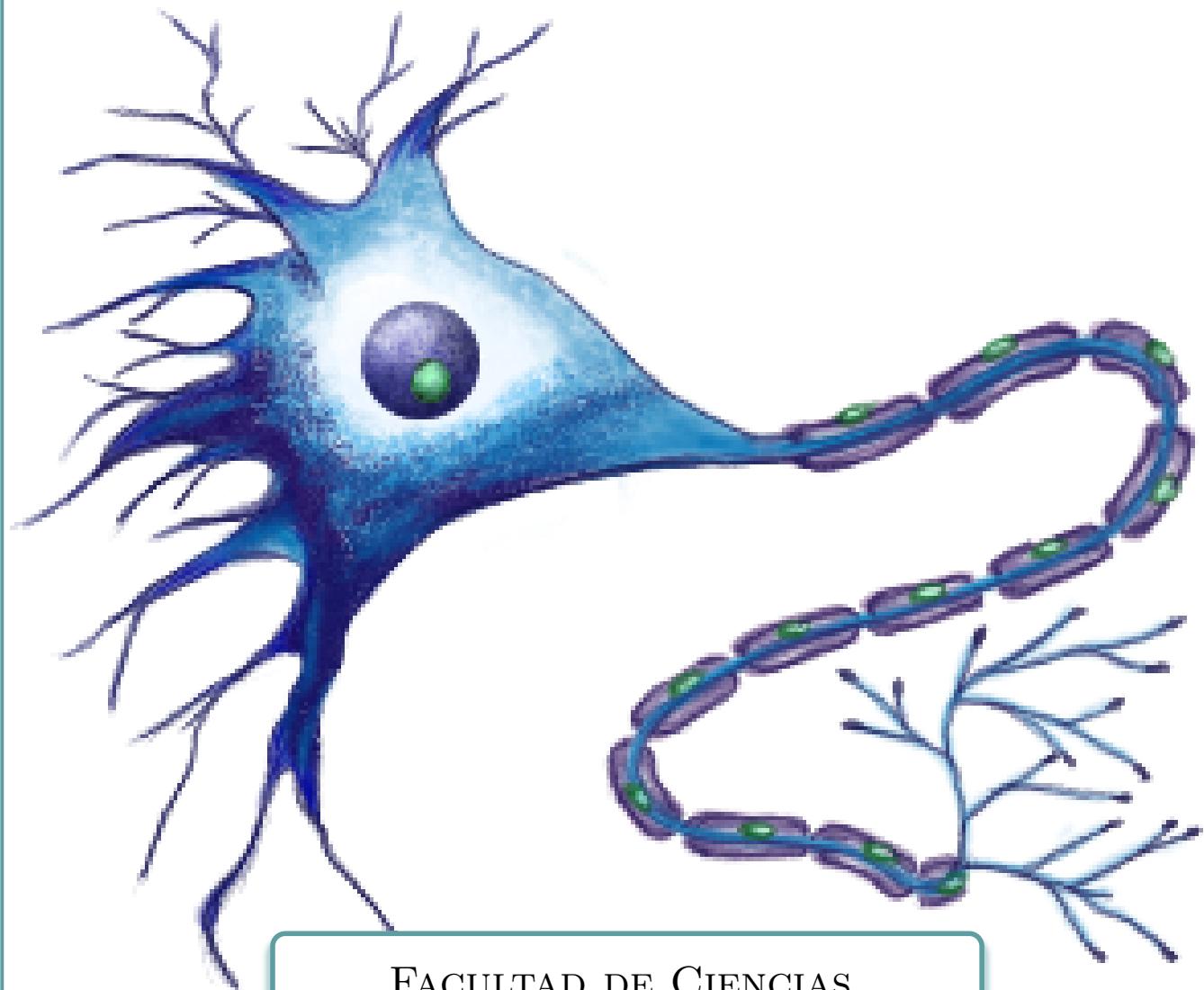


Redes Neuronales

Notas de clase

Karla Fernanda Jiménez Gutiérrez
Verónica Esther Arriola Ríos



FACULTAD DE CIENCIAS,
UNAM

Índice general

Índice general

I Antecedentes	2
1 Neurona biológica	3
1.1 Neurociencias computacionales	3
1.2 Sistema Nervioso	5
1.2.1 Cerebro	8
1.2.2 Zonas funcionales	10
1.3 Neurona biológica	11
1.3.1 La neurona	11
1.3.2 Elementos de las neuronas y tipos	14
1.3.3 Sinapsis	15
1.3.4 Campos receptivos	20
1.3.5 Señal eléctrica	21
2 Modelo de Hodgkin-Huxley	25
2.1 Introducción	25
2.2 Membrana y canal	27
2.3 Potenciales de Nerst o de reposo	30
2.4 Modelo de la membrana como bicapa de lípidos	30
2.4.1 Las conductancias iónicas	34
2.5 Modelo de las compuertas iónicas controladas por voltaje	36
2.6 Dinámica del voltaje durante un disparo	39
2.7 Simulación usando el método de Euler	43
2.8 Información condificada en las dendritas	45
3 Aprendizaje de máquina	49
3.1 Introducción	49
3.2 Espacio de Hipótesis	51
3.3 Clasificación de los conjuntos de datos	52
3.3.1 Tipos de aprendizaje	53

ÍNDICE GENERAL

II Redes dirigidas acíclicas	55
4 Perceptrón simple	56
4.1 Perceptrón	56
4.2 Compuertas lógicas con neuronas	59
4.3 Funciones de activación	61
4.4 Funciones de error	61
4.5 Medidas de rendimiento	64
5 Perceptrón multicapa	70
5.1 Intro	70
5.2 XOR	70
5.3 Propagación hacia adelante manual	72
5.4 Propagación hacia adelante vectorizada (con matrices)	73
5.5 Interpretación matemática del mapeo no lineal	76
5.6 Propagación hacia adelante para el perceptrón multicapa	77
6 Entrenamiento por retropropagación	79
6.1 Esquema general entrenamiento	79
6.2 Función de error: Entropía cruzada	82
6.3 Derivada de la función logística	83
6.4 Entrenamiento en la última capa	85
6.5 Parcial con respecto a los pesos en la última capa	88
6.6 Vectorización	91
7 Optimización del entrenamiento	97
7.1 Problemas en redes profundas	97
7.2 Gradiente desvaneciente (o que explota)	98
7.3 Estilos de entrenamiento	100
7.4 Normalización y normalización por lotes	102
7.5 Regularización	107
7.5.1 Descarte	111
8 Caso de análisis e interpretación	112
8.1 Red Hinton árbol familiar con numpy (entrenamiento)	112
8.2 Red Hinton árbol familiar con pytorch	114
9 Entrenamiento con genéticos	117
9.1 Algoritmos genéticos	117
9.2 Neuroevolución	117
9.2.1 Antecedentes: Aprendizaje por refuerzo en videojuegos	117
9.2.2 Arquitectura para estimar la función de recompensa	117
9.2.3 Entrenamiento	118
10 Mapeos autoorganizados	119

10.1	Introducción	119
10.2	Aprendizaje no supervisado	119
10.3	Mapeos autoo-organizados	119
10.4	Kohonen	119
11	Redes Neuronales Convolucionales	120
11.1	Convolución	120
11.2	Redes Convolucionales	120
11.3	Softmax	120
11.4	MNIST	120
III	Redes con ciclos	121
12	Redes Neuronales Recurrentes	122
12.1	Derivadas ordenadas	122
12.2	Retropropagación en el tiempo	122
12.3	Sistemas dinámicos y despliegue del grafo	122
12.4	Arquitectura recurrente universal	122
12.5	Función de error	122
12.6	Forzamiento del profesor	122
13	Atención	123
14	LSTM	124
15	GRU	125
16	Casos de análisis: etiquetado de palabras y conjugación de verbos	126
IV	Redes no dirigidas	127
17	Redes de hopfield	128
17.1	Entrenamiento	128
18	Máquinas de Boltzman	129
18.1	Entrenamiento	129
18.1.1	Partículas y partículas de fantasía	129
18.1.2	Máquinas de Boltzman Restringidas	129
19	Redes adversarias	130
19.1	GANs	130
A	Ecuaciones diferenciales	131

ÍNDICE GENERAL

Bibliografía

132

Etc

A lo largo del texto se utilizará la siguiente notación para diversos elementos:

Conjuntos	C
Vectores	x
Matrices	M
Unidades	cm

Parte I

Antecedentes

1 | Neurona biológica

Neurociencias computacionales

Las redes neuronales surgieron completamente inspiradas en los sistemas biológicos. Lo que estamos haciendo los computólogos es tomar una idea de la naturaleza, una idea que ha probado ser sumamente efectiva para procesar información y que logra resolver problemas que nosotros aún no sabemos solucionar con modelos diseñados explícitamente. Los más notorios son:

- Problemas de visión por computadora.
- Procesamiento del lenguaje natural.

A lo largo del texto obtendremos una somera idea de qué hace el sistema nervioso de un ser humano, tomaremos también ejemplos de animales como el calamar gigante y cangrejos; ejemplos que han permitido estudiar biológicamente cómo funcionan las neuronas y cómo funciona su sistema nervioso.

Entonces por un momento pensemos en el sistema nervioso como un todo, lo que realmente está pasando al computar no es el cálculo del proceso de una sola neurona sino de la colección de todas ellas. Lo que sucede con los sistemas biológicos es que son muchísimo más complicados que lo que vamos a ver nosotros como modelos computacionales, sin embargo muchísimas empresas están utilizando estas técnicas. El sistema nervioso como un todo es bastante más complejo, pero conforme han ido evolucionando las redes neuronales computacionales, ya con sus arquitecturas y organizaciones, se están volviendo también más complejas. Varias de las estructuras más exitosas tienen un análogo muy fuerte con un sistema nervioso natural.

Veamos un campo conocido como **neurociencias computacionales** el cual se dedica explícitamente al estudio/modelado de los sistemas biológicos pero ya conjuntando varios campos. Se interesa notablemente en descripciones y modelos funcionales biológicamente realistas de neuronas y sistemas neuronales. En contraposición, los modelos que veremos en redes neuronales computacionales no necesariamente tienen que ser realistas, lo que nos interesa es que resuelvan los problemas, si se desvían un poco de cómo funcionan los sistemas naturales en un principio no es problema.

1. Neurona biológica

Ahora, ¿qué le interesa modelar a las neurociencias computacionales? Se fijan en la fisiología y en la dinámica de estos sistemas, combinando varias ciencias tales como:

- **Biofísica** por el estudio de las propiedades físicas detrás de los sistemas biológicos.
- **Neurociencias tradicionales** con modelos matemáticos.
- **Ciencias de la computación** tanto en la parte del modelado como en la parte de la implementación de estos modelos y la generación de simulaciones computacionales.
- **Ingeniería eléctrica** donde se está diseñando hardware especializado para ejecutar modelos de manera eficiente, algunos de los modelos matemáticos están basados en circuitos eléctricos.
- **Ciencias cognitivas** que tratan de ver qué se está codificando dentro de un sistema nervioso y cómo podemos interpretar esa información que está ahí guardada.

Vamos a ver cómo están influyendo todos estos antecedentes en lo que van a hacer las ciencias de la computación pero con su propio modelo de redes neuronales, pues existe una conexión muy fuerte entre estos dos campos.

Las neurociencias computacionales, como se mencionó anteriormente, estudian modelos del sistema nervioso y clasifican estos modelos en tres tipos:

1. **Modelos descriptivos**, nos limitamos a decir qué está haciendo un sistema; en particular aquí son muy famosos los experimentos con ratones, se está tratando de ver qué puede hacer, qué no puede hacer, qué puede aprender, qué no, pero no se puede explicar “¿cómo?”, simplemente se dice qué es lo que está sucediendo.
2. **Modelos mecanistas**, donde ahora sí nos interesa saber, ¿cómo es que están haciendo las cosas? Aquí vamos a ver cómo los modelos matemáticos precisamente nos están tratando de describir cómo puede ser que se están conectando estas neuronas, cómo pueden estar funcionando las redes de neuronas, cómo podría estarse almacenando la información y transfiriendo de un lado a otro.
3. **Modelos interpretativos**, nos dan una idea del por qué o para qué lo hacen. Se tiene que buscar intencionalidad, razonamiento de más alto nivel.

Cuando trabajemos con redes neuronales computacionales vamos a notar que sí necesitamos adentrarnos un poco en los tipos 2 y 3. Para romper esa traba con nuestras redes neuronales, donde sabemos que aprendieron, pero no estamos ni siquiera seguros de qué aprendieron o porqué lo aprendieron así, vamos a tener que utilizar herramientas matemáticas para tratar de descubrir qué es lo que realmente está haciendo la red entrenada.

Ahora revisemos los **objetivos del modelado** en neurociencias:

(Empezando desde lo más granular que es cada una de las neuronas)

- Las **corrientes** que están pasando a través de las membranas de las neuronas, la influencia que tienen en el paso de la información.
- Las **proteínas** van a jugar un papel importante en la conducción de elementos iónicos, neurotransmisores y en los acoplamientos químicos.

