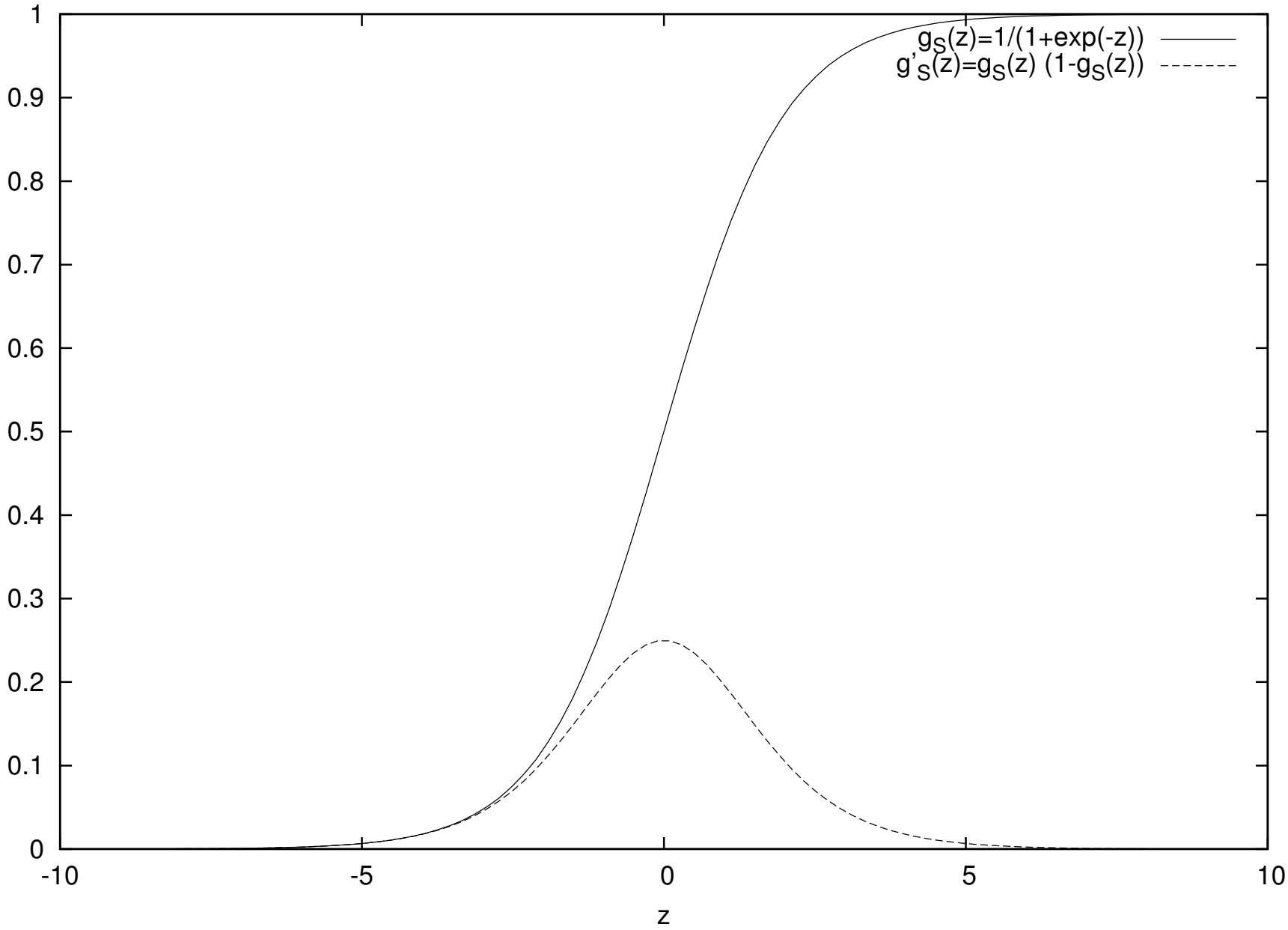
Ejercicios: Demostrar $g'_S(z) = g_S(z)\,(1 - g_S(z))\,, \;\; g'_T(z) = 2g_S(2z) - 1 \;\; \forall z \in \mathbb{R}$

† sgn es la *función signo*

Funciones de activación

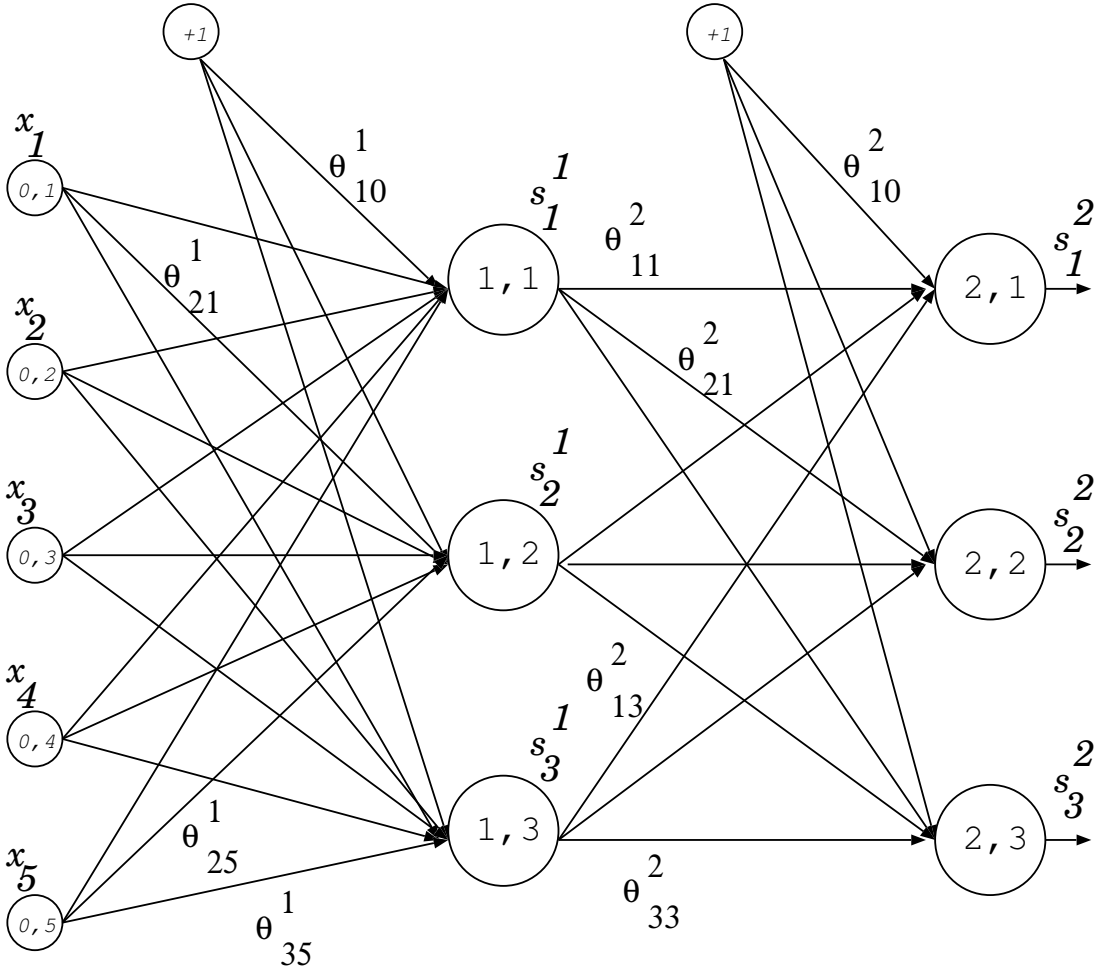


Derivada de la función de activación sigmoid



Un perceptrón de dos capas: ejemplo y notación

Topología



Dinámica

Capa de entrada

$1 \leq i \leq M_0 \equiv d = 5$

$x_i \in \mathbb{R}$

Capa oculta

$1 \leq i \leq M_1 = 3$

$$s_i^1(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\Theta}) = g(\sum_{j=0}^{M_0} \theta_{ij}^1 \; x_j)$$

Capa de salida

$1 \leq i \leq M_2 = 3$

$$s_i^2(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\Theta}) = g(\sum_{j=0}^{M_1} \theta_{ij}^2 \; s_j^1(\boldsymbol{x}))$$

Perceptrón de dos capas

- *Un perceptrón de dos capas* consiste en una combinación de FDLA agrupadas en 2 capas de tallas M_1 (capa *oculta*) y M_2 (capa de salida), más una capa de entradas de talla $M_0 = d$ (por simplicidad no se contabilizan los umbrales):

$$s_i^2(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\Theta}) = g(\sum_{j=0}^{M_1} \theta_{ij}^2 \; s_j^1(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\Theta})) = g(\sum_{j=0}^{M_1} \theta_{ij}^2 \; g(\sum_{j'=0}^{M_0} \theta_{jj'}^1 \; x_{j'})) \quad 1 \leq i \leq M_2$$

  Los parámetros son $\boldsymbol{\Theta} = [\theta_{10}^1, \ldots, \theta_{M_1 M_0}^1, \theta_{10}^2, \ldots, \theta_{M_2 M_1}^2] \in \mathbb{R}^D$

- *Problema*: Dado un conjunto de entrenamiento $S = \{(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{t}_1), \ldots, (\boldsymbol{x}_N, \boldsymbol{t}_N)\}$, con $\boldsymbol{x}_n \in \mathbb{R}^{M_0}$, $\boldsymbol{t}_n \in \mathbb{R}^{M_2}$, encontrar $\boldsymbol{\Theta}$ tal que $\boldsymbol{s}^2(\boldsymbol{x}_n;\boldsymbol{\Theta})$ aproxime lo mejor posible a $\boldsymbol{t}_n \; \forall n, 1 \leq n \leq N$.

- *En clasificación*: $M_2 \equiv C$ y las etiquetas $\boldsymbol{t}_n$ para $1 \leq n \leq N$ son de la forma

$$1 \leq c \leq C \quad t_{nc} = \begin{cases} 1 & \boldsymbol{x}_n \text{ es de la clase } c \\ 0 \;\; (\text{o } -1) & \boldsymbol{x}_n \text{ no es de la clase } c \end{cases}$$

Simplificaciones de notación: $s_i^k(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\Theta}) \equiv s_i^k(\boldsymbol{x}) \equiv s_i^k \;\; \forall k, i$

El perceptrón multicapa y las funciones de activación

- Un perceptrón multicapa de dos capas define una función $\mathbb{R}^{M_0} \to \mathbb{R}^{M_2}$:

$$s_i^2(\boldsymbol{x}) = g(\sum_{j=0}^{M_1} \theta_{ij}^2 \; s_j^1(\boldsymbol{x})) = g(\sum_{j=0}^{M_1} \theta_{ij}^2 \; g(\sum_{j'=0}^{M_0} \theta_{jj'}^1 \; x_{j'})) \;\; \text{para } 1 \leq i \leq M_2$$

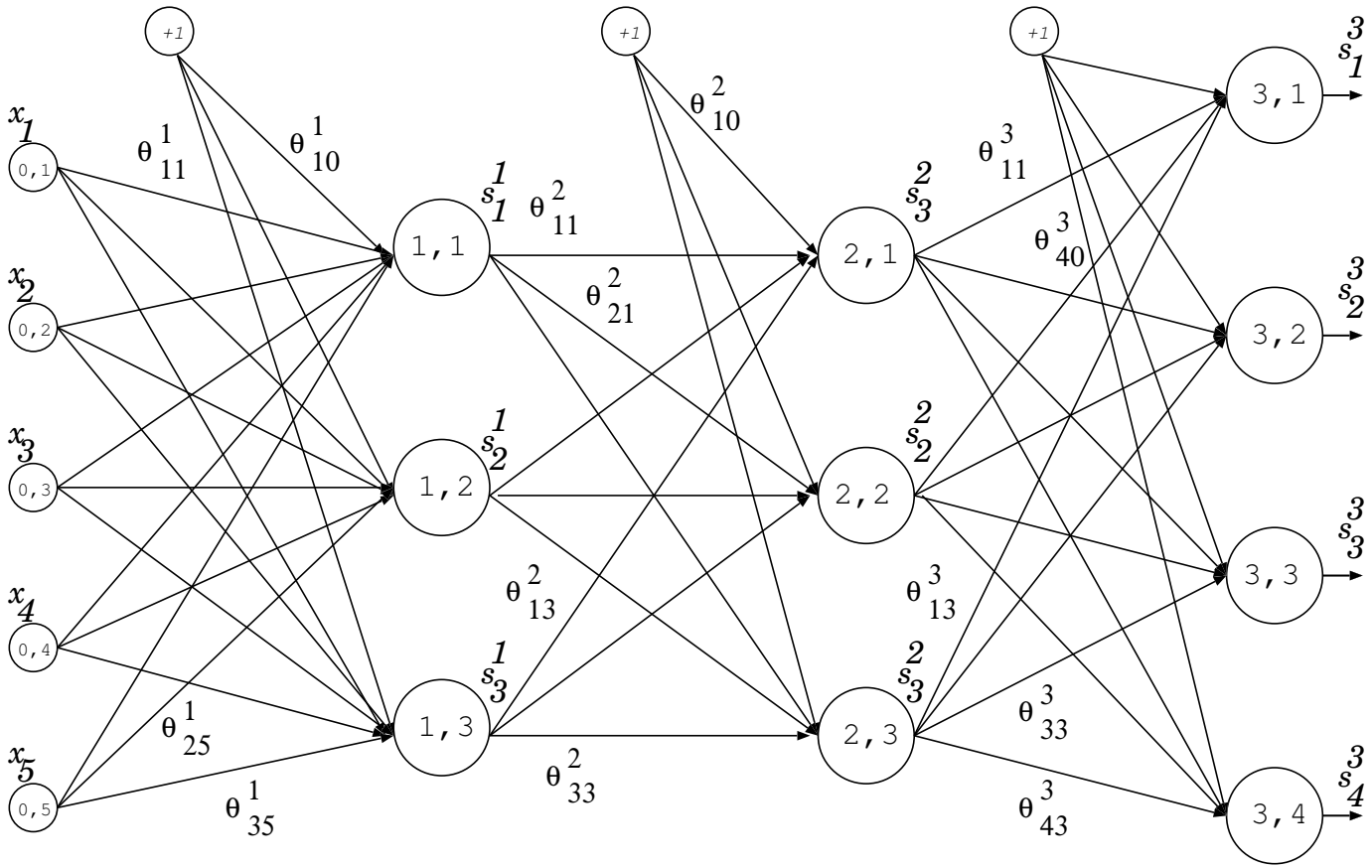
- Si todas las funciones de activación son lineales, un perceptrón multicapa define UNA FUNCIÓN DISCRIMINANTE LINEAL, $\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}) = (\phi_1(\boldsymbol{x}), \ldots, \phi_{M_2}(\boldsymbol{x}))^t$:

$$\phi_i(\boldsymbol{x}) \equiv s_i^2(\boldsymbol{x}) \;\; = \sum_{j=0}^{M_1} \sum_{j'=0}^{M_0} \theta_{ij}^2 \theta_{jj'}^1 \, x_{j'} \;\; = \sum_{j'=0}^{M_0} (\sum_{j=0}^{M_1} \theta_{ij}^2 \theta_{jj'}^1) \, x_{j'} \;\; = \sum_{j'=0}^{M_0} \theta_{ij'} \; x_{j'}$$