(El siguiente nivel con combinaciones de varias neuronas)

- Las **oscilaciones de las redes** completas, qué pasa con estas señales, pulsos eléctricos que se están transfiriendo de unas regiones a otras y que empiezan a producir oscilaciones con ciertos períodos, regiones de actividad o regiones que se apagan.
- **Arquitectura topográfica y de columnas** cómo están organizadas estas neuronas, quiénes están conectadas con quiénes, cómo reaccionan dentro de ciertas regiones identificadas, cómo interactúan con otras regiones. Se puede identificar una arquitectura tanto desde el punto de vista fisiológico como del punto de vista funcional. Un caso particular de estas estructuras es la formación de columnas de neuronas que están altamente conectadas y trabajan como una unidad.
- El **aprendizaje**, es decir estamos procesando información, guardando información, recuperándola y eso permite que los seres que cuentan con un sistema nervioso tengan características especiales cuyo comportamiento se puede modificar conforme aprenden.
- La **memoria**, necesitamos almacenar información y recuperarla para procesarla.

Sistema Nervioso

¿Qué son las neuronas? Las neuronas son células con núcleo, sus cuerpos tienen dendritas con la habilidad de transferir electricidad y un axón. Éste es una terminal eferente, que permite transmitir un pulso eléctrico desde el cuerpo a través del axón hasta otras neuronas a distancias variadas.

¿Qué es un nervio? Un nervio es una gran colección de axones empacados todos juntos en una especie de cable (fibra), pasan vasos sanguíneos por en medio de los nervios. Esto es de lo que está formando el sistema nervioso, se originan desde la médula espinal (31 pares de nervios raquídeos) o el encéfalo (12 pares de nervios craneales).

Los nervios son estructuras conductoras de impulsos nerviosos situados fuera del sistema nervioso central, es decir, estamos hablando de todos estos axones que salen desde el cráneo, la médula espinal y cubren el resto del cuerpo. Pueden ser clasificados en:

1. Neurona biológica

- **Motores** salidas, ejecución/acción, se conectan y ejercen su acción sobre los músculos.
- **Sensitivos** reciben señales de entrada, como en ojos, oídos y piel.
- **Mixtos** son mayoría, tienen tanto fibras sensitivas como motoras.

Tenemos dos grandes partes del sistema nervioso, el **sistema nervioso periférico** y el **sistema nervioso central**, como se puede ver en la Figura 1.1.

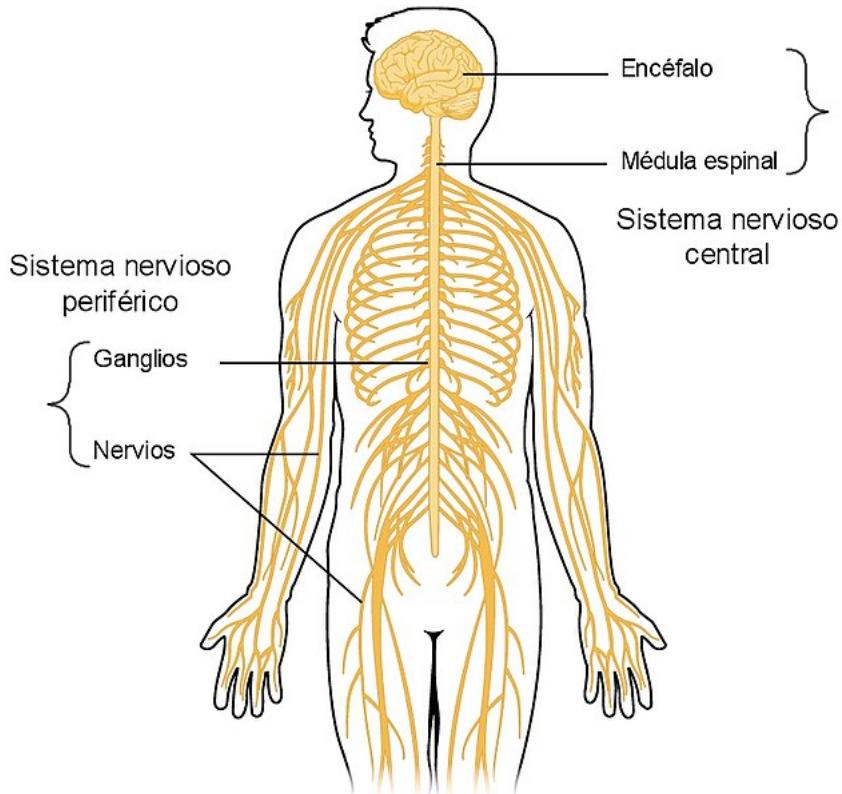


Figura 1.1 Sistema nervioso periférico y central. *Overview of Nervous System esp*, OpenStax, 20 diciembre 2018, WIKIMEDIA COMMONS, https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/0/07/1201_Overview_of_Nervous_System_esp.jpg, CC BY-SA 4.0

En el sistema nervioso periférico tenemos al:

- **Sistema somático** se controla de forma voluntaria (como se puede ver en la figura Figura 1.2), se conforma de nervios conectados a músculos voluntarios esqueléticos y receptores sensoriales, de los cuales unos son :
 - ★ de entrada, **aferentes**.
 - ★ de salida, **eferentes**.

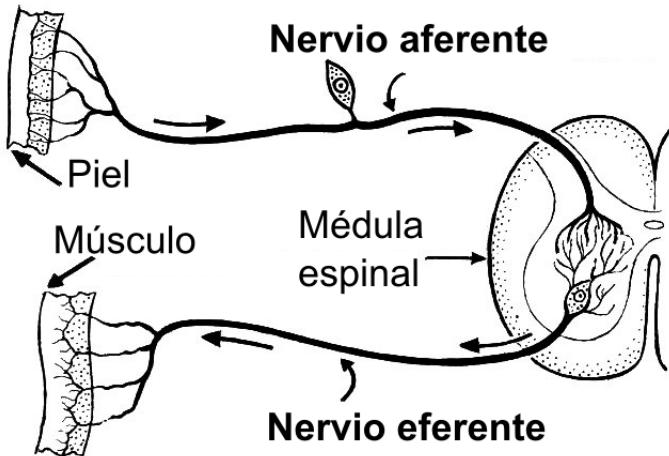


Figura 1.2 Diagrama explicativo del recorrido eferente y el aferente. Pearson Scott Foresman, 26 August 2010, WIKIMEDIA COMMONS, https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/3/3e/Afferent_%28PSF%29.es.png, CC0 ¿Ref?

- **Sistema autónomo** funciona de forma involuntaria, se conforma de nervios que se conectan con el corazón, los vasos sanguíneos, los pulmones, el estómago, los intestinos, glándulas.

Ahora respecto al sistema nervioso central, lo integran:

- La médula espinal
 - * Dentro de esta hay una organización, nuestro sistema va a procesar la información en capas. Sin embargo, aquí también encontramos **ciclos de retroalimentación local**, es decir, nervios que no necesitan pasar por todo el procesamiento cerebral, las señales que entran simplemente llegan a una fase local de procesamiento e inmediatamente reaccionan (ver el ejemplo de la Figura 1.3). Los **reflejos** ocurren en un ciclo local y esto también puede convertirse en algo muy importante a la hora de hacer cálculos, no siempre es necesario pasar todo por todas las capas de procesamiento.
 - * **Señales de control motor descendientes** del cerebro hacia las neuronas motoras, estas son señales que provienen de un campo en una capa mucho más alta de procesamiento y provocan movimientos.
 - * **Axones sensoriales ascendentes** donde el cuerpo de la neurona está cercano a los músculos, haciendo que la información/ señales viajen hacia "arriba", desde los músculos o piel, hasta el cerebro.
- El encéfalo

1. Neurona biológica

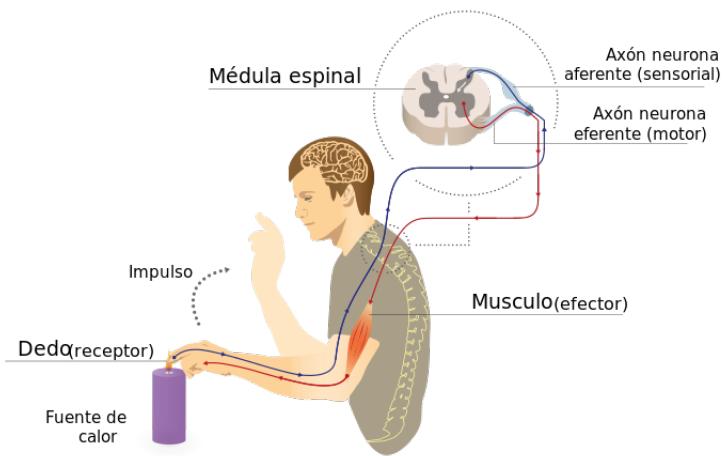


Figura 1.3 Esquema explicativo del arco reflejo. *Marta Aguayo, 18 diciembre 2014, WIKIMEDIA COMMONS, https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/c/cb/Imgnotraçat_arco_reflex_esp.svg, CC BY-SA 3.0.*

En su mayoría, cada colección de nervios que sale de la base del cerebro se asocian con funciones muy específicas.

Notas:

- El sistema nervioso está compuesto por diferentes niveles locales, entradas y salidas.
- El procesamiento que esté ocurriendo en el encéfalo puede realizarse a través de diferentes capas y eso se verá reflejado cuando nosotros definamos arquitecturas para las redes neuronales.
- Las redes neuronales actuales, que han tenido más éxito, se componen de diferentes subunidades o diferentes redes realizan cómputos locales. Es decir esta estructura global que estamos viendo, se está empezando a reproducir/imitar ya con las redes neuronales computacionales.

Cerebro

En esta parte vamos a preocuparnos sobre todo por la parte funcional. Haciendo una breve analogía, vamos a hacer una visión general del “hardware”, para ver qué efectos va a tener en el “software”. La arquitectura de cada cerebro es diferente al cerebro de otras personas, aunque por lo general comparten divisiones en grandes regiones bien identificadas. Se ha intentado averiguar qué está haciendo cada región con diferentes estudios. Por

ejemplo: se recurre a detectar cuánta sangre se está bombeando en diferentes regiones del cerebro dependiendo de los estímulos que se le presentan a una persona; o si alguna persona tiene un padecimiento se toman escaneos para ver qué regiones del cerebro están funcionando y cuáles presentan lesiones, a partir de las lesiones y de la identificación de la actividad que ya no se puede realizar de forma normal, se infiere qué región era responsable de esa actividad, que ahora está dañada.

Gracias a esos estudios, se ha logrado identificar más o menos en manera general, a qué se dedica cada una de las regiones del cerebro. En ocasiones no se puede decir exactamente qué tan vinculadas están las regiones o por qué se están activando otras regiones. Hay partes funcionales que se comparten entre las diferentes regiones y no están ubicadas en un solo lugar.

Otra parte importante a mencionar es el cerebelo, que se considera prácticamente vital, es responsable de funciones tales como el equilibrio, la coordinación, el control fino de los músculos, de hecho tiene más neuronas que el cerebro y aun así hay niños que nacen y viven sin cerebelo.

A continuación se mencionan algunas de las diferentes funciones de las regiones, que se han identificado en la Figura 1.4:

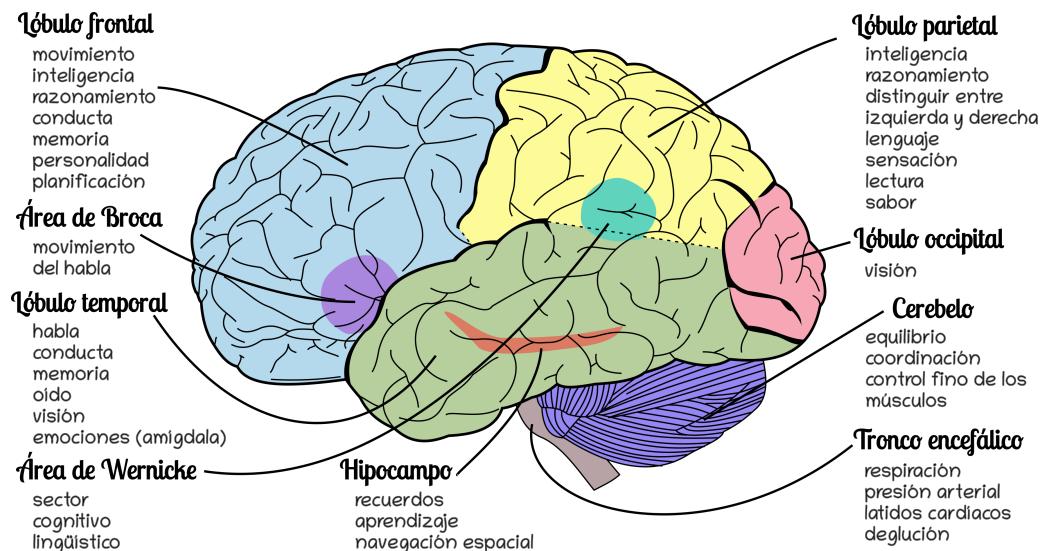


Figura 1.4 Diagrama básico de las regiones del cerebro.

Lóbulo frontal se le puede asociar con la parte del raciocinio, la parte de inteligencia, la conducta, la memoria, la personalidad, la capacidad para realizar planes complejos a largo plazo y también es responsable de algunas actividades de movimiento. Dentro de este destaca el Área de Broca, su principal función es el movimiento del habla, mover los labios, la boca.

Lóbulo temporal aquí está otra parte del habla, que tiene que ver más con el uso de símbolos para el lenguaje, la conducta, memoria, aquí se procesan las señales pro-

1. Neurona biológica

venientes del oído, un poco de visión y emociones. Dentro de este está (compartida con el lóbulo parietal) el área de Wernicke, que trabaja con la parte lingüística y de cognición.

Hipocampo, se encuentra en la base del cerebro. Trabaja con recuerdos, aprendizaje y navegación espacial, cómo sabemos cómo llegar de un lado hacia otro.

Lóbulo parietal trabaja con la inteligencia, razonamiento, distinguir entre izquierda y derecha, lenguaje, sensación, lectura y sabor.

Lóbulo occipital se dedica prácticamente solamente a visión, es una región un tanto amplia. En particular en el área de robótica cuando están programando un robot móvil, los robots tienen dos laptops y una de ellas se dedica prácticamente sólo a procesar la visión.

Cerebelo se encarga del equilibrio, la coordinación fina de los músculos.

Tronco encefálico se encarga de la respiración, presión arterial, latidos cardíacos, deglución, conciencia.

Zonas funcionales

Para visualizar mejor la parte de la arquitectura que tiene el cerebro para realizar todo lo que se le conoce como “la ruta desde la sensación hasta la cognición” veremos un diagrama de la parte funcional del cerebro.

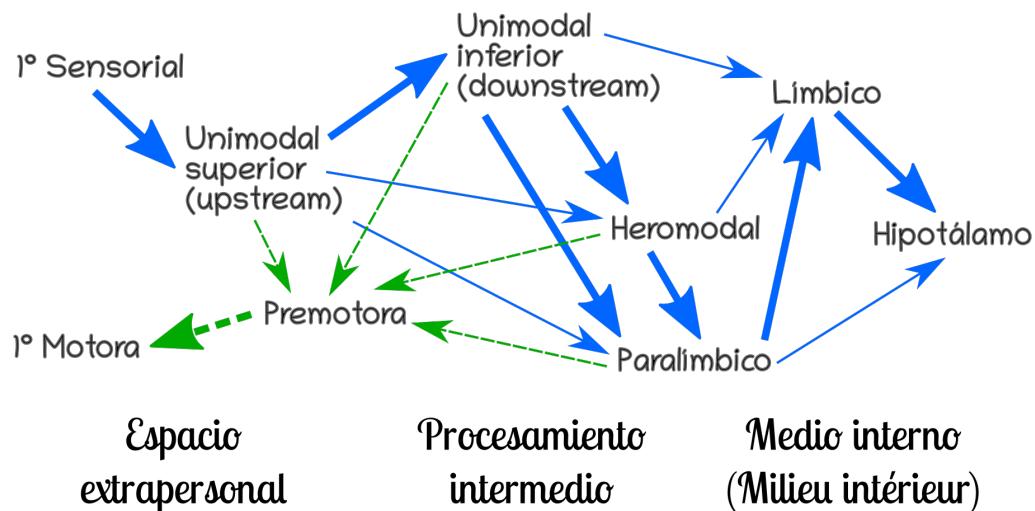


Figura 1.5 Diagrama de la arquitectura del cerebro a nivel funcional. (Mesulam 1998)

Explicando la Figura 1.5, en la primera parte (espacio extrapersonal) vamos a pensar en la entrada sensorial, que se enfoca muchísimo en la parte de visión y audio (en general todos los sentidos), notamos que de las neuronas que están en la parte sensorial, su

primera conexión es hacia una capa que se le llama unimodal superior, aquí se procesa la información de cada sentido de manera individual, es decir, las neuronas o solamente están procesando visión o solamente audio, todavía no se mezclan, por ejemplo de visión, se separan colores e intensidad lumínica, se empieza a detectar algunas esquinas, alguna inclinación, la dirección de las luces y las sombras. Notemos que desde aquí hay una rápida conexión a la sección premotora y luego hacia la parte motora, recordando la mención de los circuitos locales y de reflejos, aquí prácticamente lo podemos ver en este pequeño camino.

Pasando de este primer procesamiento básico entramos al siguiente que es el unimodal inferior. Aquí aún se está trabajando con procesamiento de una sola modalidad: visión sigue siendo visión, audio sigue siendo audio; pero ya son procesamientos un poco más complejos, por ejemplo, reconocimiento de rostros, de objetos. En esta parte tenemos un rápido ciclo de regreso a la parte premotora, por ejemplo la acción de ver a mi mamá y saludarla (aquí aún no se tiene que razonar demasiado).

La siguiente fase (medio interno), comprende tres áreas. En el área **heromodal** ya se integran diferentes modalidades, como audio y visión; por ejemplo: oigo que me hablan y volteo a ver, aquí se está juntando ambas cosas. El **límbico** y el **paralímbico** trabajan con la parte de las emociones y conceptos abstractos.

Finalmente, llegamos al **hipotálamo**, que es donde están todas las emociones, en las conexiones entre estas regiones estarían los procesamientos de alto nivel.

Ahora estas diferentes regiones se replican de cierta manera cuando estamos haciendo los diseños de las arquitecturas modernas para redes neuronales. En algunas ocasiones se comienza con algunas capas de neuronas, haciendo procesamientos con una sola modalidad, extrayendo datos básicos, después se van componiendo en figuras más complejas y después hasta podemos combinar bloques de neuronas, para poder resolver problemas que tomen en cuenta diferentes modalidades.

Neurona biológica

La neurona

La neurona es un tipo de célula perteneciente al sistema nervioso central, que se comunica tanto por señales eléctricas como por señales químicas. Cada neurona tiene:

- Un cuerpo celular (**soma**) que contiene un núcleo y otros componentes celulares.
- Una zona de recepción con protuberancias elongadas denominadas **dendritas**.
- Una zona de emisión conocida como **axón**, el cual está compuesto de:

1. Neurona biológica

- ★ Cono axónico.
- ★ Membrana plasmática axónica y citoplasma.
- ★ Recubrimiento de mielina, interrumpido a intervalos regulares por nódulos (anillos) de Ranvier.
- ★ Terminales del axón donde se encuentran los **botones sinápticos**.

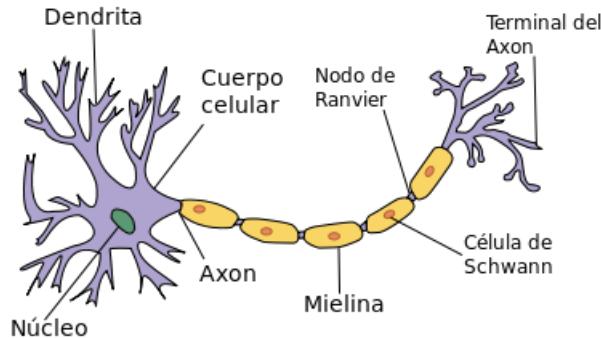


Figura 1.6 Neurona, Acracia, 14 January 2007, Wikimedia Commons, <https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Neurona.svg>, Creative Commons Attribution-ShareAlike 2.5 Generic

Pensemos en la neurona como toda una compuerta, por un lado, está el cuerpo de una neurona típica, por otro lado están las dendritas y axones donde tienen lugar la mayoría de las reacciones que permiten la transmisión de información. La forma en que fluye esta información es mediante sustancias químicas (neurotransmisores) y iones (Na^+ , K^+ , Cl^- , etc.) que se están intercambiando entre la parte de afuera y de adentro de la neurona, a través de su membrana.

Particularmente en las dendritas y axones se tienen terminaciones que se pueden conectar con otras neuronas y de esta manera permitir el paso de información. En estos puntos de conexión se identifica a las neuronas participantes como:

- Neurona presináptica, transmite una señal.
- Neurona postináptica, recibe una señal.

La presencia de estos iones provoca que en el interior de la neurona haya una cierta carga eléctrica, mientras que en el exterior (el líquido de afuera) hay otra carga eléctrica, es decir, hay una **diferencia de potencial** entre el interior y el exterior de la neurona, por eso se dice que la membrana axónica en sí misma tiene una carga eléctrica. Dado que es porosa, esta membrana va a estar intercambiando partículas con el exterior, esto va a hacer que su polarización varíe con el tiempo, si en algún momento la diferencia de potencial neta rebasa un cierto umbral la neurona emitirá un pulso que afectará a las neuronas con las que esté conectada.

Transmisión de señales y almacenamiento de información:

1. La neurona desde sus dendritas recibe señales de otras neuronas vecinas.
2. Cada señal se va acumulando en su cuerpo hasta el cono axónico, donde se van a estar sumando la contribución de todos los efectos de cambios de potencial.
3. En el momento que se rebase un cierto valor umbral, la diferencia de potencial se propaga hasta los botones terminales.
4. La neurona entra en un período refractario, donde empieza a cambiar el potencial entre el cono axónico y el axón de la neurona.
5. Se va a transmitir un disparo eléctrico en seguida,
6. La neurona se va a quedar totalmente quieta, durante un breve momento para que la señal pueda viajar hacia el axón.
7. Se va a notar un cambio muy violento en el voltaje, que se va recorriendo a lo largo de todo el axón.

La neurona típica tiene unas células de mielina, que forman nodos que van cubriendo al axón para evitar que se pierda la señal, estos nodos recargan la señal permitiendo que avance al siguiente nodo, donde se recarga nuevamente y avanza, hasta que logra llegar al final de axón.

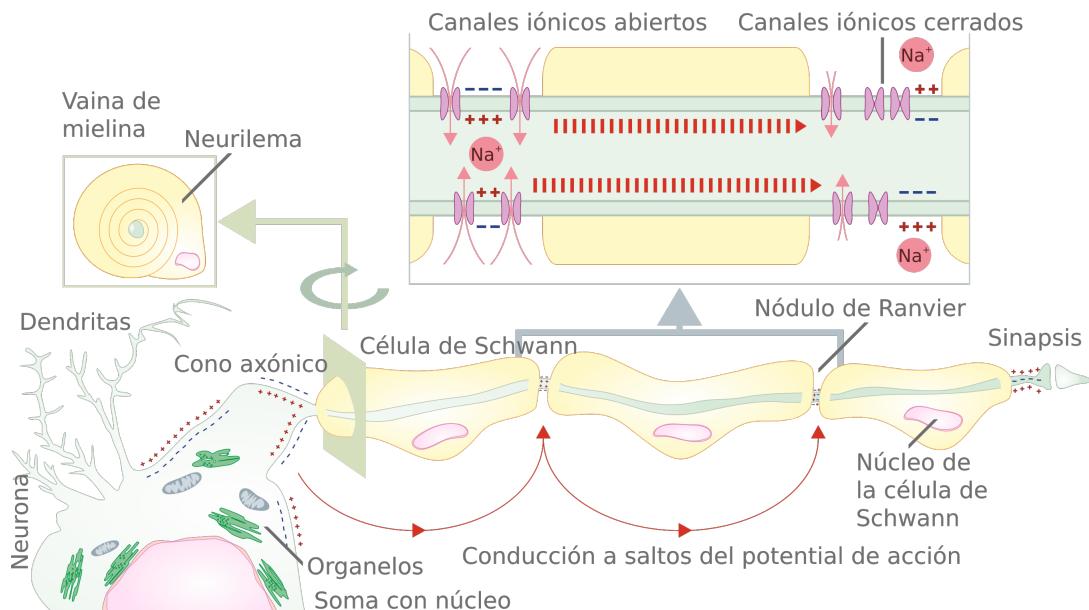


Figura 1.7 Corriente iónica por el axón (efecto de corto plazo), Helixitta, 1 octubre 2015, Wikimedia Commons, https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Propagation_of_action_potential_along_myelinated_nerve_fiber_en.svg, Creative Commons Attribution-ShareAlike 4.0 International

1. Neurona biológica

Este trayecto puede ir de una neurona a unas pocas neuronas vecinas, hasta unos cuantos metros (ej. esta podría estar en la médula espinal y el axón llegar hasta el dedo del pie). Cuando la señal llega a la terminal del axón, hay varias terminales que van a reaccionar ante el cambio de electricidad mediante la liberación de unas vesículas, que contienen **neurotransmisores**.