- Si al menos una función de activación no es lineal (y, sin pérdida de generalidad, todas las funciones de activación de la capa de salida son lineales) un perceptrón multicapa define UNA FUNCIÓN DISCRIMINANTE LINEAL GENERALIZADA:

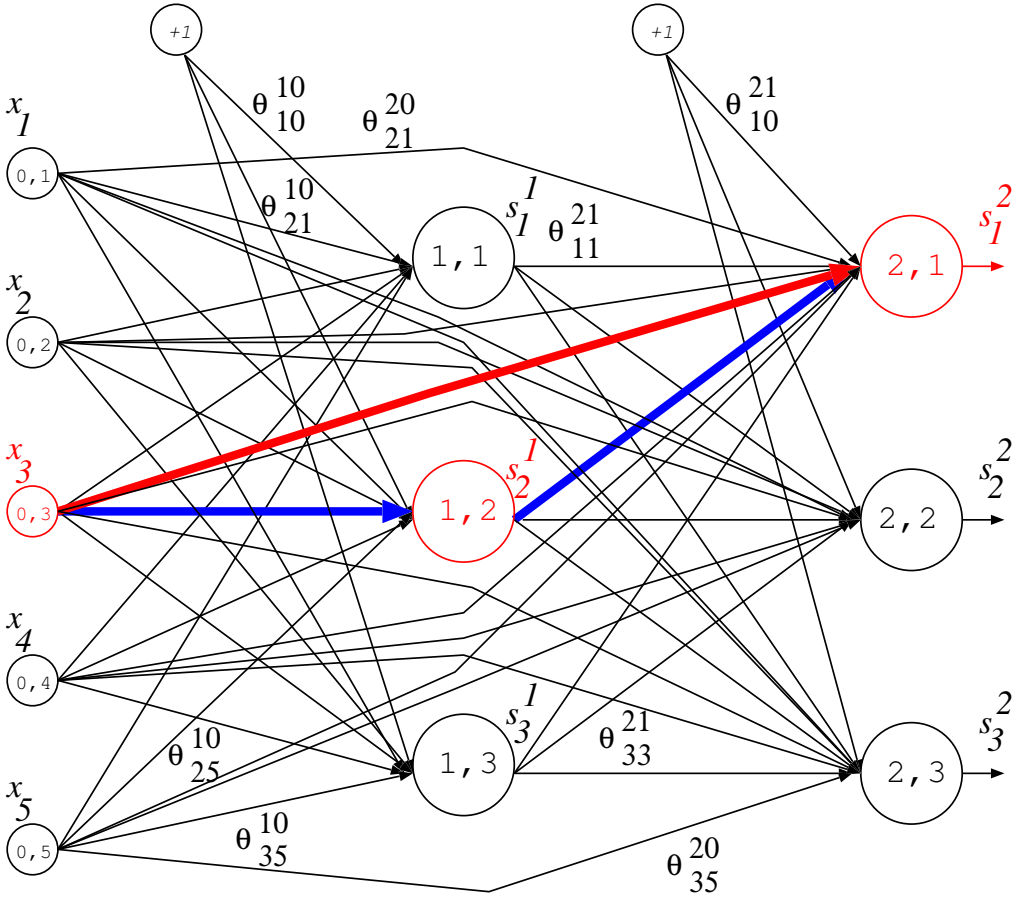
$$\phi_i(\boldsymbol{x}) \equiv s_i^2(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=0}^{M_1} \theta_{ij}^2 \; g(\sum_{j'=0}^{M_0} \theta_{jj'}^1 \; x_{j'}) = \sum_{j=0}^{M_1} \theta_{ij}^2 \; \psi_j(\boldsymbol{x}) \;\; \text{para } 1 \leq i \leq M_2$$

Un perceptrón de tres capas



- Primera capa oculta: $s_i^1 = g(\sum_{j=0}^{M_0} \theta_{ij}^1 \; x_j)$ para $1 \leq i \leq M_1$
- Segunda capa oculta: $s_i^2 = g(\sum_{j=0}^{M_1} \theta_{ij}^2 \; s_j^1)$ para $1 \leq i \leq M_2$
- Capa de salida: $s_i^3 = g(\sum_{j=0}^{M_2} \theta_{ij}^3 \; s_j^2)$ para $1 \leq i \leq M_3$

Redes hacia adelante de dos capas



- Primera capa oculta: $s_i^1 = g(\sum_{j=0}^{M_0} \theta_{ij}^{1,0}\ x_j)$ para $1 \leq i \leq M_1$
- Capa de salida: $s_i^2 = g(\sum_{j=0}^{M_1} \theta_{ij}^{2,1}\ s_j^1 + \sum_{j=0}^{M_0} \theta_{ij}^{2,0}\ x_j)$ para $1 \leq i \leq M_2$

El perceptrón multicapa es un caso particular

El perceptrón multicapa como regresor

Regresión de $\mathbb{R}^d$ a $\mathbb{R}^{d'}$

(p.e. un PM de dos capas con $d \equiv M_0$ y $d' \equiv M_2$)

$$\boldsymbol{f} : \mathbb{R}^{M_0} \rightarrow \mathbb{R}^{M_2} : f_i(\boldsymbol{x}) \equiv s_i^2(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=0}^{M_1} \theta_{kj}^2 \; g(\sum_{j'=0}^{M_0} \theta_{jj'}^1 \; x_{j'}) \quad 1 \leq i \leq M_2$$

- Cualquier función se puede aproximar con precisión arbitraria mediante un perceptrón de *una* o más capas ocultas con un número de nodos suficientemente grande
- En general, para alcanzar una precisión dada, el número de nodos necesarios suele ser *mucho menor* si el número de capas ocultas es mayor o igual que *dos*

El perceptrón multicapa como clasificador

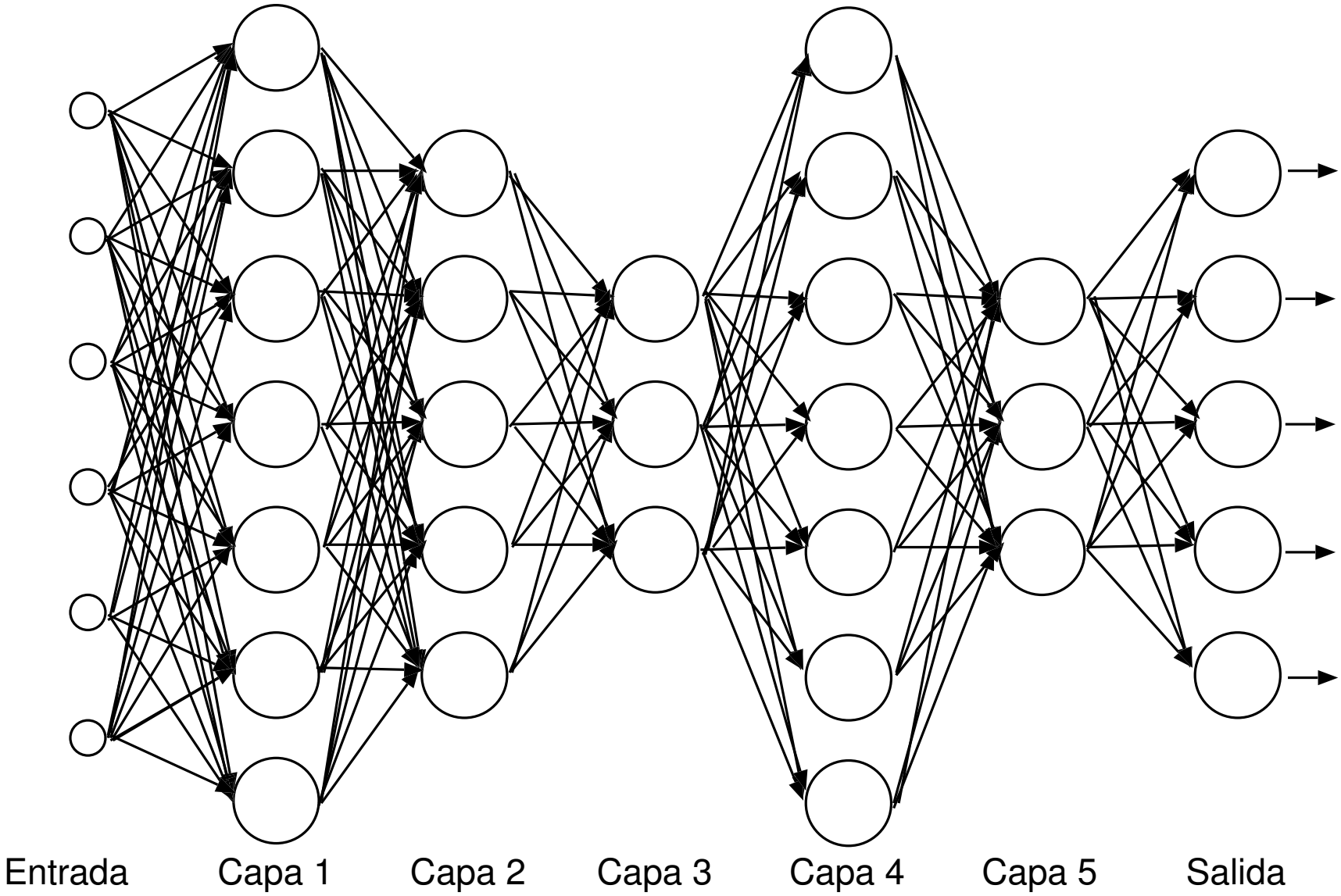
Clasificación en C clases de puntos de $\mathbb{R}^d$ (PM con $M_0 \equiv d$, $M_2 \equiv C$)

$$f : \mathbb{R}^d \to \{1, \ldots, C\} : f(\boldsymbol{x}) = \underset{1 \leq c \leq C}{\arg\max}\, \phi_c(\boldsymbol{x}) = \underset{1 \leq c \leq M_2}{\arg\max}\, s_c^2(\boldsymbol{x})$$

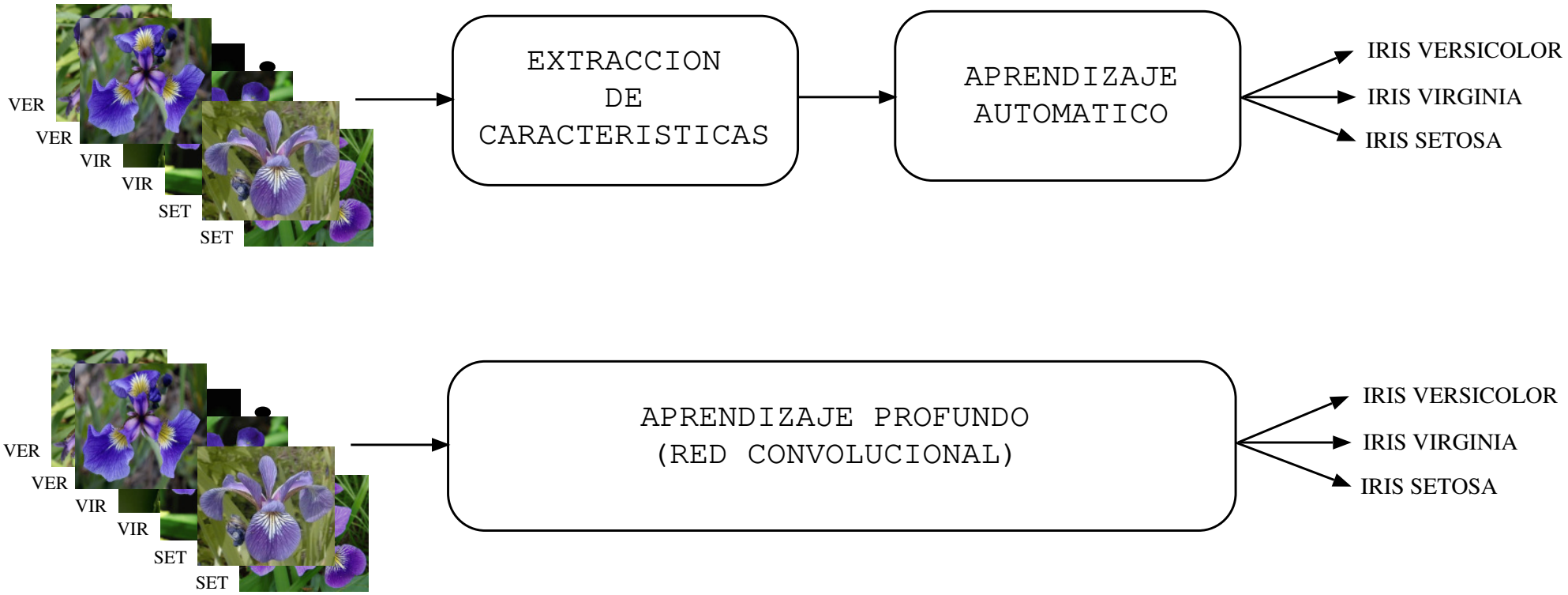
- Si un conjunto de entrenamiento es linealmente separable existe un perceptrón sin capas ocultas que lo clasifica correctamente.
- Un PM con *una* capa oculta de $N - 1$ nodos puede clasificar correctamente las muestras de cualquier conjunto de entrenamiento de talla N. ¿Con qué poder de generalización?.
- Cualquier frontera de decisión basada en trozos de hiperplanos puede obtenerse mediante un PM con *una* capa oculta y un número de nodos adecuado [Huang & Lippmann, 1988], [Huang, Chen & Babri, 2000].
- En general, el número de nodos necesarios para aproximar una frontera dada suele ser *mucho menor* si el número de capas ocultas es mayor o igual que *dos*.