Elementos de las neuronas y tipos

Elementos que participan durante la transmisión de señales:

- **Impulsos eléctricos:** potenciales de acción, que son cambios de voltaje que van a ir ocurriendo a lo largo del axón. Sigue una vez que se acumularon demasiadas señales a través de las dendritas, entonces la neurona puede disparar un impulso eléctrico, a través del axón, que va a provocar que su terminal libere más químicos, estos químicos son los que hacen los efectos pequeños en cada uno de los cuerpos de las neuronas postsinápticas.
- **Neurotransmisores:** son los mensajeros químicos que se comunican entre neuronas adyacentes. La liberación de neurotransmisores de una neurona ayudará a despolarizar o hiperpolarizar (aumentar la magnitud de la carga) de la neurona adyacente, lo que hará que sea más o menos probable que ocurra un potencial de acción en la siguiente neurona.
- **Plasticidad:** modificación a largo plazo de las conexiones entre neuronas. En el cerebro las neuronas pueden cambiar de manera permanente, perder canales (que permiten el intercambio de nuevos transmisores sin impulsos eléctricos), formar más canales o incluso pueden crear protuberancias. Cuando un cerebro aprende está transformando su arquitectura, es decir, los aprendizajes de largo plazo modifican el cerebro y en consecuencia va a pensar y reaccionar distinto que antes del aprendizaje.

Clasificación de tipos de neuronas:

- **Neurona sin axones**, nunca dispara, pero sí tiene intercambios de neurotransmisores en las dendritas
- **Neurona bipolar**, tiene dos axones.
- **Neurona unipolar**, solamente hay una conexión entre el cuerpo y el axón, pero el axón tiene dos ramas, cuando dispare va a disparar hacia los dos lados, haciendo llegar su señal a diferentes regiones.
- **Neurona multipolar**, la más conocida, empieza con un cuerpo con dendritas y luego un largo axón que termina con varias terminaciones axónicas.

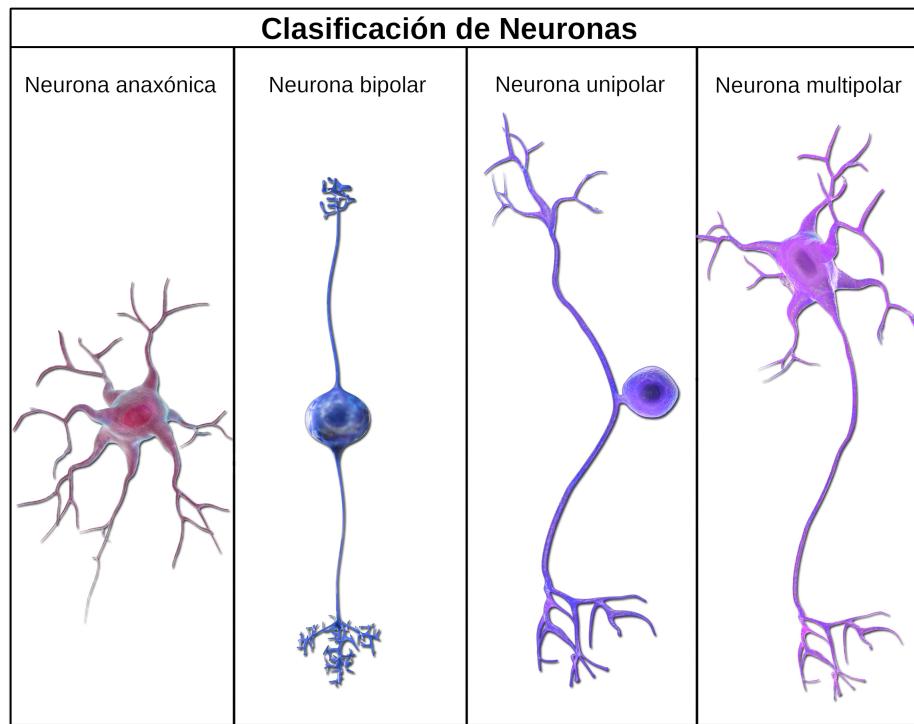


Figura 1.8 Representación de la clasificación de neuronas, BruceBlaus, 26 junio 2017, Wikimedia Commons, https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Neuron_Classification.png, Creative Commons Attribution-ShareAlike 4.0 International

Cuando modelamos redes neuronales lo típico es modelar una neurona con dendritas, su disparo y su axón, que se conecta con las dendritas de las siguientes neuronas; pero aquí ya estamos viendo que la naturaleza nos dice que hay más opciones, por lo que podríamos plantearnos cómo hacer representaciones para estos otros tipos de conexiones que nos presenta la naturaleza, un poco diferentes pero que tal vez puedieran ofrecer resultados más satisfactorios en ciertos escenarios.

Sinapsis

Aquí veremos más a detalle cómo una neurona recibe o transmite información a otras neuronas, donde para un solo disparo están participando un montón de elementos que veremos más adelante.

El punto en que dos neuronas transmiten información se llama **sinapsis** y es mediante conexiones que se dan en las terminales del axón (vesículas sinápticas) de la neurona presináptica hacia la postsináptica. Es importante notar que estas neuronas no tienen contacto anatómico, sino que están separadas por un espacio muy pequeño, la **brecha sináptica**. Lo que sucede en estas conexiones es un intercambio electroquímico que produce cambios de polaridad a lo largo la membrana.

1. Neurona biológica

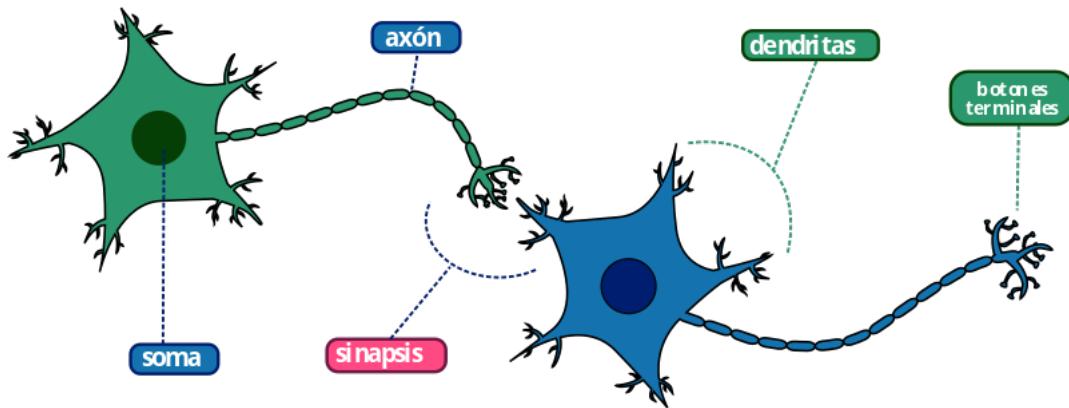


Figura 1.9 Part of neurons in Spanish, Dana Scarinci Zabaleta, 24 febrero 2019, Wikimedia Commons, https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Part_of_neurons_in_Spanish.svg, OpenStax, CC0

Clasificación de sinapsis

Las terminales del axón de la neurona presináptica puede hacer contacto con la neurona postsináptica en:

1. su dendritas (conexión axodendrítica),
2. su cuerpo (soma), (conexión axosomática) o
3. su axón, (conexión axoaxónica).

También podemos distinguir entre dos tipos de sinapsis:

Sinapsis eléctrica: las membranas de las células pre y posinápticas se unen en la brecha sináptica por una unión tipo brecha (*gap*), o unión comunicante, que son pequeños canales que permiten el paso de iones (Figura 1.10).

1. Posee una transmisión bidireccional de los potenciales de acción.
2. Sincronización en la actividad neuronal, lo cual hace posible una acción coordinada.
3. Los potenciales de acción pasan a través del canal proteico directamente sin necesidad de la liberación de los neurotransmisores, por tanto, es más rápida.

Sinapsis química: la neurona libera moléculas neurotransmisoras a otra neurona adyacente en un pequeño espacio, la brecha sináptica (Figura 1.11). Su funcionamiento se puede resumir en cuatro etapas principales:

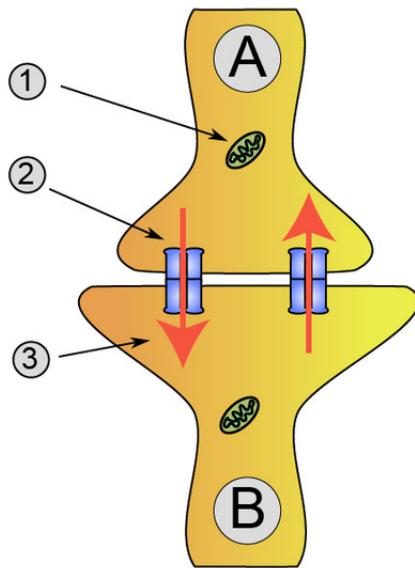


Figura 1.10 Synaptical transmission (electrical). Neurona A transmisora, Neurona B receptora, 1. Mitochondria, 2. Uniones gap formadas por conexinas, 3. Señal eléctrica, Nrets commonswiki, 23 September 2005, Wikimedia Commons, https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Synapse_diag2.png, Inkscape 0.42, CC-BY-SA 3.0

1. Un potencial de acción llega al botón terminal proveniente desde el cono axónico.
2. Los neurotransmisores contenidos en las vesículas que están en los botones terminales, son liberados en la brecha sináptica y se dispersan.
3. Cada neurotransmisor se une a su receptor ubicado en la membrana de la neurona postsináptica.
4. El exceso de neurotransmisores que queda en el espacio sináptico es degradado o recaptado.

Detallando el proceso de la sinapsis química, la neurona postsináptica está recibiendo un montón de señales por la liberación de neurotransmisores tanto de sus vecinos, como lo que ella misma va intercambiando, una vez que están generando el efecto completo de cambiar la polarización de la membrana, van a provocar que la neurona haga un disparo eléctrico. En el cuerpo están llegando estos intercambios de iones que se suman en el cono axónico, empiezan a viajar a través del axón, en las vainas de mielina (donde se refuerza la señal). Aquí hacemos mención por primera vez de los iones positivos: sodio y potasio, estos iones lo que hacen es, que *la membrana tenga una cierta carga la mayor parte del tiempo*. Cuando salen tres sodios entran dos potasios, entonces siempre hay más positivos afuera que en el interior de la neurona, es decir, por lo general *tiene una*

1. Neurona biológica

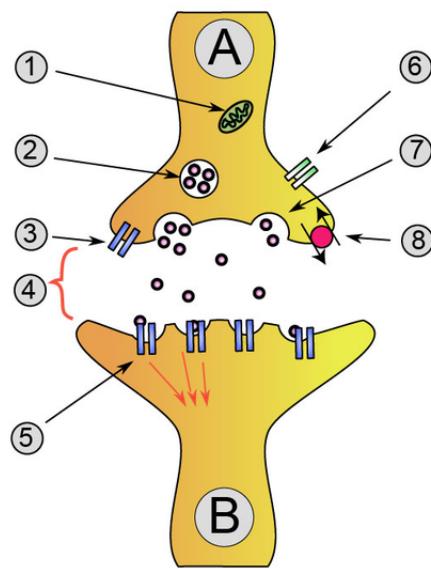


Figura 1.11 Synaptical transmission (chemical). Neurona A transmisora, Neurona B receptora, 1. Mitocondria, 2. Vesícula sináptica llena de neurotransmisor, 3. Autorreceptor, 4. Brecha sináptica, 5. Receptor de neurotransmisores, 6. Canal de calcio, 7. Neurotransmisor liberador de vesículas fusionadas, 8. Bomba de recaptación de neurotransmisores, Utilisateur:Dake, 23 September 2005, Wikimedia Commons, https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Synapse_diag1.png, Inkscape 0.42, CC-BY-SA 3.0

carga más negativa que su entorno (ver 1.17). Cuando ocurre un disparo de la neurona y se da el cambio de polarización en la membrana, se abren sus poros/ canales. El hecho que los canales abran o cierren depende de varios cambios que puedan estar ocurriendo alrededor de la neurona, en particular los que transmiten el disparo eléctrico, reaccionan ante el cambio de potencial que ocurrió en la membrana de la neurona.

La señal va pasando por los nodos de Rainvier, se refuerza y pasa por los canales iónicos ya abiertos, hasta finalmente llegar a la sinapsis a esto le llaman la **conducción a saltos** (ver 1.7). Ahora lo que ocurre al final del recorrido es que, el cambio de electricidad otra vez provoca que unas vesículas, que están en el interior de la neurona, que contienen neurotransmisores, se peguen a la membrana axónica y se liberen esos neurotransmisores nuevamente a otra neurona.

Entonces la información le va a llegar a la neurona vecina, en la forma de neurotransmisores que fueron liberados (en lo que sea que lo haya recibido, típicamente son dendritas, pero podría ser su cuerpo o su axón), eso es lo que va a percibir la otra neurona y otra vez esta otra neurona va a empezar a sumar los efectos de estos neurotransmisores, para que en algún momento decida a lo mejor disparar y otra vez provocar que se liberen neurotransmisores a su final e influir con otras neuronas.