Index

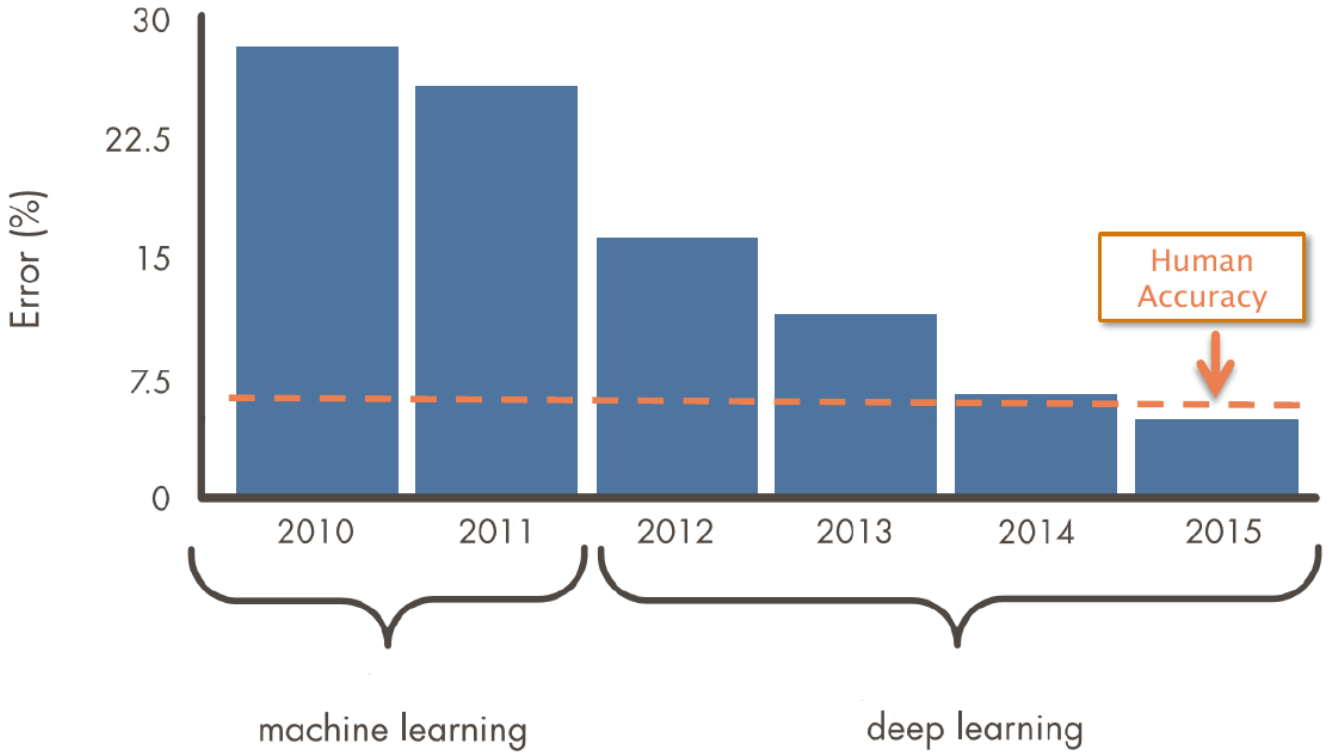
Concepto de red profunda



Aprendizaje profundo [Daly 2017]

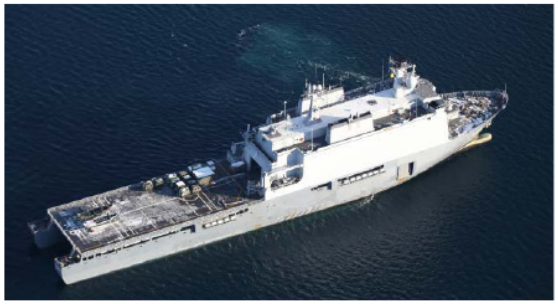


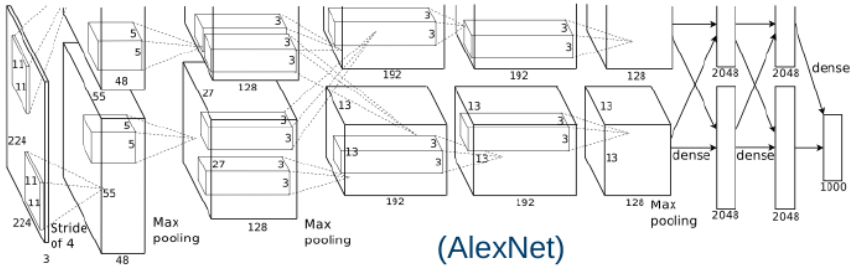
Aprendizaje profundo [Daly 2017]



Source: ILSVRC Top-5 Error on ImageNet

Aprendizaje profundo [Dyrdal 2019]





«Ship»

Millions of images

Millions of parameters

Thousands of classes

Index

Aprendizaje de los pesos de un perceptrón multicapa

PROBLEMA (REGRESIÓN): dada la topología de un perceptrón multicapa con L capas y un conjunto de entrenamiento:

$$S = \{(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{t}_1), \ldots, (\boldsymbol{x}_N, \boldsymbol{t}_N)\}, \quad \boldsymbol{x}_n \in \mathbb{R}^{M_0}, \ \boldsymbol{t}_n \in \mathbb{R}^{M_L}$$

obtener $\boldsymbol{\Theta}$ que minimice el error cuadrático medio:

$$q_S(\boldsymbol{\Theta}) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} q_n(\boldsymbol{\Theta}); \qquad q_n(\boldsymbol{\Theta}) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{M_L}\left(t_{ni} - s_i^L(\boldsymbol{x}_n;\boldsymbol{\Theta})\right)^2$$

SOLUCIÓN: descenso por gradiente ("algoritmo BACKPROP")

$$\Delta\theta_{ij}^l = -\rho\,\frac{\partial q_S(\boldsymbol{\Theta})}{\partial\theta_{ij}^l} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} -\rho\,\frac{\partial q_n(\boldsymbol{\Theta})}{\partial\theta_{ij}^l} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\Delta_n\theta_{ij}^l$$

calcular $\Delta_n\theta_{ij}^l \stackrel{\text{def}}{=} -\rho\,\dfrac{\partial q_n(\boldsymbol{\Theta})}{\partial\theta_{ij}^l}$, $1 \le i \le M_l,\ 0 \le j \le M_{l-1},\ 1 \le l \le L,\ 1 \le n \le N$

Para simplificar, pero sin pérdida de generalidad, en lo que sigue se asume $L = 2$.

BackProp específico para clasificación

- En problemas de clasificación se suele utilizar la función de activación *softmax* en la capa de salida. En este caso, las salidas de la red pueden considerarse como aproximaciones a las probabilidades a posteriori de clase.
- Dado un conjunto de entrenamiento $S = \{(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{t}_1), \ldots, (\boldsymbol{x}_N, \boldsymbol{t}_N)\}$, con $\boldsymbol{x}_n \in \mathbb{R}^{M_0}$, $\boldsymbol{t}_n \in \{0,1\}^{M_2}$, $(M_2 \equiv C)$, esto permite establecer como criterio de optimización, alternativo al error cuadrático, la entropía cruzada:

$$q_S(\boldsymbol{\Theta}) = -\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\sum_{i=1}^{M_2} t_{ni}\ \log s_i^2(\boldsymbol{x}_n;\boldsymbol{\Theta})$$

- *Problema de entrenamiento*: encontrar $\boldsymbol{\Theta}$ tal que la entropía cruzada sea mínima.

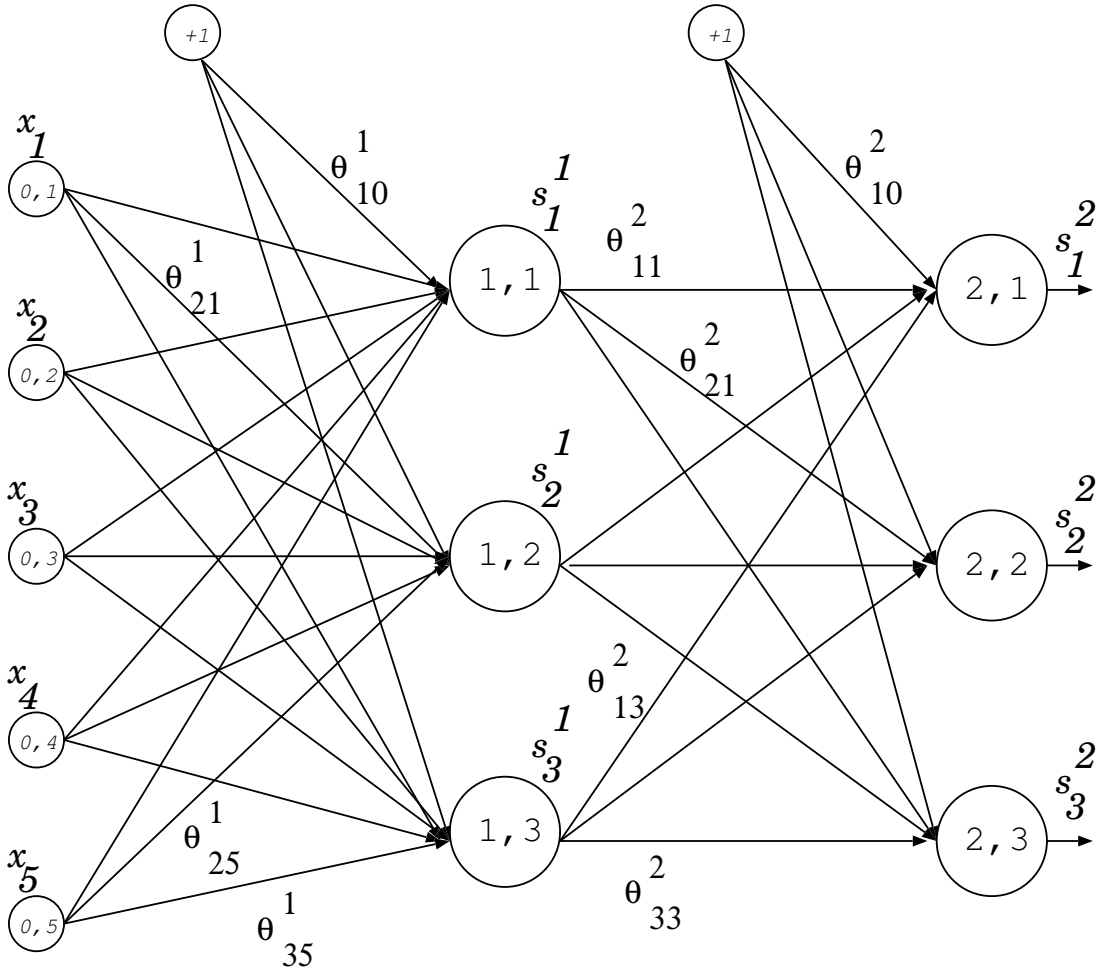
  Solución: DESCENSO POR GRADIENTE:

$$\Delta\theta_{ij}^l = -\rho\,\frac{\partial q_S(\boldsymbol{\Theta})}{\partial\theta_{ij}^l} \qquad 1 \le l \le 2,\ \ 1 \le i \le M_l,\ \ 0 \le j \le M_{l-1}$$

- El algoritmo basado en la minimización de la entropía cruzada suele producir entrenamientos más rápidos y mejores generalizaciones (Bishop 2006)

Ejercicio: Obtener las ecuaciones de actualización para la minimización de la entropía cruzada.

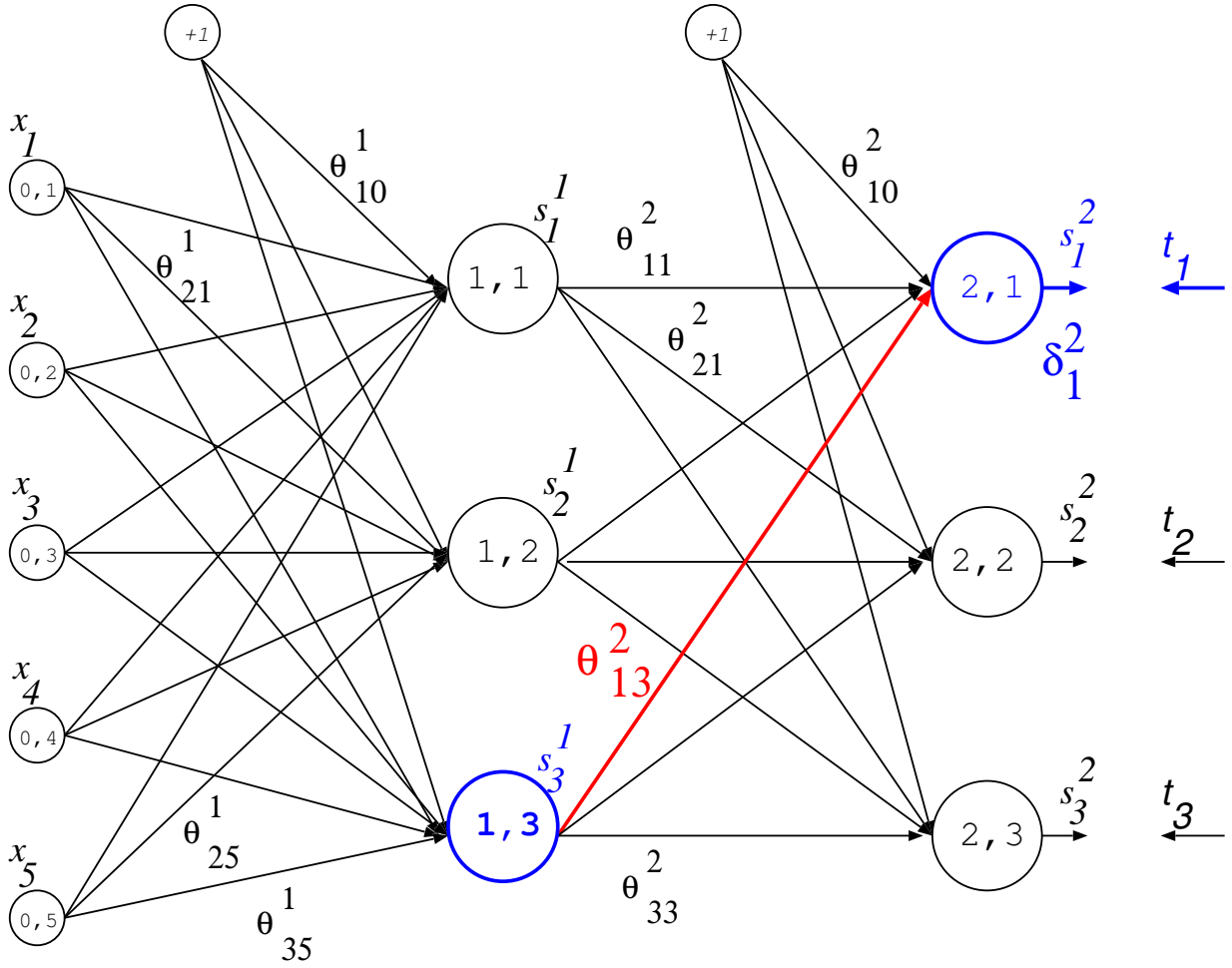
Retropropagación del error (BackProp): cálculo hacia adelante



$$s_i^1(\boldsymbol{x}) = g(\phi_i^1) \; = g(\sum_{j=0}^{M_0} \theta_{ij}^1 \, x_j) \;\; 1 \leq i \leq M_1; \quad s_j^2 = g(\phi_j^2) = g(\sum_{k=0}^{M_1} \theta_{jk}^2 \; s_k^1(\boldsymbol{x})), \;\; 1 \leq j \leq M_2$$

(para una muestra de entrenamiento genérica $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{t})$, y $M_0 = 5, M_1 = 3, M_2 = 3$)

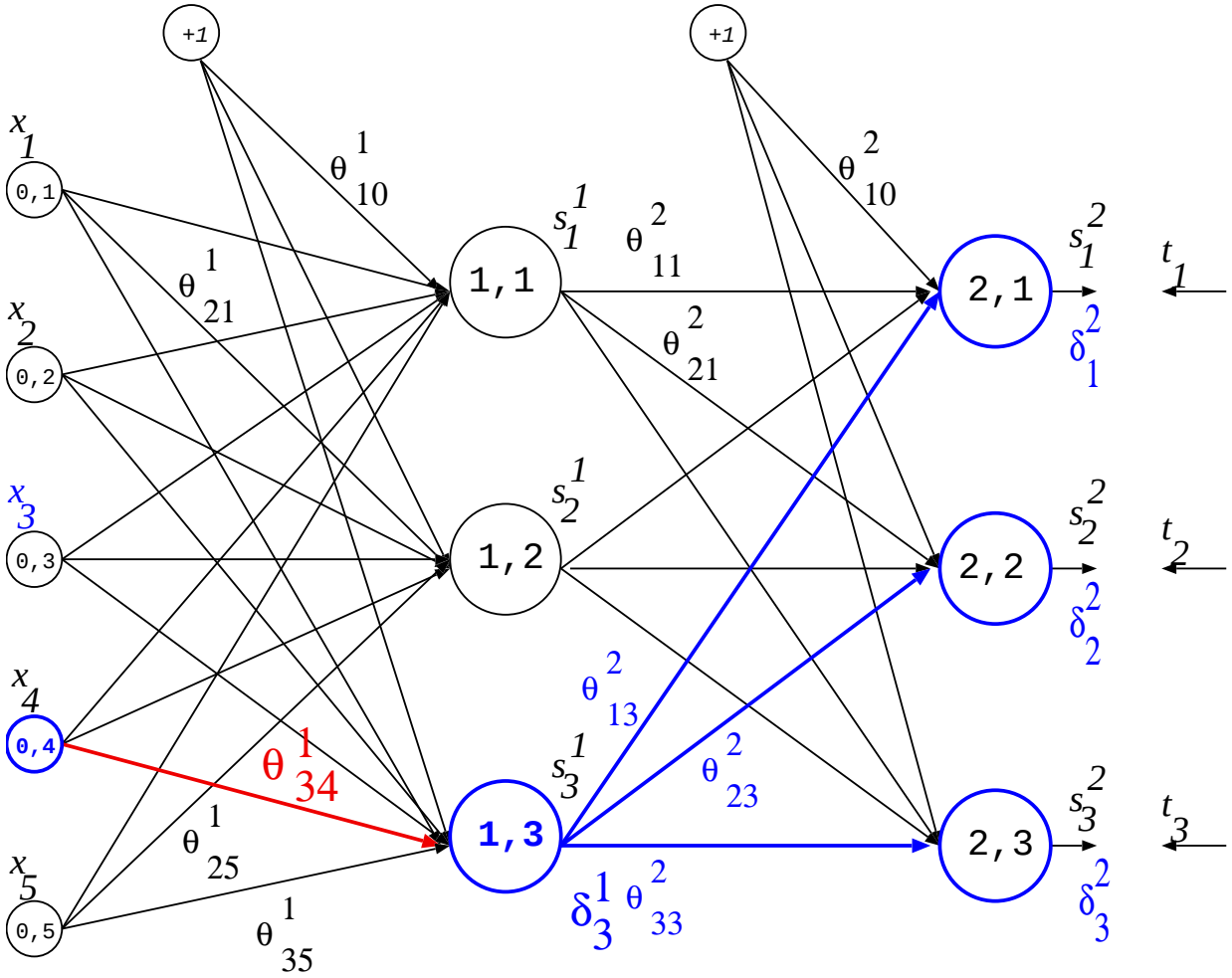
BackProp: ilustración de actualización pesos de la capa de salida



$$\Delta\theta^2_{1\,3} \;=\; \rho\;\delta^2_1\;s^1_3 \;=\; \rho\;(t_1 - s^2_1)\;g'(\phi^2_1)s^1_3$$

(para la muestra $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{t})$)

BackProp: ilustración de actualización pesos de la capa oculta



$$\Delta\theta^1_{3\,4} \;=\; \rho\;\delta^1_3\;x_4 \;=\; \rho\;\left(g'(\phi^1_3)\sum_{r=1}^{M_2}\delta^2_r\,\theta^2_{r3}\right)\;x_4$$

(para la muestra $(\boldsymbol{x},\boldsymbol{t})$)

Regla de la cadena para el cálculo de derivadas

- Función simple de otra función

  $f, g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$:

$$\frac{d\, f(g(x))}{d\, x} = \frac{d\, f}{d\, g}\, \frac{d\, g}{d\, x}$$

- Función de otras dos funciones de n (o más) variables

  $g_1, g_2 : \mathbb{R}^{n \geq 2} \to \mathbb{R}, \quad f : \mathbb{R}^{M \geq 2} \to \mathbb{R}$

$$\frac{\partial f(g_1(x, \dots),\ g_2(x, \dots))}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial g_1}\, \frac{\partial g_1}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial g_2}\, \frac{\partial g_2}{\partial x}$$

- Función de N (o más) funciones de n (o más) variables

  $g_1, \dots, g_N : \mathbb{R}^{n \geq N} \to \mathbb{R}, \quad f : \mathbb{R}^{M \geq N} \to \mathbb{R}$:

$$\frac{\partial f(g_1(x, \dots), \dots, g_N(x, \dots))}{\partial x} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial f}{\partial g_i}\, \frac{\partial g_i}{\partial x}$$

Derivación del algoritmo BackProp (I)

Actualización de los pesos de la capa de salida θ^2_{ij}, para una muestra genérica $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{t}) \equiv (\boldsymbol{x}_n, \boldsymbol{t}_n)$:

$$q(\boldsymbol{\Theta}) \equiv q_n(\boldsymbol{\Theta}) \;=\; \frac{1}{2}\sum_{l=1}^{M_2}\left(t_l - s^2_l\right)^2; \qquad s^2_l = g\left(\phi^2_l\right); \qquad \phi^2_l = \sum_{m=0}^{M_1}\theta^2_{lm}s^1_m$$

$$\frac{\partial q}{\partial \theta^2_{ij}} \;=\; \frac{\partial q}{\partial s^2_i}\,\frac{\partial s^2_i}{\partial \theta^2_{ij}} \;=\; \frac{\partial q}{\partial s^2_i}\;\frac{d\,s^2_i}{d\,\phi^2_i}\;\frac{\partial \phi^2_i}{\partial \theta^2_{ij}}$$

$$\downarrow \qquad \downarrow \qquad \downarrow$$

$$= \;-\left(\left(t_i - s^2_i\right) g'(\phi^2_i)\right) s^1_j \;\overset{\text{def}}{=}\; -\delta^2_i\, s^1_j$$

$$\frac{\partial q}{\partial \theta^2_{ij}} = -\delta^2_i\, s^1_j\,, \qquad \delta^2_i \overset{\text{def}}{=} \left(t_i - s^2_i\right) g'(\phi^2_i)$$

$$\boxed{\Delta_n\theta^2_{ij} = -\rho\,\frac{\partial q_n}{\partial \theta^2_{ij}} \;=\; \rho\,\delta^2_i\, s^1_j \qquad 1 \le i \le M_2,\; 0 \le j \le M_1}$$

Derivación del algoritmo BackProp (II)

Actualización de los pesos de la capa oculta θ^1_{ij}, para una muestra genérica $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{t}) \equiv (\boldsymbol{x}_n, \boldsymbol{t}_n)$:

$$q(\boldsymbol{\Theta}) = \frac{1}{2}\sum_{l=1}^{M_2}(t_l - s^2_l)^2; \quad s^2_l = g(\phi^2_l); \quad \phi^2_l = \sum_{m=0}^{M_1}\theta^2_{lm}\, s^1_m; \quad s^1_m = g(\phi^1_m); \quad \phi^1_m = \sum_{k=0}^{M_0}\theta^1_{mk}x_k$$

$$\frac{\partial q}{\partial \theta^1_{ij}} = \sum_{r=1}^{M_2}\frac{\partial q}{\partial s^2_r}\frac{\partial s^2_r}{\partial \theta^1_{ij}} = \sum_{r=1}^{M_2}\frac{\partial q}{\partial s^2_r}\frac{d\, s^2_r}{d\,\phi^2_r}\frac{\partial \phi^2_r}{\partial s^1_i}\frac{d\, s^1_i}{d\,\phi^1_i}\frac{\partial \phi^1_i}{\partial \theta^1_{ij}}$$

$$= \sum_{r=1}^{M_2} \underset{\downarrow}{-\delta^2_r} \quad \underset{\downarrow}{\theta^2_{ri}} \quad \underset{\downarrow}{g'(\phi^1_i)} \quad \underset{\downarrow}{x_j} = -\left(g'(\phi^1_i)\sum_{r=1}^{M_2}\delta^2_r\,\theta^2_{ri}\right)x_j \overset{\text{def}}{=} -\,\delta^1_i\, x_j$$

$$\frac{\partial q}{\partial \theta^1_{ij}} = -\delta^1_i\, x_j\,, \qquad \delta^1_i \overset{\text{def}}{=} g'(\phi^1_i)\sum_{r=1}^{M_2}\delta^2_r\,\theta^2_{ri}$$

$$\Delta_n\theta^1_{ij} = -\rho\,\frac{\partial q_n}{\partial \theta^1_{ij}} = \rho\,\delta^1_i\, x_j \qquad 1 \le i \le M_1,\ 0 \le j \le M_0$$