Neurotransmisión

Cuando la neurona no está mandando señales eléctricas, tiene un potencial de reposo, su diferencia de potencial entre el interior y el exterior de la neurona, es más negativo en el interior y más positivo (o menos negativo) en el exterior. En el caso de las sinapsis químicas, llega un disparo y se altera el potencial de la membrana, entrarán las células de calcio y entra la participación de las vesículas para liberar neurotransmisores. Los neurotransmisores están flotando en la brecha sináptica, viajan hasta adherirse a los receptores de la neurona posináptica, en ese momento están alterando el intercambio normal que existe entre iones en el interior y en el exterior de la célula y van a cambiar las cargas netas que hay adentro y afuera. Este es un cambio local que está ocurriendo en las espinas dendríticas (pequeñas prolongaciones citoplasmáticas).

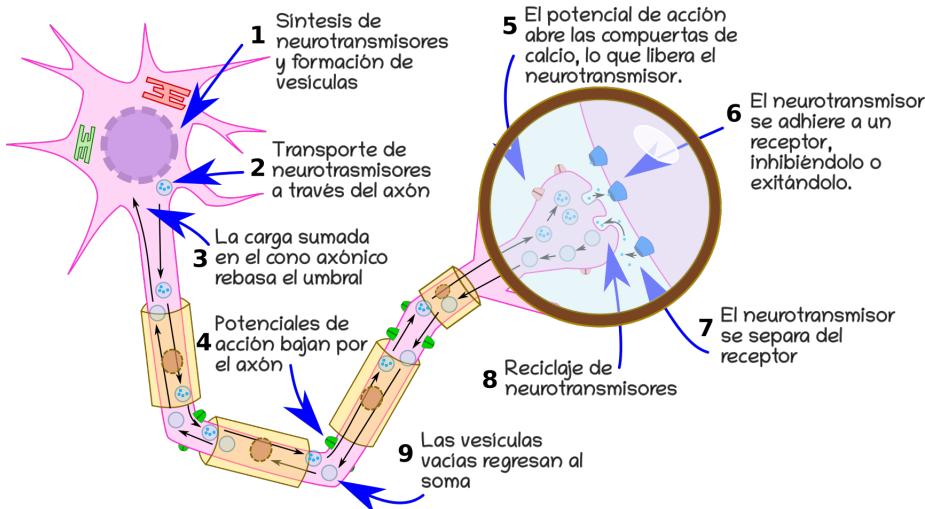


Figura 1.12 Esquema detallado de una neurotransmisión.

este cambio en sí es una especie de transferencia de información, pero muy local. Se puede distinguir entre dos efectos en la membrana:

- **El efecto excitatorio**, despolariza la membrana postsináptica es decir ahora va a ser más propensa a disparar porque ya le cambió la diferencia de potencial que tenía.
- **El efecto inhibitorio**, hiperpolariza la membrana postsináptica, es decir, va a incrementar la diferencia de potencial entre el exterior e interior, pero de tal manera que ahora ya no va a querer disparar esta neurona.

De estos efectos también va a darse el efecto de la **plasticidad**, que es cuando dos neuronas tienden a excitarse juntas, después de esta conexión se va a tender fortalecer, si más bien tienden a inhibirse lo que va a suceder después es que estos canales empiezan a encoger, haciendo que se reduzcan y ya no dispare.

1. Neurona biológica

Ejemplos de neurotransmisores: serotonina, dopamina, oxitocina, endorfinas, adrenalina.

Campos receptivos

Aquí lo que nos interesa es, en qué región puede ser afectada una neurona. Se define un campo receptivo, como la región en la periferia sensorial dentro de la cual los estímulos pueden, influir la actividad de las células sensoriales (ver 1.13). Hay diferentes niveles donde pueden aparecer los campos receptivos tanto cerca de la piel, cerca del gusto, el olfato, donde las neuronas van a estar asociadas con otras células que les pueden ayudar, que son sensitivas a los cambios correspondientes, a veces la misma neurona va a tener alguna protuberancia especializada. También podemos encontrarlos más hacia adentro del nivel de procesamiento, no necesariamente todos van a estar pegados a la parte sensorial física.

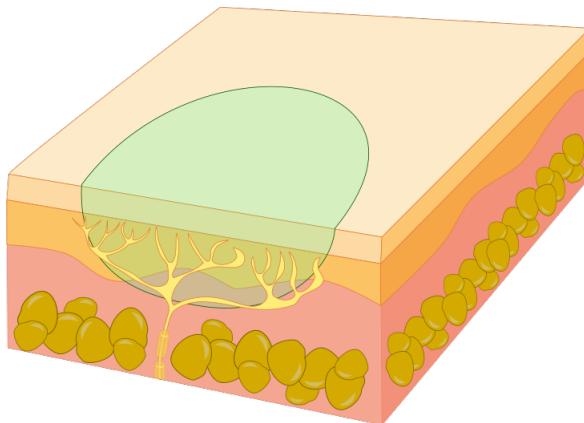


Figura 1.13 Campo receptivo. Se muestra una región que está bajo cierto estímulo, las terminales de la neurona están recibiendo información y transmitiéndola.

Comprenden a los receptores sensoriales que alimentan a las neuronas sensoriales, pueden ser:

- Receptores específicos en una neurona como protuberancias especializadas.
- Conjuntos de receptores capaces de activar una neurona mediante conexiones sinápticas.
- Describen la ubicación donde debe estar presente un estímulo sensorial para licitar una respuesta desde una célula sensorial.

Ejemplos:

- En la piel tenemos células que nos están protegiendo en la epidermis, una de las células auxiliares **la célula de Merkel** que es sensible a la presión. Esta puede estar muy cerca a una neurona, sus terminales se activan de acuerdo a las acciones de la célula de Merkel y va a pasar la información (ver 1.14).

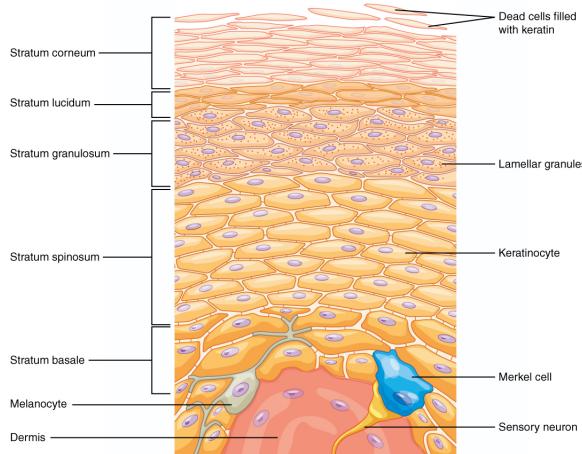


Figura 1.14 Capas de la epidermis y en azul la célula de Merkel.

- El ojo, para procesamiento visual, actualmente se utiliza una de las redes neuronales más famosas que son las **redes convolucionales**, que están inspiradas en el ojo, nosotros tenemos campos receptores donde hay unos fotorreceptores en los conos y los bastones que son sensibles a luces de diferentes colores a cambios de intensidad de la luz y que pueden detectar, por ejemplo, en una cierta región física si está llegando luz o por ejemplo, si llega en la periferia entonces va a inhibir el disparo de estos elementos, por otro lado, tenemos también su complemento que permite ser estimulado por las señales que llegan, como que en la parte de afuera de un círculo y más bien se inhiben con un estímulo en la parte de afuera (ver 1.15). Esta especie de celdas que tienen una posición física y geométrica relevante van a determinar cuando disparan o no las neuronas. Los siguientes niveles del cerebro se van a encargar de interpretar mejor el cambio de sombras, como a una persona que pasó corriendo, un auto que se está moviendo cerca o reconocer algún tipo de alimento.

Señal eléctrica

Veamos que pasa en los canales de iones y el paso de la señal eléctrica primero diferenciemos los tipos de compuertas iónicas:

- Canal por fuga:** Estos se abren y cierran aleatoriamente, todo el tiempo están activos en la neurona, intercambiando por ejemplo: sodio y potasio.

1. Neurona biológica

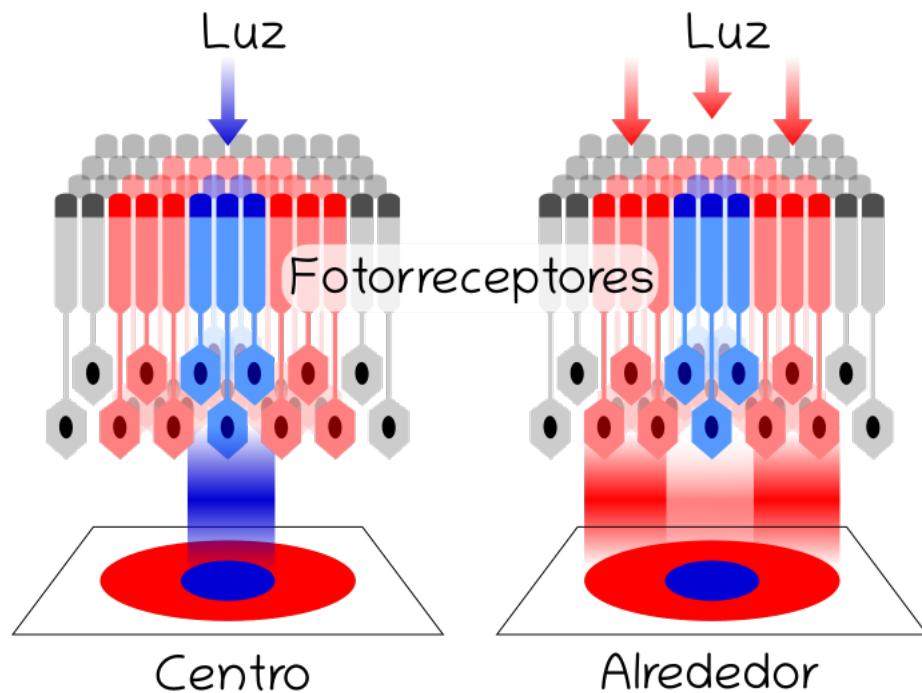


Figura 1.15 Capas de la epidermis y en azul la célula de Merkel.

- **Canal regulado por ligado:** Aquí se hace presente un neurotransmisor que es el que va a provocar que se abran o al revés impedir que se abran.
- **Canal por estímulo mecánico:** Permiten que pasen más iones o menos iones dependiendo, si se ejerció una presión, por ejemplo, con las neuronas cerca de la piel, las células de merkel.
- **Canales regulados por el voltaje:** Tienen el rol protagónico en la transmisión del pulso eléctrico (que se ha estado mencionando) describiendo uno de ellos, este canal tiene una pequeña compuerta abajo, que la puede cerrar independientemente del hecho de que el canal se abre o se cierre. Existen varias variantes de este tipo de canales regulados por el voltaje, la forma en que se están activando y desactivando sus compuertas, es lo que permite el paso del pulso.

Existen realmente una buena cantidad de iones presentes en el cerebro, pero los más protagonistas son precisamente el **potasio**, el **sodio**, el **cloro** y son los que vamos a utilizar para un modelo matemático de las neuronas.

Por último veamos brevemente **la neuroplasticidad**, es lo que nos permite el aprendizaje a largo plazo en el cerebro, es un mecanismo de aprendizaje del cerebro en el cual:

Cuando las neuronas se activan simultáneamente con frecuencia la conexión entre ellas se fortalece.

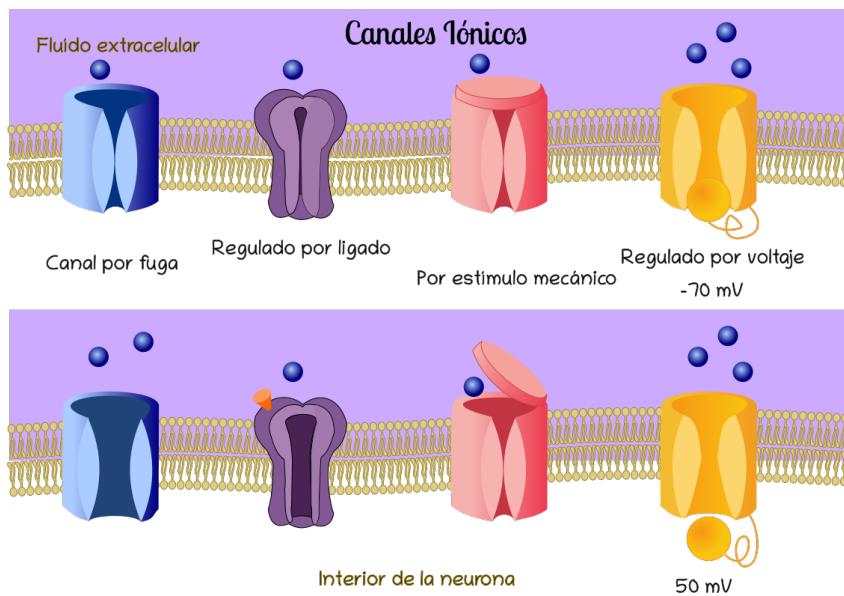


Figura 1.16 Representación de la clasificación de los canales iónicos (más representativos).