Ecuaciones BackProp

- Actualización de los pesos de la capa de salida: $(1 \leq i \leq M_2,\ 0 \leq j \leq M_1)$:

$$\Delta\theta^2_{ij} = -\rho\,\frac{\partial q_S(\boldsymbol{\Theta})}{\partial\theta^2_{ij}} = \frac{\rho}{N}\,\sum_{n=1}^{N}\delta^2_i(\boldsymbol{x}_n)\ s^1_j(\boldsymbol{x}_n)$$

$$\delta^2_i(\boldsymbol{x}_n) = \left(t_{ni} - s^2_i(\boldsymbol{x}_n)\right)\ g'(\phi^2_i(\boldsymbol{x}_n))\ \text{ con }\ \phi^2_i(\boldsymbol{x}_n) = \sum_{j=0}^{M_1}\theta^2_{ij}s^1_j(\boldsymbol{x}_n)$$

- Actualización de los pesos de la capa oculta $(1 \leq i \leq M_1,\ 0 \leq j \leq M_0)$:

$$\Delta\theta^1_{ij} = -\rho\,\frac{\partial q_S(\boldsymbol{\Theta})}{\partial\theta^1_{ij}} = \frac{\rho}{N}\,\sum_{n=1}^{N}\delta^1_i(\boldsymbol{x}_n)\ x_{nj}$$

$$\delta^1_i(\boldsymbol{x}_n) = \left(\sum_{r=1}^{M_2}\delta^2_r(\boldsymbol{x}_n)\ \theta^2_{ri}\right)\ g'(\phi^1_i(\boldsymbol{x}_n))\ \text{ con }\ \phi^1_i(\boldsymbol{x}_n) = \sum_{j=0}^{M_0}\theta^1_{ij}x_{nj}$$

Ecuaciones BackProp para perceptrones de tres capas

- Actualización de los pesos de la capa de salida $(1 \leq i \leq M_3,\ 0 \leq j \leq M_2)$

$$\Delta\theta^3_{ij} = -\rho\,\frac{\partial q_S(\boldsymbol{\Theta})}{\partial \theta^3_{ij}} = \frac{\rho}{N}\sum_{n=1}^{N}\delta^3_i(\boldsymbol{x}_n)\ s^2_j(\boldsymbol{x}_n) \qquad \delta^3_i(\boldsymbol{x}_n) = \Big(t_{ni} - s^3_i(\boldsymbol{x}_n)\Big)\ g'(\phi^3_i(\boldsymbol{x}_n))$$

- Actualización de los pesos de la segunda capa oculta ($1 \leq i \leq M_2,\ 0 \leq j \leq M_1$)

$$\Delta\theta^2_{ij} = -\rho\,\frac{\partial q_S(\boldsymbol{\Theta})}{\partial \theta^2_{ij}} = \frac{\rho}{N}\sum_{n=1}^{N}\delta^2_i(\boldsymbol{x}_n)\ s^1_j(\boldsymbol{x}_n) \qquad \delta^2_i(\boldsymbol{x}_n) = \Big(\sum_{r=1}^{M_3}\delta^3_r(\boldsymbol{x}_n)\ \theta^3_{ri}\Big)\ g'(\phi^2_i(\boldsymbol{x}_n))$$

- Actualización de los pesos de la primera capa oculta ($1 \leq i \leq M_1,\ 0 \leq j \leq M_0$)

$$\Delta\theta^1_{ij} = -\rho\,\frac{\partial q_S(\boldsymbol{\Theta})}{\partial \theta^1_{ij}} = \frac{\rho}{N}\sum_{n=1}^{N}\delta^1_i(\boldsymbol{x}_n)\ x_{nj} \qquad \delta^1_i(\boldsymbol{x}_n) = \Big(\sum_{r=1}^{M_2}\delta^2_r(\boldsymbol{x}_n)\ \theta^2_{ri}\Big)\ g'(\phi^1_i(\boldsymbol{x}_n))$$

Algoritmo BACKPROP

Entrada: Topología, pesos iniciales $\theta_{ij}^l,\ 1 \le l \le L,\ 1 \le i \le M_l,\ 0 \le j \le M_{l-1}$,
factor de aprendizaje ρ, condiciones de convergencia, N datos de entrenamiento S

Salidas: Pesos de las conexiones que minimizan el error cuadrático medio de S

Mientras no se cumplan las condiciones de convergencia

Para $1 \le l \le L, 1 \le i \le M_l, 0 \le j \le M_{l-1}$, inicializar $\Delta\theta_{ij}^l = 0$

Para cada muestra de entrenamiento $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{t}) \in S$

Desde la capa de entrada a la de salida ($l = 0, \ldots, L$):

Para $1 \le i \le M_l$ si $l = 0$ entonces $s_i^0 = x_i$ sino calcular ϕ_i^l y $s_i^l = g(\phi_i^l)$

Desde la capa de salida a la de entrada ($l = L, \ldots, 1$),

Para cada nodo ($1 \le i \le M_l$)

Calcular $\delta_i^l = \begin{cases} g'(\phi_i^l)\ (t_{ni} - s_i^L) & \text{si } l == L \\ g'(\phi_i^l)\ (\sum_r \delta_r^{l+1}\ \theta_{ri}^{l+1}) & \text{en otro caso} \end{cases}$

Para cada peso θ_{ij}^l ($0 \le j \le M_{l-1}$) calcular: $\Delta\theta_{ij}^l = \Delta\theta_{ij}^l + \rho\ \delta_i^l\ s_j^{l-1}$

Para $1 \le l \le L, 1 \le i \le M_l, 0 \le j \le M_{l-1}$, actualizar pesos: $\theta_{ij}^l = \theta_{ij}^l + \frac{1}{N}\ \Delta\theta_{ij}^l$

Coste computacional por cada iteración *mientras*: $O(N\,D)$, $N = |S|$, $D =$ número de pesos

DEMO: http://playground.tensorflow.org/

Algoritmo BACKPROP ("incremental")

Entrada: Topología, pesos iniciales $\theta_{ij}^l,\ 1 \le l \le L,\ 1 \le i \le M_l,\ 0 \le j \le M_{l-1}$,
factor de aprendizaje ρ, condiciones de convergencia, N datos de entrenamiento S

Salidas: Pesos de las conexiones que minimizan el error cuadrático medio de S

Mientras no se cumplan las condiciones de convergencia

Para cada muestra de entrenamiento $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{t}) \in S$ (en orden aleatorio)

Desde la capa de entrada a la de salida ($l = 0, \ldots, L$):

Para $1 \le i \le M_l$ si $l = 0$ entonces $s_i^0 = x_i$ sino calcular ϕ_i^l y $s_i^l = g(\phi_i^l)$

Desde la capa de salida a la de entrada ($l = L, \ldots, 1$),

Para cada nodo ($1 \le i \le M_l$)

Calcular $\delta_i^l = \begin{cases} g'(\phi_i^l)\ (t_{ni} - s_i^L) & \text{si } l == L \\ g'(\phi_i^l)\ (\sum_r \delta_r^{l+1}\ \theta_{ri}^{l+1}) & \text{en otro caso} \end{cases}$

Para cada peso θ_{ij}^l ($0 \le j \le M_{l-1}$) calcular: $\Delta\theta_{ij}^l = \rho\ \delta_i^l\ s_j^{l-1}$

Para $1 \le l \le L, 1 \le i \le M_l, 0 \le j \le M_{l-1}$, actualizar pesos: $\theta_{ij}^l = \theta_{ij}^l + \frac{1}{N}\ \Delta\theta_{ij}^l$

Coste computacional por cada iteración *mientras*: $O(N\ D)$, $N = |S|$, $D =$ número de pesos

Algoritmo BACKPROP ("on-line")

Entrada: Topología, pesos iniciales $\theta_{ij}^l,\ 1 \leq l \leq L,\ 1 \leq i \leq M_l,\ 0 \leq j \leq M_{l-1}$,
factor de aprendizaje ρ, dato de entrenamiento $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{t})$

Salidas: Pesos de las conexiones actualizados mediante $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{t})$

Desde la capa de entrada a la de salida ($l = 0, \ldots, L$):

Para $1 \leq i \leq M_l$ si $l = 0$ entonces $s_i^0 = x_i$ sino calcular ϕ_i^l y $s_i^l = g(\phi_i^l)$

Desde la capa de salida a la de entrada ($l = L, \ldots, 1$),

Para cada nodo ($1 \leq i \leq M_l$)

Calcular $\delta_i^l = \begin{cases} g'(\phi_i^l)\ (t_{ni} - s_i^L) & \text{si } l == L \\ g'(\phi_i^l)\ (\sum_r \delta_r^{l+1}\ \theta_{ri}^{l+1}) & \text{en otro caso} \end{cases}$

Para cada peso θ_{ij}^l ($0 \leq j \leq M_{l-1}$) calcular: $\Delta\theta_{ij}^l = \rho\ \delta_i^l\ s_j^{l-1}$

Para $1 \leq l \leq L, 1 \leq i \leq M_l, 0 \leq j \leq M_{l-1}$, actualizar pesos: $\theta_{ij}^l = \theta_{ij}^l + \Delta\theta_{ij}^l$

Coste computacional por cada muestra procesada: $O(D)$, $D =$ número de pesos

Algoritmos de optimización

- SDG (stochastic gradient descent).
- SGD with momentum
- Adagrad (Adaptive Gradient)
- Adadelta (an extension of Adagrad)
- ADAM (Adaptive Moment Estimation)
- NAG, RMSProp, AdaMax, Nadam, ...

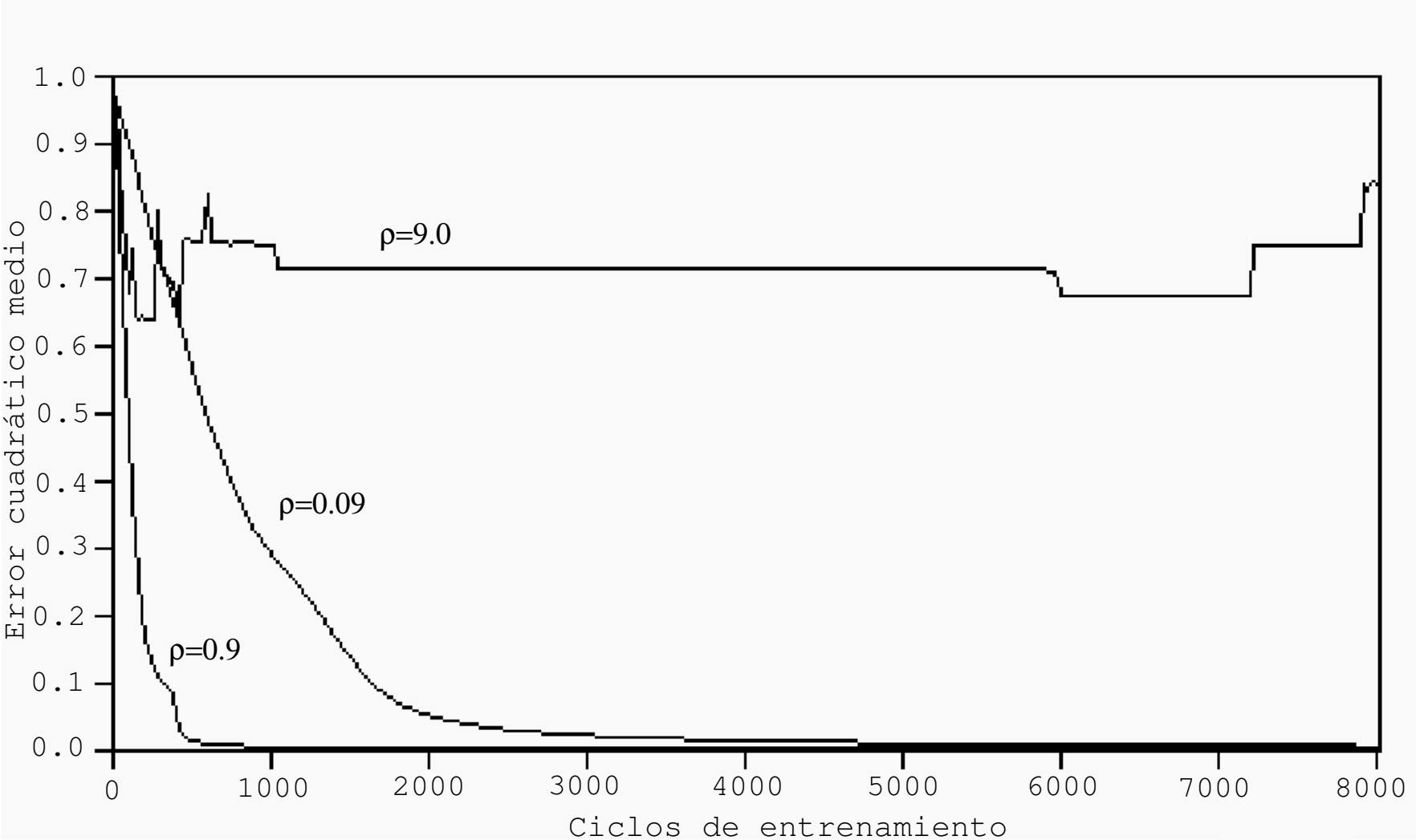
Toolkits

La red neuronal como un grafo de computación que soporta la propagación del gradiente:

- TensorFlow - Google Brain - Python, C/C++
- PyTorch - Facebook - Python
- Caffe - UC Berkeley / Caffe2 Facebook, Python, MATLAB
- Higher level interfaces e.g. Keras for TensorFlow
- CUDA/GPU/CLOUD support

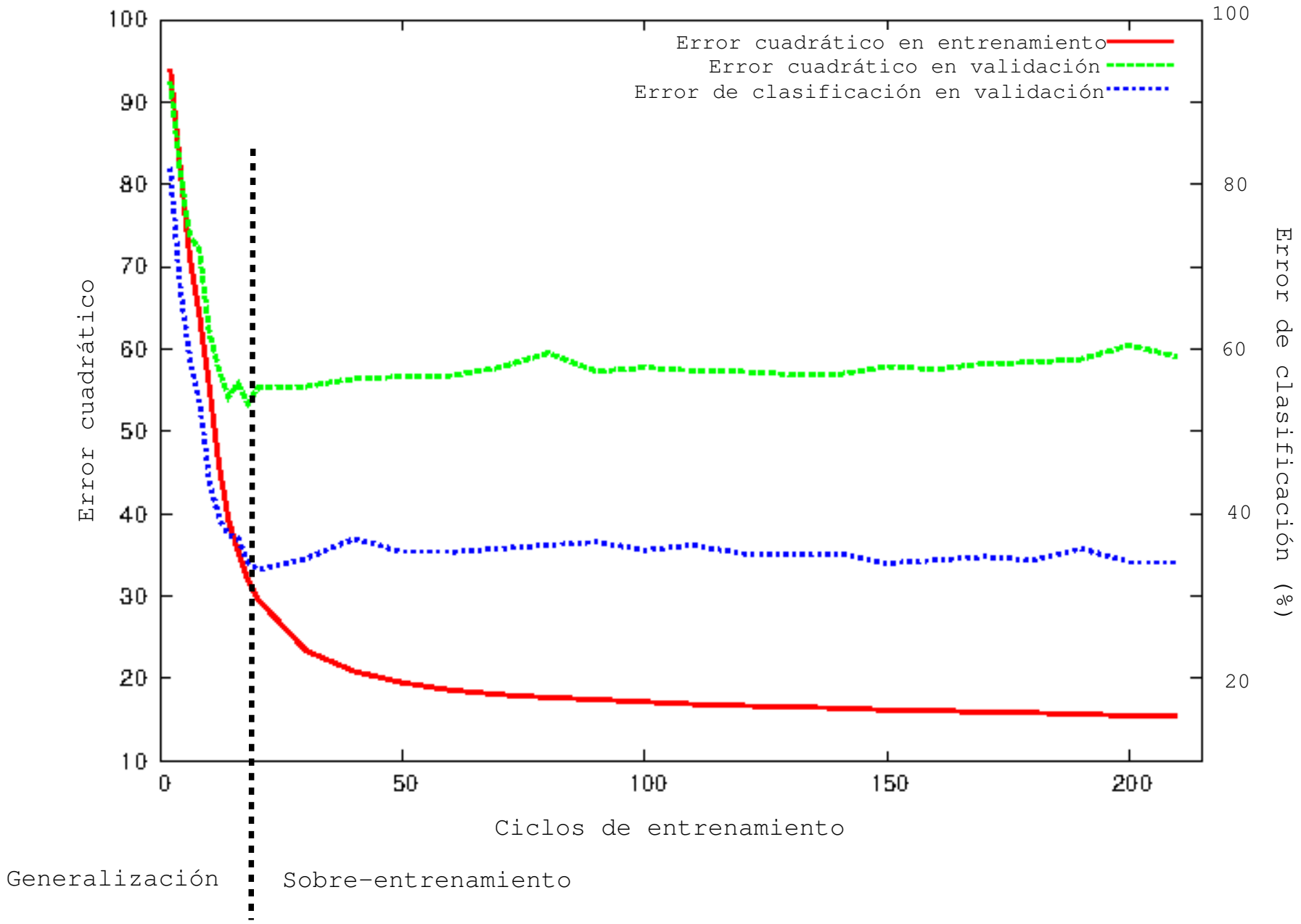
Index

Selección del factor de aprendizaje



http://playground.tensorflow.org/

Condiciones de convergencia



Algunos problemas y soluciones con el BackProp

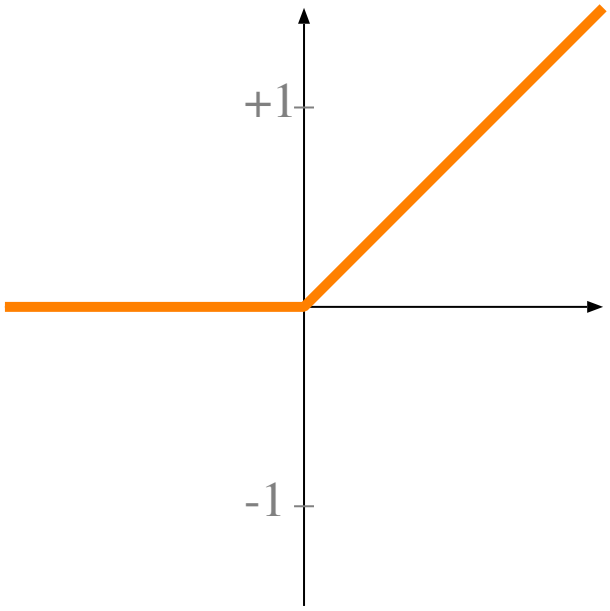
- El problema de la anulación o explosión del gradiente en el caso de muchas capas:
  - Uso de unciones de activación como Relu, Leaky Relu, Maxout ELU.
  - Regularización
  - Drop-out: Durante el entrenamiento se seleccionan aleatoriamente un subconjunto de nodos y no son utilizados en una iteración.
  - Conexiones residuales
  - Normalización a nivel de batch y/o de capa.
  - Gradiente recortado (clipping).

- Evitar “malos” mínimos locales:
  - Barajar los datos de entranamiento.
  - Aprender primero las muestras más “fáciles” (Curriculum learning).
  - Regularización.
  - Añadir ruido durante el entrenamiento.

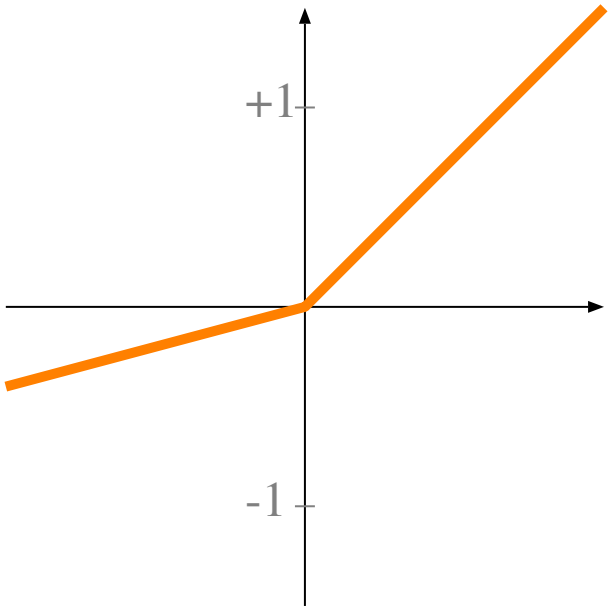
Funciones de activación (1)

- Relu (Rectified Linear Unit): $f(x) = \max(0, x), \quad x \in \mathbb{R}$
- Leaky Relu: $f(x) = \max(0.1\,x, x), \quad x \in \mathbb{R}$
- Maxout: $f(x) = \max(w_1\,x + b_1, w_2\,x + b_2), \quad x \in \mathbb{R}$
- ELU (Exponential Linear Units) : $f(x) = \begin{cases} x & x \geq 0 \\ \alpha\,(e^x - 1) & x < 0 \end{cases}, \quad x \in \mathbb{R}$
- Softmax: $f(x_i) = \dfrac{e^{x_i}}{\sum_j e^{x_j}}, \quad x_i \in \mathbb{R} \;\; 1 \leq i \leq I$

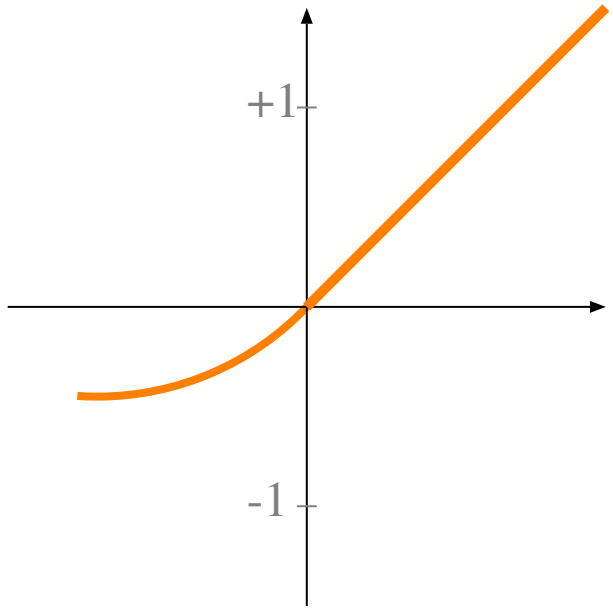
Funciones de activación (2)



ReLU



LReLU



ELU

Codificación

- Los valores ± 1 (o $0, 1$) solo se alcanzan asintóticamente cuando se utilizan la mayoría de las funciones de activación como la sigmoid:

$$\text{Valores deseados de salida: } t_i = \begin{cases} -0.9 \\ +0.9 \end{cases}$$

- Parálisis de la red: para valores grandes de z la derivada $g'(z)$ es muy pequeña y por tanto, los incrementos de los pesos son muy pequeños. Una forma de disminuir este efecto es normalizar el rango de entrada.

$$S = \{\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_N\} \subset \mathbb{R}^d \Rightarrow \begin{cases} \mu_j = \dfrac{1}{N}\displaystyle\sum_{i=1}^{N} x_{ij} \quad 1 \leq j \leq d \\ \sigma_j^2 = \dfrac{1}{N-1}\displaystyle\sum_{i=1}^{N} (x_{ij} - \mu_j)^2 \quad 1 \leq j \leq d \end{cases}$$

$$\forall \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d, \hat{\boldsymbol{x}} : \hat{x}_j = \frac{x_j - \mu_j}{\sigma_j} \Rightarrow \begin{cases} \hat{\mu}_j = 0 \\ \\ \hat{\sigma}_j = 1 \end{cases} \text{ for } 1 \leq j \leq d$$

Normalización a nivel de minibatch

- En la capa k se dispone de las correspondientes salidas para un minibatch (subconjunto de S) de tamaño b: $B = \{\boldsymbol{s}_1^k, \ldots, \boldsymbol{s}_b^k\} \subset \mathbb{R}^{M_k}$

$$\boldsymbol{\mu}_B = \frac{1}{b}\sum_{i=1}^{b} \boldsymbol{s}_i^k$$

$$\sigma_B^2 = \frac{1}{b-1}\sum_{i=1}^{b}(\boldsymbol{s}_i^k - \boldsymbol{\mu}_B)^2$$

$$\forall \boldsymbol{s}^k \in B, \quad \bar{\boldsymbol{s}}^k = \frac{\boldsymbol{s}^k - \boldsymbol{\mu}_B}{\sqrt{\sigma_B^2 + \epsilon}} \rightarrow \hat{\boldsymbol{s}}^k = \gamma\, \bar{\boldsymbol{s}}^k + \beta$$

Normalización a nivel de capa

- En la capa k se dispone de las correspondiente salida $\boldsymbol{s}^k \in \mathbb{R}^{M_k}$

$$\mu_L = \frac{1}{M_k} \sum_{i=1}^{M_k} s_i^k$$

$$\sigma_L^2 = \frac{1}{M_k - 1} \sum_{i=1}^{M_k} (s_i^k - \mu_L)^2$$

$$\forall s_i^k \in \mathbb{R}^{M_k}, \hat{s}_i^k := \frac{s_i^k - \mu_L}{\sqrt{\sigma_L^2 + \epsilon}} \text{ for } 1 \leq i \leq M_k$$

Regularización

- Problema: evitar que los pesos sean muy grandes y provoquen una parálisis de la red.
- Solución: añadir un término de regularización a la función objetivo:
  - Regularización L_2 : $q_S(\mathbf{\Theta}) + \frac{\lambda}{2} \sum_{l,i,j} (\theta_{ij}^l)^2$
  - Regularización L_1 : $q_S(\mathbf{\Theta}) + \frac{\lambda}{2} \sum_{l,i,j} \| \theta_{ij}^l \|$

Recorte del gradiente

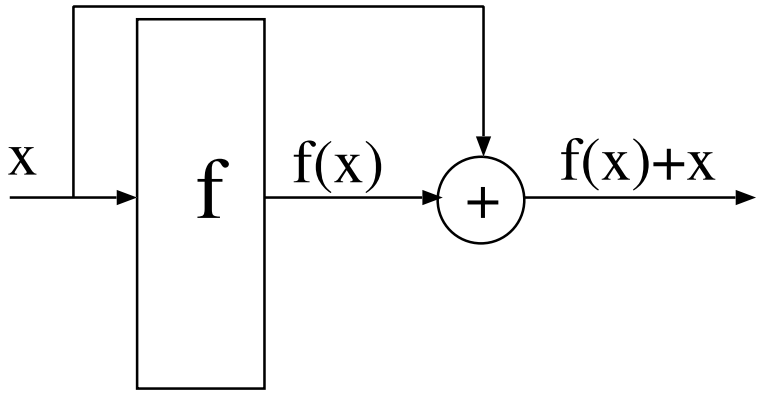
Las actualizaciones de los pesos durante el entrenamiento pueden provocar un desbordamiento numérico que a menudo se denomina ”gradientes explosivos”. [Brownlee 2019]

- Escalar el gradiente implica normalizar el vector de gradiente de error de manera que la norma del vector (magnitud) sea igual a un valor definido, como 1.0.