Este mecanismo constituye la principal inspiración para el diseño de las redes neuronales artificiales, concretamente en esto se inspiran los algoritmos de entrenamiento. Lo que se hace es calcular, qué conexiones debemos reforzar y cuáles debemos de debilitar para que nuestras redes neuronales calculen las funciones que a nosotros nos interesan.

1. Neurona biológica

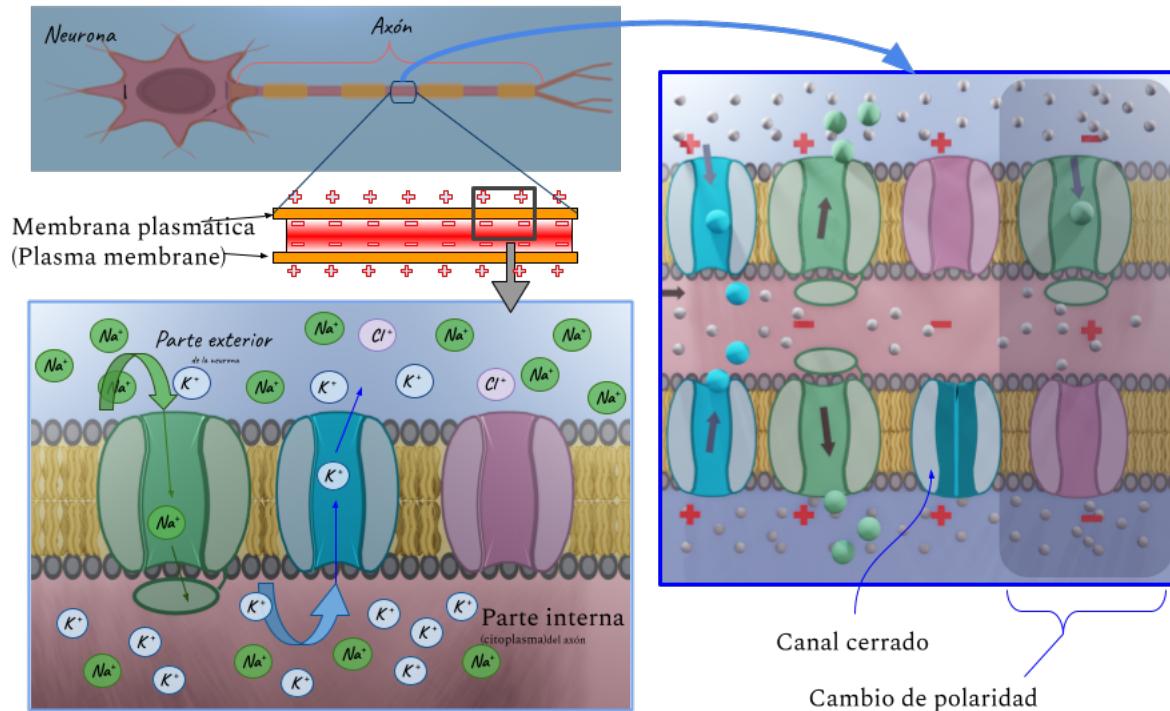


Figura 1.17 Representación de la membrana axónica en potencial de reposo en la parte inferior izquierda, y en la parte derecha con un estímulo que genera el cambio de polaridad en la misma, así como el cierre de canales y paso de iones.

2 | Modelo de Hodgkin-Huxley

Introducción

Esta sección se enfocará a la parte de transmisión de información y tipo de operaciones lógicas matemáticas que ocurren para que un cerebro pueda realizar cómputos. Específicamente se detallará la mecánica de los disparos de las neuronas, siendo estos una de las características más relevantes a la hora de modelar las redes neuronales artificiales. Si en algún momento de su vida han visto temas relacionados con: compuertas digitales, arquitectura de computadoras o diseño electrónico digital, les será más fácil abstraer el concepto, pues vamos a ver los procesos de paso de información a través de compuertas pero en un sistema biológico (de la naturaleza).

Notemos primeramente un impulso nervioso, recordemos que éste es una onda que avanza desde el cono axónico de la neurona hasta la neurona postsináptica. Esta onda electroquímica ocurre dada la diferencia de potencial entre la parte interna y externa de neurona, esta diferencia se da a consecuencia de las distintas concentraciones de iones en ambos lados de la membrana plasmática. Los estados en la membrana plasmática (del axón) se pueden diferenciar en, potenciales neuronales:

- **Potencial de reposo:** Es la diferencia de cargas en la membrana y está polarizada a -70mV. Es positiva por fuera (Na^+) y negativa por dentro por Cl^- y proteínas- y no transmite señal.
- **Potencial de acción o membrana:** Un estímulo umbral de 55 mV, despolariza la membrana y abre los canales del Na^+ y K^+ y avanza la señal nerviosa, es un cambio muy rápido en la polaridad de la membrana de negativo a positivo y vuelta a negativo.

Retomando la sinapsis eléctrica, donde participan los canales iónicos y las entradas de las neuronas (dendritas) están siendo alteradas poco a poco, hasta que ocurre la suficiente carga (diferencia de potencial) en sus dendritas y en el cuerpo de la neurona, para que desde el cono axónico se dé un disparo o potencial de acción (spike), transmitiendo la información gracias a la apertura y cierre de ciertos canales de iones cargados. Este

2. Modelo de Hodgkin-Huxley

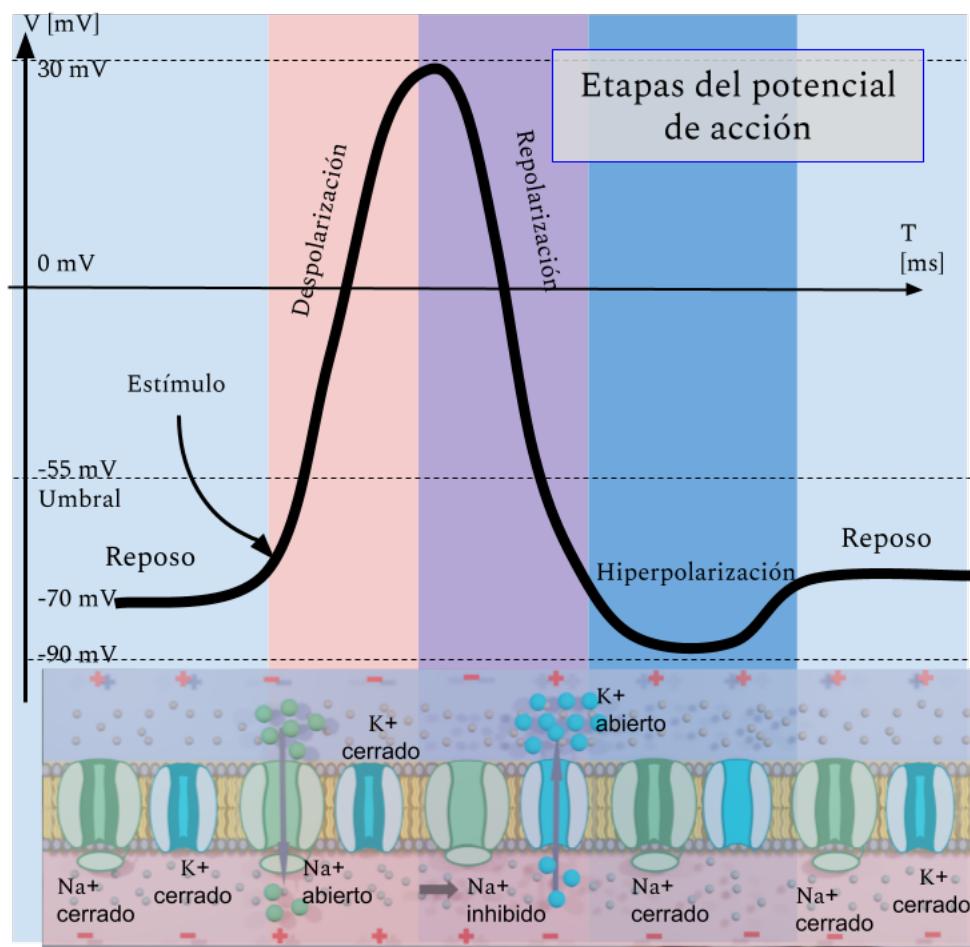


Figura 2.1 Representación gráfica de la respuesta de los canales iónicos de sodio (Na^+ en verde) y potasio (K^+ en azul) ante un estímulo de voltaje, dando como resultado un potencial de acción que viajará a lo largo de todo el axón.

cambio brusco de la diferencia de potencial, se nota en forma de un pulso eléctrico (ver 2.1), para saber más a detalle qué está ocurriendo en esta rápida elevación en la diferencia de potencial, se contará de dónde salió este modelo y por qué toma la forma que tiene.

Los primeros científicos que estudiaron el potencial de acción y dieron un modelo (de la unión sináptica eléctrica) fueron Alan Lloyd Hodgkin y Andrew Fielding Huxley alrededor de 1952, obteniendo un modelo matemático¹, que intenta explicar qué es lo que estaba pasando en las neuronas. Ellos trabajaron con un calamar gigante (que puede medir hasta 4 metros de largo) que dado su gran tamaño, tiene un axón también bastante gigantesco, que recorre casi la mitad del cuerpo del calamar y su grosor es de medio milímetro, considerando el tamaño estándar de un axón de una neurona (1-20 μm). El axón del calamar gigante es tan grande que les permitió introducir dispositivos para medir

¹El texto original de este experimento se puede encontrar en la siguiente url: <https://physoc.onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1113/jphysiol.1952.sp004764>

el voltaje, es decir, la diferencia de potencial entre, el interior de la neurona y la parte de afuera (el ambiente externo de la neurona). Con estas mediciones experimentales que lograron obtener, se pudo determinar qué pasaba con las cargas eléctricas tanto en el interior como en el exterior y así estudiar cómo se lograba la transferencia de electricidad cuando disparaba este pulso. Se dan cuenta de que podían modelar este comportamiento como un circuito eléctrico donde están corriendo estas corrientes, si bien aún no sabían todavía cuál era exactamente el mecanismo biológico por detrás, si observaron que había dos elementos protagónicos que serían el sodio y el potasio. Notaron que estos existen en diferentes concentraciones, en la parte de afuera y en la parte de adentro de las neuronas. Con esto nosotros podemos aprender también el por qué es importante consumir algo de sal y nunca estar bajos de potasio, pues estos dos elementos son indispensables para que las neuronas puedan transmitir sus señales.

Membrana y canal

Hodgkin y Huxley se dedicaron a estudiar qué pasaba con las concentraciones de estos iones (sodio y potasio) en la parte de afuera o en la parte de adentro cuando empezaban a fluir las corrientes. El sistema parecía una especie de circuito eléctrico, se lo imaginaron como una especie de membrana porosa (lo cual es bastante cercano a lo que después se descubrió con la microscopía) y la forma en que lo vieron fue como un circuito eléctrico donde *la membrana está funcionando como un capacitor* que almacena ligeramente las cargas cuando están tratando de pasar de un lado hacia el otro y además con la cualidad que tenía de veces dejar pasar más iones y a veces no (semipermeable), modelan esto como una especie de *resistencias variables*. Bajo ciertas condiciones de voltaje de la diferencia de potencial entre la parte de afuera y la parte de adentro, estos canales permiten pasar más de estos iones (ya sean sodio, potasio o calcio) o, por el contrario, impiden su paso (ver 2.2).

Ahora se necesitan más detalles de la representación de los canales y toman en cuenta que el comportamiento de estas resistencias viene acompañado con un voltaje de reposo, en estos voltajes particulares cada tipo de ion (de la resistencia modelada) se estabiliza y ya no va a cambiar esta resistencia (ver 2.3).