- El recorte de gradiente implica forzar los valores del gradiente (por elementos) a un valor mínimo o máximo específico si el gradiente excede un rango prefijado.

Conexión residual y drop-out

- Conexión residual: Si una red neuronal implementa una función $\boldsymbol{x} \rightarrow f(\boldsymbol{x})$, y asumiendo que $\boldsymbol{x}$ y $f(\boldsymbol{x})$ son de la misma dimensionalidad, un conexión residual permite implementar $f(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{x}$



- Drop-out: Durante el entrenamiento se seleccionan aleatoriamente un subconjunto de nodos y no son utilizados en una iteración.

Aumento de datos artificiales

- Aumentar el tamaño con muestras sintécticas a partir de reales mediante transformaciones.
  - En imágenes:
    - Giros horizontales.
    - Rotación.
    - Recortes.
    - Transformaciones de color.
    - Añadiendo ruido.
  - En texto:
    - Sustituyendo palabras.
    - Insertando palabras.
    - Borrando palabras.

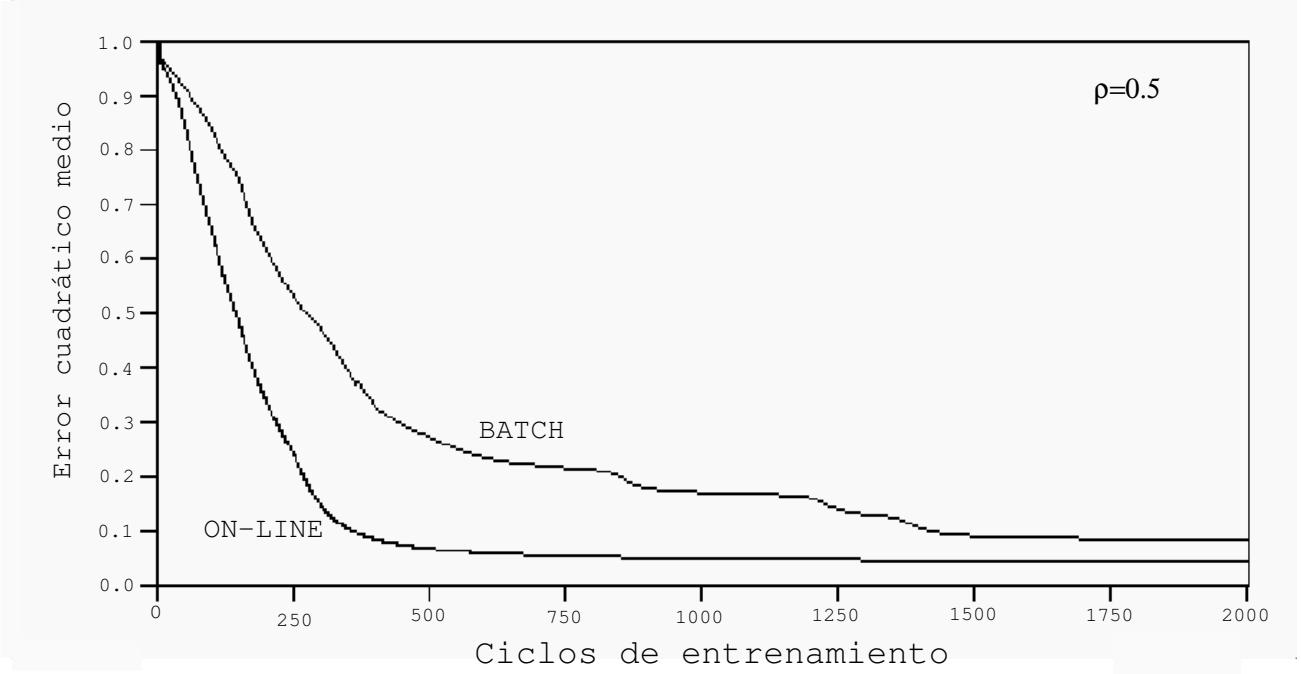
Propiedades del BackProp

- Convergencia: teorema general del descenso por gradiente (Tema 3)
- Elección del factor de aprendizaje: Tema 3 (Adadelta, Adam, ...)
- Coste computacional: $O(N\,D)$ en cada iteración
- Perceptrones de una o dos capas ocultas [Villiars and Basnard, 92]
  - En el mejor de los casos, los resultados de clasificación no presentan diferencias estadísticas significativas.
  - Generalmente, un perceptrón de una capa oculta suele producir mejores resultados de clasificación que los de dos capas ocultas.
  - Los perceptrones de dos capas ocultas suelen converger más rápidamente que los perceptrones de una capa oculta.
- *En condiciones límites, las salidas de un perceptrón entrenado para minimizar el error cuadrático medio de las muestras de entrenamiento de un problema de clasificación aproximan la distribución a-posteriori subyacente en las muestras de entrenamiento.*

Index

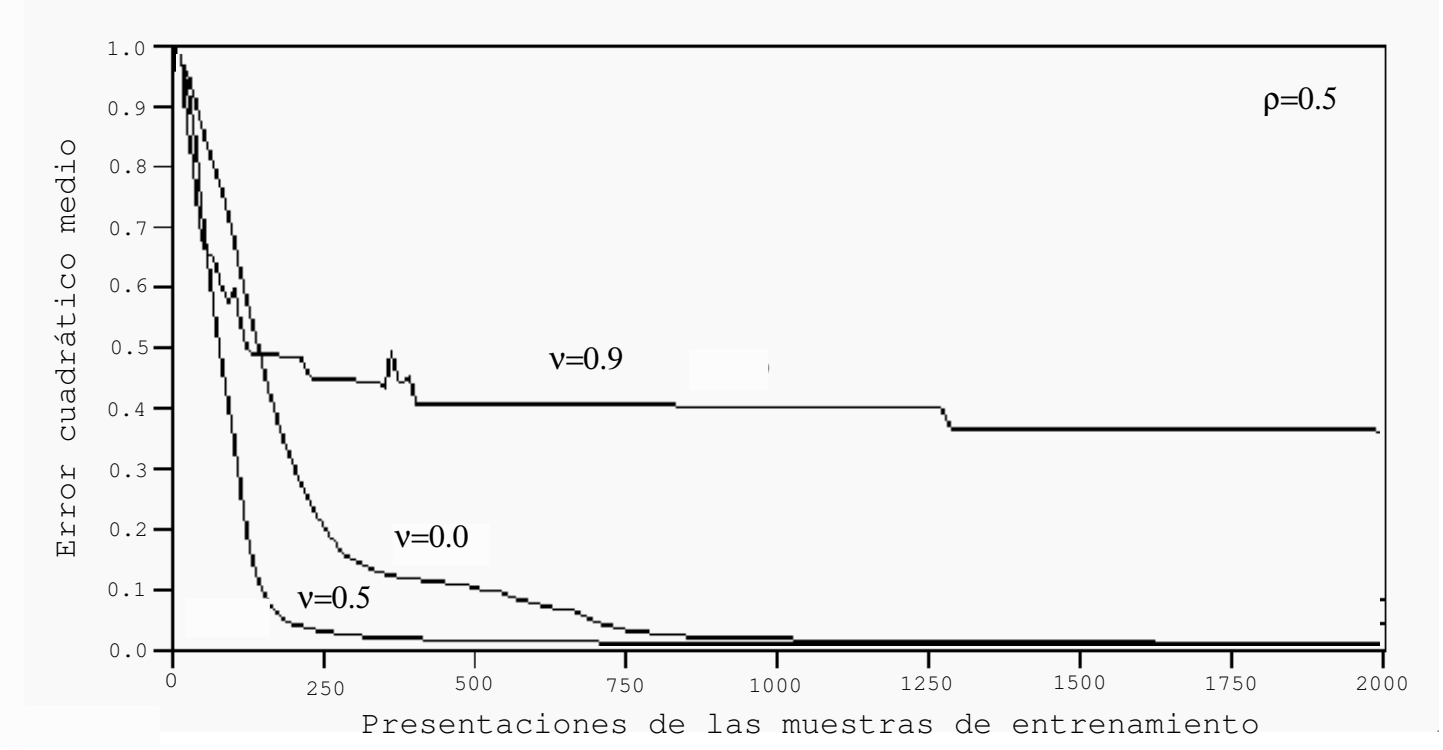
BackProp incremental o *"batch"*

- BackProp "batch": en cada iteración se procesan las N muestras de entrenamiento (" epoch") y los pesos del PM se actualizan una sola vez.
- BackProp "*mini-batch*": el conjunto de entrenamiento se divide en B bloques, en cada uno se procesan las muestras que están contenidas y luego se actualizan los pesos del PM. Por tanto en un epoch los pesos se actualizan N/B veces.
- BackProp "*incremental*": en cada iteración se procesa solo una muestra de entrenamiento (aleatoria) y se actualizan los pesos del PM. Por tanto en un epoch los pesos se actualizan N veces.



BackProp con momentum

- Problema: convergencia lenta en “plateaux”
- Posible solución: añadir una “inercia” o “momentum” con un peso $0 \leq \nu < 1$
- BP con momentum (batch): $\Delta\theta_{ij}^{l}(k) = \frac{\rho_k}{N} \sum_{n=1}^{N} \delta_i^l(\boldsymbol{x}_n)\ s_j^{l-1}(\boldsymbol{x}_n) + \nu\ \Delta\theta_{ij}^{l}(k-1)$
- TEOREMA (Phansalkar and Sartry, 1994): *Los puntos estables del algoritmo BackProp con momentum* $(\boldsymbol{\Theta}(k) = \boldsymbol{\Theta}(k+1))$ *son mínimos locales de* $q_S(\boldsymbol{\Theta})$

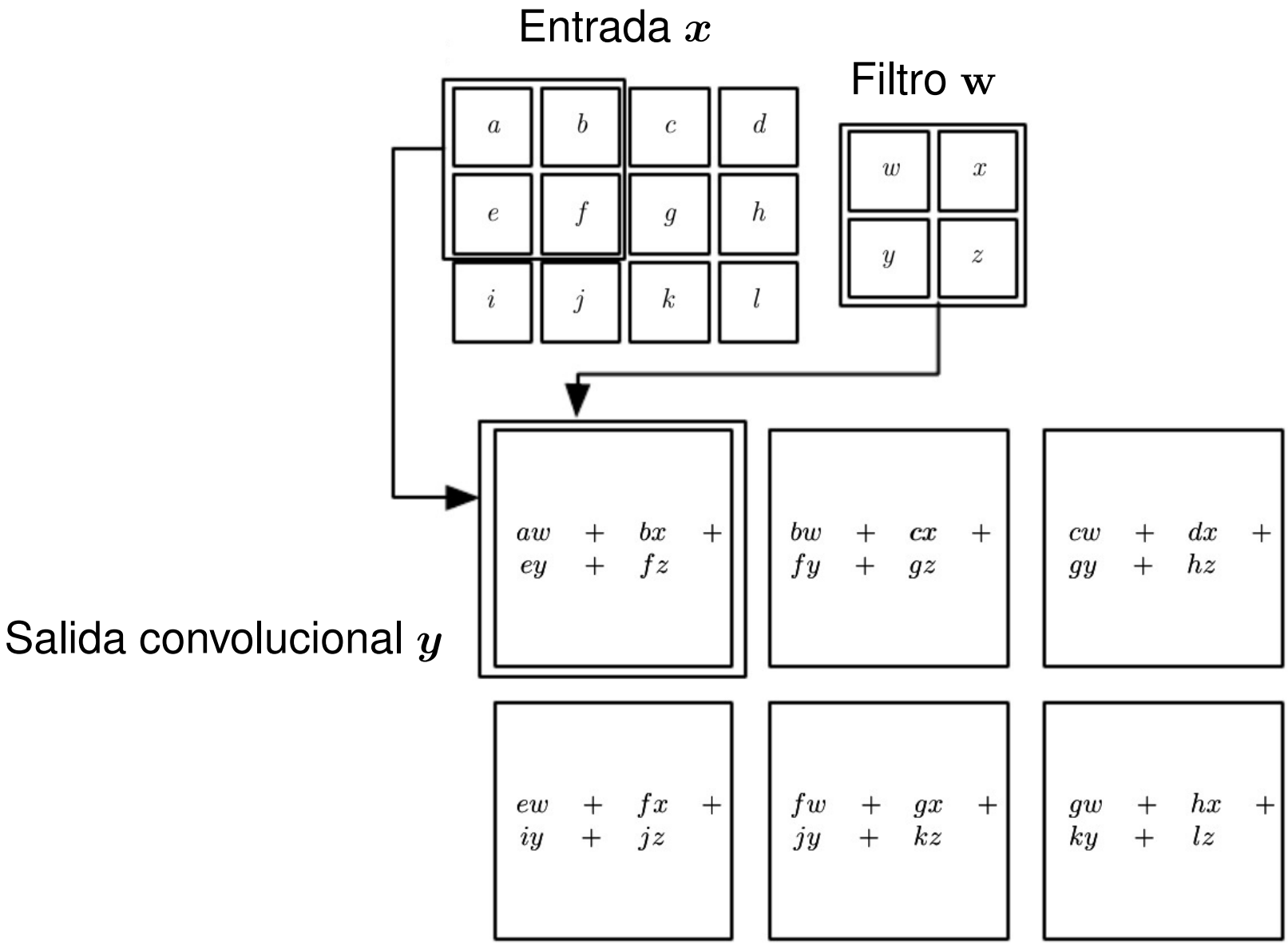


Index

Redes convolucionales vs full-connected

- Una red totlamente conectada para una imagen puede ser tener un número enorme de pesos.
- Las redes convolucionales están basadas en filtros, redes pequeñas que se desplazan por la imagen.