Lo que observan es que el **ion de sodio (Na^+)** y su resistencia va a variar dependiendo del voltaje, a esto se le llama un **canal transitorio** porque en ciertos voltajes si puede pasar; si es muy bajo, no puede pasar y si rebasa un cierto umbral entonces se vuelve a tapar y ya no puede pasar. Lo que sucede con el **ion de potasio (K^+)** es que, puede salir si el voltaje está más allá de un cierto valor, si no, no pasan y va variando un poquito que tanto puede pasar, a esto se le llama **canal persistente**. Por estas características de que el potasio es un intervalo dentro de la recta y el sodio es a partir de cierto valor, por tanto, se les modelan de maneras ligeramente diferentes. Más adelante se descubrió porque tenían este comportamiento, básicamente el canal de potasio es una puerta hecha de cuatro subpuertas por donde los elementos pasan o no pasan, el canal de sodio es

2. Modelo de Hodgkin-Huxley

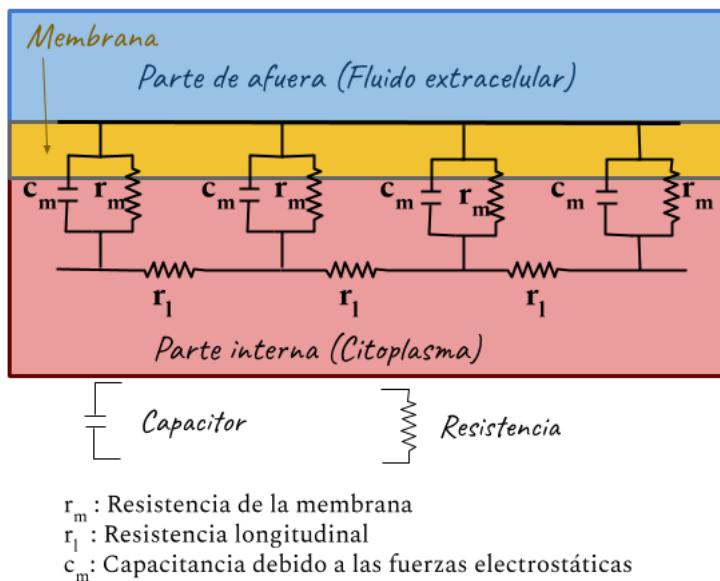


Figura 2.2 Un primer modelo de la membrana axónica modelada como circuito eléctrico. La parte amarilla es la membrana.

como una compuerta que está hecha de tres subpuertas que se pueden abrir y tiene aparte un tapón extra, que hace que aunque estas tres están abiertas bloquee toda la compuerta. Las neuronas están trabajando con muchos más iones aparte de estos dos, uno que destaca bastante es el caso del cloro (Cl^-) que tiene carga negativa. Se tienen canales para intercambio aleatorio de otros iones, **L** un canal aleatorio (leaky).

Entonces con lo que ellos midieron experimentalmente, notaron cómo se estaban comportando estas resistencias dependiendo del voltaje o la diferencia de potencial que había entre ambos lados de la membrana. A partir de estas pudieron describir matemáticamente y simular los disparos que se conocen como potenciales de acción. Vamos a ver cuáles fueron estos conceptos de electricidad que se están utilizando para el modelo tenemos este concepto de potenciales eléctricos.

- Potenciales eléctricos E ó V ; resultan de la separación de cargas opuestas. Se mide en mV .

* $E_{(\text{Na}, \text{K}, \text{L})}$ voltaje en reposo para los iones de Na, K y L, o también conocido como potencial de inversión iónico, es el potencial de membrana en el que no hay flujo neto (total) de ese ion en particular de un lado de la membrana al otro.

* V_m , el potencial eléctrico de la membrana.

- Corriente I ; Movimiento de cargas. Se mide en μA .

* $I_{(\text{Na}, \text{K}, \text{L})}$ corriente entrante a los canales de Na, K o L.

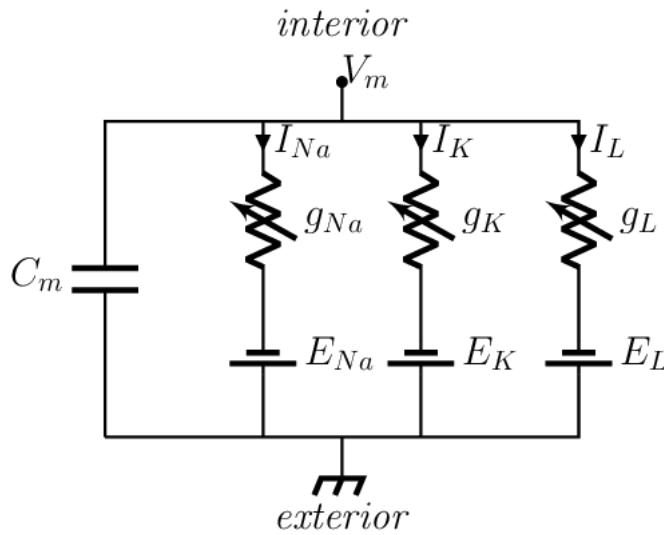


Figura 2.3 Modelo de la membrana axónica modelada como circuito eléctrico, con los distintos canales presentes y su voltaje de reposo.

- Resistencia R ; Medida de la oposición al movimiento de las partículas cargadas.
- Capacitancia o capacidad eléctrica C . Cantidad de energía eléctrica almacenada en un capacitor para una diferencia de potencial eléctrico dada.
* C_m la capacitancia de la membrana.
- Conductancia g ; Inverso de la resistencia $\frac{1}{R}$, es decir, facilidad de transmisión de las partículas cargadas.
* $g_{(Na,K,L)}$ la conductancia del canal de sodio, potasio, cloro y la L también refiriéndose a otros canales de iones.

Lo que está pasando en los **potenciales eléctricos** es que hay mucho sodio en la parte externa de la membrana por ej. tres iones de sodio que son cargas positivas por dos iones de potasio que hay en la parte interna, entonces hay muchas más cargas positivas en la parte de afuera que las que hay en la parte de adentro y eso es lo que provoca la diferencia de cargas que es lo que estamos viendo como un potencial eléctrico.

La capacidad eléctrica o **capacitancia** es la que estamos utilizando para modelar la membrana conformada por lípidos, que es una capa de grasa y esa es la cantidad de energía eléctrica almacenada en un capacitor para una diferencia de potencial eléctrico dada. Éste comportamiento bastante interesante porque las cargas quedan almacenadas un momento, pero se van liberando poco a poco y se va descargando ese capacitor.

Durante el experimento con el axón, se le dieron cargas eléctricas directamente al axón y gracias a eso lograban ir midiendo que era lo que estaba pasando con las concentraciones de cargas afuera y adentro en el caso de las neuronas reales, esto en un ambiente

2. Modelo de Hodgkin-Huxley

no alterado ocurre cuando entran en juego los neurotransmisores y provocan que haya cambios, en estas corrientes. Entonces Hodgkin y Huxley jugaron el rol que tendrían que jugar usualmente los *neurotransmisores* para abrir otras compuertas. Nosotros en la manera en la que lo vamos a simular es precisamente con estas corrientes que son las que se están poniendo en el experimento y vamos a ver cómo reacciona el axón.

Potenciales de Nerst o de reposo

Los Potenciales de Nerst o de reposo son los potenciales a los cuales el flujo neto de iones a través de los canales abiertos es cero. Aquí vemos precisamente porque estamos utilizando la E generalmente la vamos a utilizar para referirnos a la diferencia de potencial entre la parte de afuera de la célula y la parte de adentro, las vamos a utilizar para representar a aquellos voltajes donde cada una de las compuertas encontrarían su equilibrio. Estos voltajes son distintos para cada una de las compuertas, esto va a provocar precisamente la dinámica de la de la neurona, por ejemplo:

- $E_{Na} 50mV$
- $E_{Ca} 150mV$
- $E_K 80mV$
- $E_{Cl} 60mV$

Aquí vemos que el sodio estaría su equilibrio en un valor positivo, el calcio que es el que va a jugar un rol de que se activen los neurotransmisores y se transmita el disparo, observamos que el voltaje tendría que ser bastante positivo. El potasio que es el que usualmente está trabajando intercambiándose casi todo el tiempo en la neurona, veremos que el punto de equilibrio usual de la neurona anda por los $-76mV$ y el del cloro. Cada uno de estos canales pues está tratando de jalar la dinámica hacia su potencial de equilibrio y no hay precisamente un acuerdo entre ellos y eso es precisamente lo que hace que las neuronas cobren "vida".

Modelo de la membrana como bicapa de lípidos

La membrana de una neurona es modelada como un elemento de un circuito con capacitancia C_m y potencial V , las corrientes que fluye a través de la bicapa lipídica están regidos por las siguientes ecuaciones:

$$I_m = C_m \frac{dV_m}{dt} \quad (2.1)$$

Esta sería la ecuación principal (2.1) donde $\frac{dV_m}{dt}$ está representando el cambio voltaje en la membrana respecto al tiempo.

$$C_m \frac{dV_m}{dt} = -g_{Na} m^3 h(V - E_{Na}) - g_K n^4 (V - E_K) - g_L (V - E_L) + I_{ext} \quad (2.2)$$

Cada una de las partes del lado izquierdo de la ecuación 2.2 corresponde a las compuertas de los canales y la corriente de un estímulo externo que pueda influir a la membrana (este estímulo siempre será desde el exterior hacia el interior).

Retomando lo escrito anteriormente el canal de sodio es una compuerta compuesta de **tres** subpuertas y una subpuerta que actúa como tapón y el canal de potasio es una compuerta compuesta de **cuatro** subpuertas iguales, con esto podemos notar claramente que las conductancias sean representadas como:

- $\frac{1}{R_{Na}} = g_{Na} * m^3 * h$ donde g_{Na} es una constante que representa el valor de la conductancia máxima, m es la proporción de los canales de sodio abiertos (representa la concentración de sodio) y nos indica la activación (subpuertas abiertas) del canal, h es el “tapón” de la compuerta que puede impedir el paso de iones independientemente de las otras tres subpuertas, es decir la inactivación (compuerta bloqueada). Los movimientos combinados de m y h son los que controlan la compuerta de sodio.
- $\frac{1}{R_K} = g_K * n^4$ donde g_K es una constante que representa el valor de la conductancia máxima, n es la proporción de los canales de potasio abiertos (representa la concentración de potasio) y nos indica la activación del canal de potasio.
- g_L es una constante, de los canales por fuga, que representa la concentración de los demás iones que pasan por la membrana.

Ahora m , n y h , son variables de activación que describen la probabilidad de que los canales iónicos estén abiertos, se puede describir mediante las siguientes ecuaciones diferenciales ordinarias:

$$\frac{1}{\gamma(T)} \frac{dn}{dt} = \alpha_n^\infty(V)(1-n) - \beta_n(V)n = \frac{n(V) - n(t)}{\tau_n(V)} \quad (2.3)$$

$$\frac{1}{\gamma(T)} \frac{dm}{dt} = \alpha_m(V)(1-m) - \beta_m(V)m = \frac{m^\infty(V) - m(t)}{\tau_m(V)} \quad (2.4)$$

$$\frac{1}{\gamma(T)} \frac{dh}{dt} = \alpha_h(V)(1-h) - \beta_h(V)h = \frac{h^\infty(V) - h(t)}{\tau_h(V)} \quad (2.5)$$

2. Modelo de Hodgkin-Huxley

Donde la ecuación 2.3 representa al canal de potasio y las ecuaciones 2.4 y 2.5 representando al canal de sodio tomando en cuenta que tiene dos tipos de subpuertas.

Las expresiones de α y β están dadas por las siguientes ecuaciones:

$$\begin{aligned}\alpha_n &= \frac{0.01(10 - V)}{\exp\left(\frac{10 - V}{10}\right) - 1} & \beta_n &= 0.125 \exp\left(-\frac{V}{80}\right) \\ \alpha_m &= \frac{0.01(25 - V)}{\exp\left(\frac{25 - V}{10}\right) - 1} & \beta_m &= 4 \exp\left(-\frac{V}{18}\right) \\ \alpha_h &= \frac{0.07}{\exp\left(-\frac{V}{20}\right)} & \beta_h &= \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{30 - V}{10}\right)}\end{aligned}$$

Los factores α y β se denominan como constantes de velocidad de transición. α es el número de veces por segundo que se abre una puerta que está en estado cerrado, mientras que β es el número de veces por segundo que se cierra una puerta que está en estado abierto. Si la membrana tiene una carga negativa, α debe aumentar y la β debe disminuir, cuando la membrana esté despolarizada.

Hasta ahora sabemos que en la bicapa de lípidos, una pequeña carga está pasando entre sus capas de grasa. También sabemos que la carga es almacenada por un breve periodo de tiempo, dando como resultado que la bicapa se comporte como un **capacitor**. Esta membrana también está con cierta resistencia al paso de corriente. Con esto tenemos el siguiente diagrama ² 2.4

Tenemos dadas las siguientes ecuaciones:

$$I_C + I_R - I_{ext} = 0 \quad (2.6)$$

$$C \frac{dV}{dt} + \frac{V}{R} - I_{ext} = 0 \quad (2.7)$$

$$C \frac{dV}{dt} = -\frac{V}{R} + I_{ext}$$

Ahora por la ley de corriente de Kirchhoff ³ tenemos que la suma de las corrientes del capacitor y la resistencia debe ser cero por la conservación de corriente y si consideramos

²Otra explicación más profunda de las ecuaciones dadas partir del diagrama 2.4la podemos encontrar en https://neurowiki.case.edu/wiki/Action_Potential_IV:_Hodgkin-Huxley_Equations_and_Other_Conductances

³La ley de la corriente de Kirchhoff dice que la suma de todas las corrientes que fluyen hacia un nodo es igual a la suma de las corrientes que salen del nodo

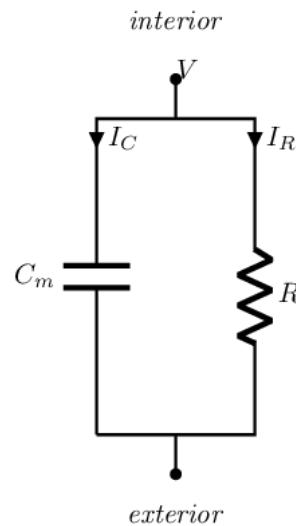


Figura 2.4 Modelo de la bicapa de lípidos donde, V son los cambios de voltaje en la membrana que es el potencial eléctrico, I_C es la corriente del capacitor, I_R es la corriente de la resistencia, C_m es la capacitancia de la membrana, R es la resistencia.

un factor adicional de una corriente externa aplicada o administrada a la neurona, tenemos la ecuación 2.6.