Convolución [Goodfellow 2016]

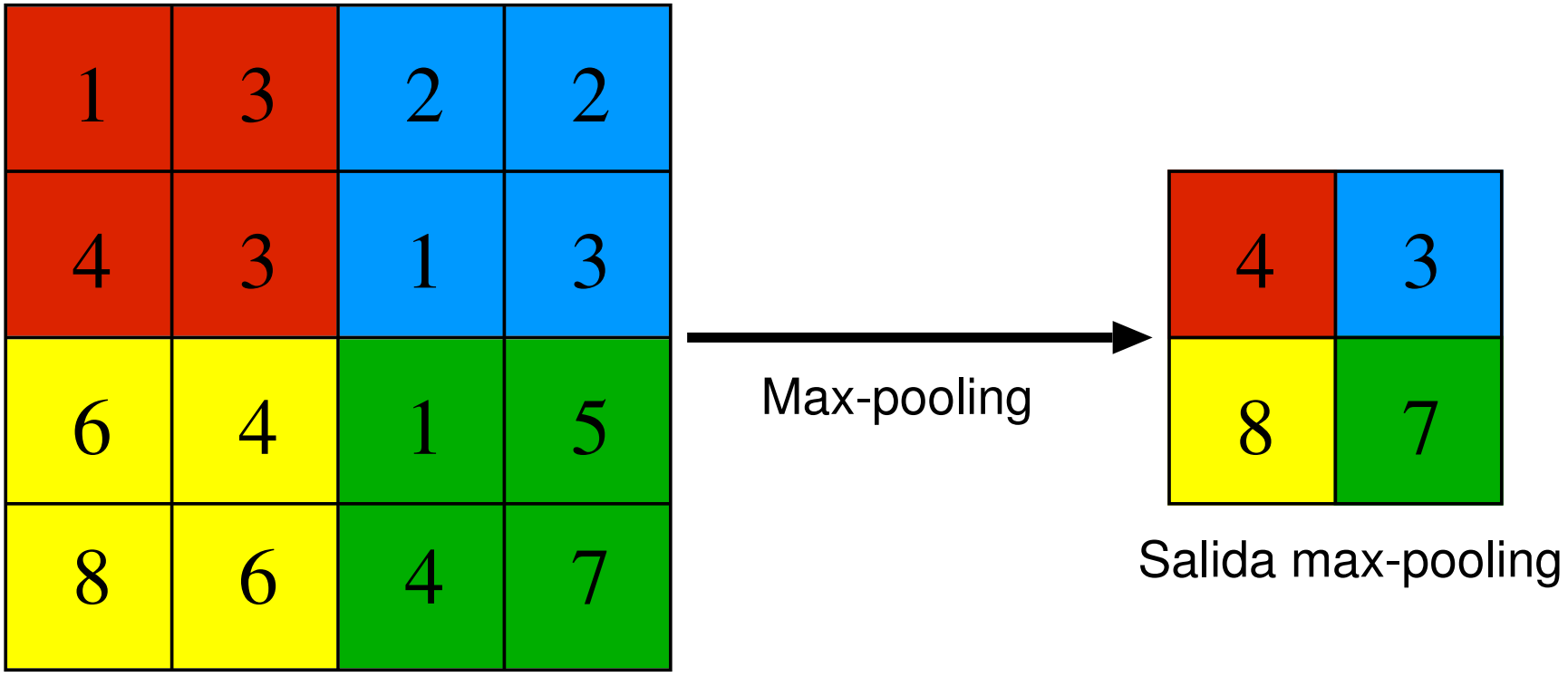


Redes convolucionales

- Tamaño filtro o núcleo $M \times N$
- Paso del filtro (Stride) horizontal y vertical.
- Relleno a ceros (Padding) si el filtro se sale de la imagen.

Pooling

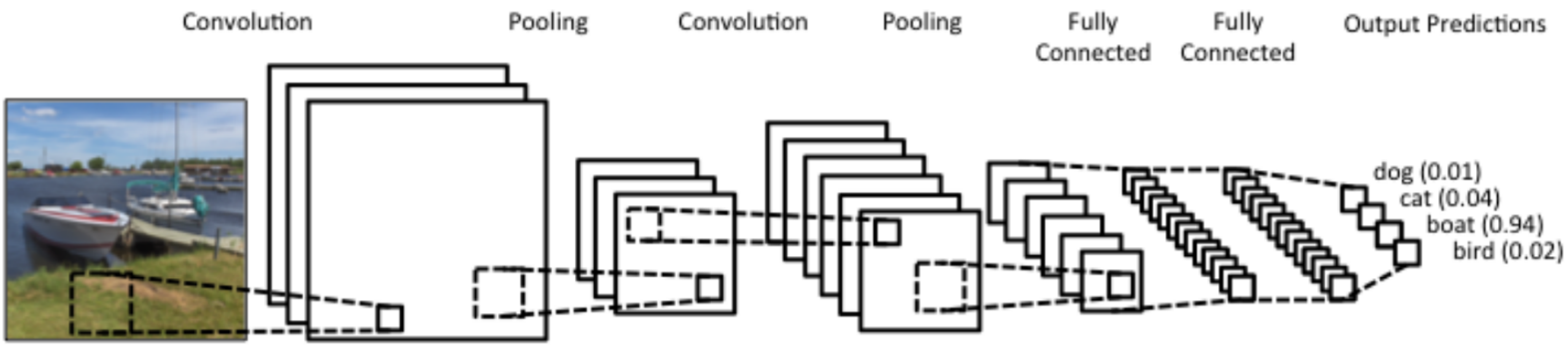
- Valor máximo
- Valor medio



Redes convolucionales

- Capa 1 convolucional + función de activación ReLU
- Capa 1 pooling
- ...
- Capa L convolucional + función de activación ReLU
- Capa L pooling
- Una red totalmente conectada.
- Salida softmax

ejemplo de red convolucional



Redes recurrentes

- Redes diseñadas para tratar secuencias $\boldsymbol{x}_n \in \mathbb{R}^{d_X}$ y producir secuencias $\boldsymbol{y}_n \in \mathbb{R}^{d_Y}$, $n = 1, 2, \ldots$
- Un perceptrón multicapa puede ser usado para generar la secuencia de salida:

$$\boldsymbol{y}_n = \boldsymbol{f}(W\boldsymbol{x}_n). \quad n = 1, 2, \ldots$$

- Una red recurrente tiene en consideración lo que ha generado anteriormente:

$$\boldsymbol{y}_n = \boldsymbol{f}(W^Y \boldsymbol{y}_{n-1} + W^X \boldsymbol{x}_n) \quad n = 1, 2, \ldots$$

Redes recurrentes complejas

- Red de Elman: recurrente + perceptrón en la salida.
- Redes recurrentes de segundo orden.
- Long Short-Term Memory (LSTM)
- Gated Recurrent Units (GRU)

Aprendizaje de redes recurrentes

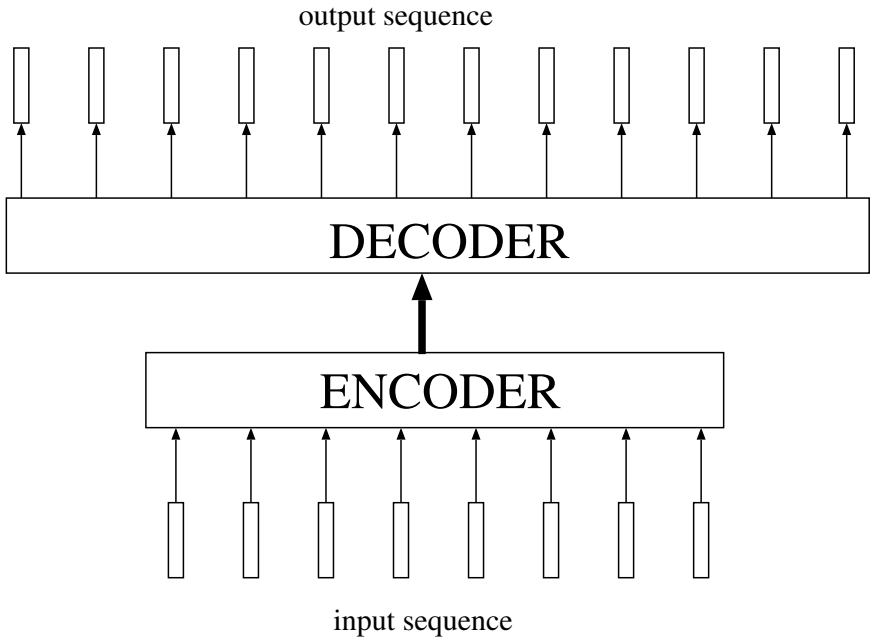
- Al desplegar una red recurrente para una secuencia de entrada se obtiene una red no recurrente de tantas capas como tamaño tnega la secuencia de entrada.

- Entrenamiento mediante “Back-propagaytion through time”: aplicación del algoritmos de propagación del error convencional sobre la red desplegada.

- Uso de los mismos algoritmo de optimización sobre los grafos de computación generados por los toolkits convencionales.

Procesado de secuencias generales

1. Problema las redes recurrentes anteriores solo pueden generar secuencias de igual (o menor) tamaño que la secuencia de entrada.
2. Solución: Arquitectura codificador-decodificador (con mechanismo de atención)
3. 1) Obtener una representación compacta de la entrada mediante una red recurrente o una red feed-forward (Codificador) y 2) Generar una secuencia de salida a partir de la representación compacta de la entrada (Decodificador)
4. Se pueden utilizar redes recurrentes y no recurrentes.



Index

Algunas aplicaciones

- CLASIFICACIÓN
  - Reconocimiento de caracteres impresos y manuscritos
  - Exploración petrolífera.
  - Aplicaciones médicas: *detección de ataques de epilesia, ayuda al diagnóstico de la esclerosis múltiple*, etc.
  - Minería de datos
- PREDICCIÓN
  - Previsión de ocupación en los vuelos (Inc. BehavHeuristics.)
  - Evolución de los precios de solares (Ayuntamiento de Boston)
  - Predicción de consumo de bebidas refrescantes (Britvic)
  - Predicción metereológica (National Weather Service)
  - Predicción de stocks (Carl & Associates, Neural Applications Corporation, etc.)
  - Predicción de demanda electrica (Bayernwerk AG, Britvic, etc.)
  - Predicción de fallos en motores eléctricos (Siemens)
- CONTROL AND AUTOMATIZATION
  - Refinado del petróleo (Texaco).
  - Producción de acero (Fujitsu, Neural Applications Corporation, Nippon Steel)
- + APLICACIONES `http://www.calsci.com/Applications.html`

Index

Notación

- Funciones discriminantes lineales: $\phi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\Theta}) = \boldsymbol{\Theta}^t\boldsymbol{x}$ para una entrada $\boldsymbol{x}$ y parámetros $\boldsymbol{\Theta}$ compuestos por vector de pesos y umbral $(\boldsymbol{\theta}, \theta_0)$
- Funciones discriminantes lineales con activación: $g \circ \phi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\theta})$ para una entrada $\boldsymbol{x}$, parámetros $(\boldsymbol{\theta}, \theta_0)$ y g una función de activación. g' es la derivada de la función de activación g
- Función de activación sigmoid: $g_S(z)$
- Salida del nodo i en la capa k: s_i^k en perceptrones multicapa y redes hacia adelante
- Pesos de la conexión que va del nodo j de la capa $k-1$ al nodo i de la capa k en un perceptrón multicapa: θ_{ij}^k. $\boldsymbol{\Theta}$ es un vector de talla D formado por todos los pesos θ_{ij}^k. Pesos de la conexión que va del nodo j de la capa k' al nodo i de la capa k en una red hacia adelante: $\theta_{ij}^{k',k}$
- Conjunto de N muestras de entrenamiento: $S = \{(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{t}_1), \ldots, (\boldsymbol{x}_N, \boldsymbol{t}_N)\}$ con $\boldsymbol{x}_n \in \mathbb{R}^{M_0}$ y $\boldsymbol{t}_n \in \mathbb{R}^{M_K}$, siendo K el número de capas y M_k el número de nodos de la capa k
- Función a minimizar en el entrenamiento de un perceptrón multicapa: $q_S(\boldsymbol{\Theta}) \in \mathbb{R}$
- Clasificador en $C \equiv M_K$ clases de puntos de $\mathbb{R}^d \equiv \mathbb{R}^{M_0}$: $f : \mathbb{R}^{M_0} \to \{1, \ldots, M_K\}$
- Error en el nodo i de la capa k para la muestra $\boldsymbol{x}_n$: $\delta_i^k(\boldsymbol{x}_n)$
- Incremento del peso que va del nodo j en la capa $k-1$ al nodo i en la capa k: $\Delta\theta_{ij}^k$
- Factor de aprendizaje, momentum y factor de regularización: ρ, ν yλ
- Media y desviación típica: μ y σ