Después tenemos la relación entre la diferencia de potenciales, que almacena energía y la carga eléctrica que guarda, donde: C es la capacidad, medida en faradios, Q la carga eléctrica almacenada, medida en culombios, V la diferencia de potencial medida en voltios. Entonces $C = Q/V$, despejando a Q tenemos $Q = CV$ y derivando de ambos lados respecto al tiempo y considerando que C es una constante al ser una propiedad de la membrana $\frac{dQ}{dt} = C \frac{dV}{dt}$. Como la definición de corriente es el cambio de carga en el tiempo tenemos que $I_C = C \frac{dV}{dt}$. Notemos finalmente la corriente de la resistencia I_R , recordando la ley de Ohm ⁴ la podemos rescribir como $\frac{V - V_{rest}}{R}$. Sustituyendo de lo anterior en la ecuación 2.6 se obtiene la siguiente ecuación:

$$C \frac{dV}{dt} + \frac{V - V_{rest}}{R} - I_{ext} = 0 \quad (2.8)$$

$$C \frac{dV}{dt} = -\frac{V - V_{rest}}{R} + I_{ext}$$

⁴La ley de Ohm establece que la diferencia de potencial V que aplicamos entre los extremos de un conductor determinado es directamente proporcional a la intensidad de la corriente I que circula por el conductor, es decir $V = R * I$. Notemos también que $V = V_m - V_{rest}$

2. Modelo de Hodgkin-Huxley

Ahora multiplicando todo por R:

$$RC \frac{dV}{dt} = -V + (V_{\text{rest}} + RI_{\text{ext}}) \quad (2.9)$$

Denotando RC como la constante de tiempo τ y tomando en cuenta que en cuanto se aplica la corriente va a empezar a cambiar el voltaje poco a poco hasta establecerse en un voltaje de equilibrio (ahí se va a quedar quieta). Entonces cuando el voltaje ya no está cambiando con el tiempo quiere decir que su derivada con respecto al tiempo es cero. Observemos que $dV/dt = 0$ significaría que V es igual a infinito y que el voltaje en el estado estacionario cuando, $dV/dt = 0$ depende del potencial de reposo y del producto entre la resistencia con la corriente externa suministrada, entonces tenemos que:

$$V_{\infty} = V_{\text{rest}} + RI_{\text{ext}} \quad (2.10)$$

Sustituyendo con 2.10 y la constante, en 2.9 tenemos que:

$$\tau \frac{dV}{dt} = -V + V_{\infty} \quad (2.11)$$

Las conductancias iónicas

Nuestro objetivo aquí es encontrar ecuaciones que describan las conductancias con precisión razonable y lo suficientemente simples para el cálculo teórico de *el potencial de acción* y *el período refractario*.

Si tomamos las ecuaciones diferenciales anteriores notamos que las soluciones tienen este tipo de forma 2.5:

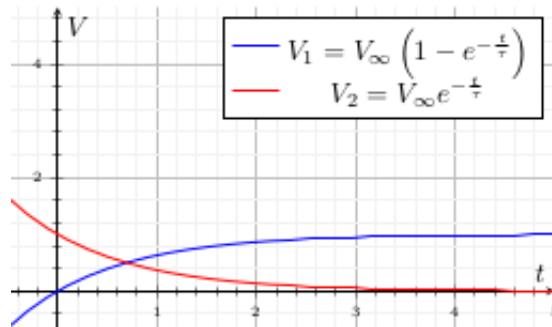


Figura 2.5 Soluciones para el pulso.

Donde si estamos aplicando una corriente externa lo que sucede es lo que estamos viendo en azul, un exponencial que va creciendo y que tiende hacia un cierto valor límite que sería de infinito. Si dejamos de aplicar la corriente externa entonces ahora tendremos

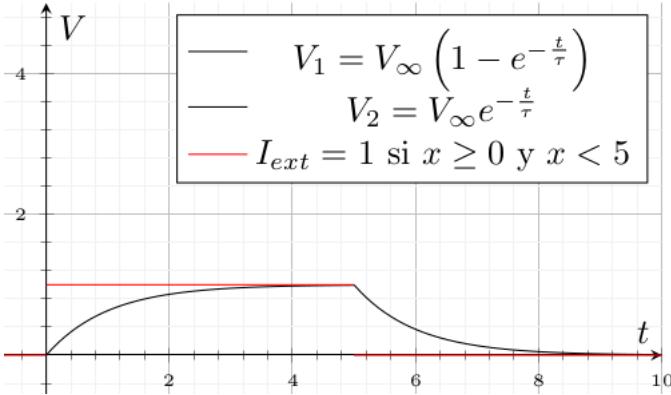


Figura 2.6 Soluciones para el pulso escalón.

un exponencial, pero que tiende hacia el cero y se va a estabilizar en cero, lo que vemos en rojo.

Simulando lo que hicieron Hodgkin y Huxley que fue al axón de repente darle un toque, siendo en el origen de la gráfica (que visualizamos en la figura 2.6) la parte en la que le están dando el toque al axón, momentos antes estaba quieta la neurona de repente le aplican una cierta cantidad de electricidad y va a empezar a cambiar el comportamiento de los canales la porosidad de la membrana, vamos a ver que empieza a incrementarse la diferencia de potencial hasta que llegan a un nuevo equilibrio (alrededor de $t = 3$) y si siguieran dándole el toque en esa cantidad se quedaría ahí la neurona, ya no veríamos más cambios lo que va a suceder entonces es que, retiramos las pinzas (se le deja de dar el toque) y los canales otra vez van a empezar a regresar a la normalidad y vamos a ver un descenso en adelante.

Entonces hasta aquí ya tenemos la idea de cómo va a reaccionar la neurona ante cierto estímulo; sin embargo, esto que acabamos de ver en las gráficas sería como si tuviéramos un solo tipo de canal, ahora qué pasa si consideramos que tenemos diferentes tipos de canales pasando iones, en condiciones distintas. Aquí es donde va a importarnos el hecho de que existen diferentes tipos de canales con voltajes de equilibrio diferente. Retomando a los potenciales de Nerst E_{Na} , E_K , E_L notemos que están dados por:

$$E = \frac{k_B T}{zq} \ln \frac{[\text{adentro}]}{[\text{afuera}]} \quad (2.12)$$

Estos potenciales están relacionados con las características termodinámicas, en la ecuación anterior k_B la constante de Boltzman, q es la carga del ion, y z es el número de iones. El logaritmo natural representando el promedio de cuántos elementos tenemos en la parte de adentro con respecto a cuántos elementos tenemos en la parte de afuera.

Considerando los diferentes puntos de equilibrio en los cuales se puede encontrar la diferencia de potencial en la membrana, vamos a distinguir entre tres estados de esta (también se puede ver en 2.1):

2. Modelo de Hodgkin-Huxley

1. **Polarizada** en su estado de reposo con $V < 0$ ($V \approx -70\text{mV}$).

- Su estado de reposo, cuando la neurona no está haciendo nada simplemente están corriendo los sodios y entran los potasios.

2. **Despolarizada** cuando $V \geq 0$.

- Cuando en sus dendritas y en el cuerpo de la neurona se acumula una carga muy grande (un voltaje eléctrico, disparo), se abre la compuerta de sodio y van a empezar a entrar el sodio, esta diferencia de potencial que existía entre lo fuera y lo adentro se va a reducir de hecho se puede llegar a reducir bastante dependiendo de la carga que se le aplique.
- Iones positivos entran a la membrana.
- Valores positivos en la diferencia de potencial.

3. **Hiperpolarizada** cuando la diferencia de potencial incrementa su magnitud $V \ll 0$.

- En cuanto se despolarice van a empezar interacciones entre los diferentes tipos de canales que lo que van a intentar hacer es regresar a la neurona en su estado normal.
- Los canales de potasio abren sus compuertas, provocando que salga el potasio que está dentro del axón (en el citoplasma).
- Iones positivos salen de la membrana.
- Si antes estaba quieta a los -70mV , ahora va a quedar todavía más abajo alrededor de -90mV . Esto va a permitir un fenómeno que se le conoce como *el periodo de refracción* y ese periodo sirve para que simplemente se lance un disparo y que el comportamiento eléctrico no se rebote otra vez en dirección contraria en la neurona, va a quedar muy quieta la neurona durante un rato y después regresará otra vez a su estado de equilibrio.

Modelo de las compuertas iónicas controladas por voltaje

Retomando el modelo del circuito eléctrico modelando la membrana, junto con los canales y los iones, volvamos a verlo ahora en la 2.7

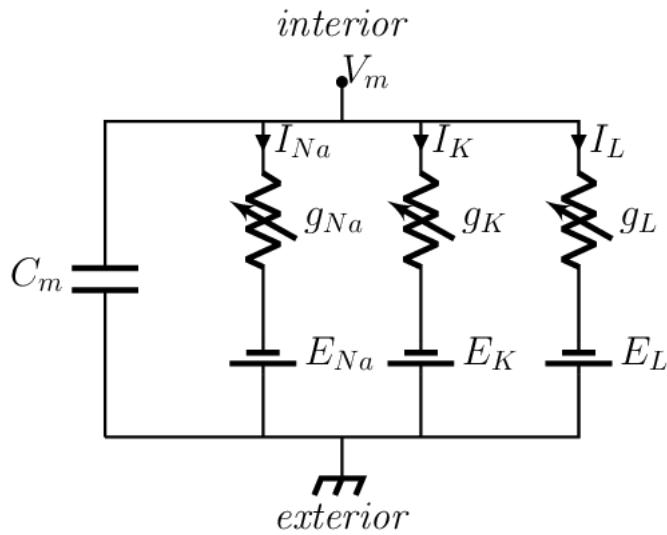


Figura 2.7 Modelo de la membrana axónica modelada como circuito eléctrico, con los distintos canales presentes y su voltaje de reposo.

Recordemos brevemente las definiciones de los dos tipos de canales protagonistas en el modelo:

Definición 2.1

Canal persistente Tiene un solo tipo de compuerta y dos estados posibles:

1. **Activado**
2. **Desactivado**

Definición 2.2

Canal transitorio Tiene compuertas de activación e inactivación, y tres estados:

1. **Activado** Ambas compuertas abiertas.
2. **Desactivado** Compuerta de activación cerrada, inactivación abierta.
3. **Inactivada** Compuerta de inactivación cerrada.

Y retomando la primera ecuación diferencial donde tenemos, por un lado, la corriente que está pasando a través del capacitor, por otro lado, vamos a tener las corrientes que están circulando a través de los diferentes canales,

2. Modelo de Hodgkin-Huxley

$$C_m \frac{dV_m}{dt} = -g_{Na}m^3h(V_m - E_{Na}) - g_Kn4(V_m - E_K) - g_L(V_m - E_L) + I_{ext} \quad (2.2)$$

Las capacitancias y variables del lado izquierdo están explicadas en la sección [Modelo de la membrana como bicapa de lípidos](#), aquí vamos a retomar las ecuaciones 2.3,2.4,2.5 de esa misma sección, (recordemos que estas ecuaciones describen la probabilidad de que los canales iónicos estén abiertos) que son las siguientes:

$$\frac{1}{\gamma(T)} \frac{dn}{dt} = \alpha_{n^\infty}(V)(1-n) - \beta_n(V)n = \frac{n(V) - n(t)}{\tau_n(V)} \quad (?)$$

$$\frac{1}{\gamma(T)} \frac{dm}{dt} = \alpha_m(V)(1-m) - \beta_m(V)m = \frac{m^\infty(V) - m(t)}{\tau_m(V)} \quad (?)$$

$$\frac{1}{\gamma(T)} \frac{dh}{dt} = \alpha_h(V)(1-h) - \beta_h(V)h = \frac{h^\infty(V) - h(t)}{\tau_h(V)} \quad (?)$$

Ahora notemos los elementos en estas ecuaciones anteriores con ion pudiendo denotar las compuertas del potasio n o del sodio, ya sea m o h :

- $\frac{1}{\gamma(T)}$ Este es el coeficiente de escala temporal, dependiente de la temperatura los por eso está apareciendo aquí una t . Para las simulaciones que nosotros vamos a hacer vamos a pensar que estamos en una temperatura fija.
- $\alpha_{\text{ion}}(V)$ probabilidad de que una compuerta transite de cerrada a abierta.
- $\beta_{\text{ion}}(V)$ probabilidad de que una compuerta transite de abierta a cerrada.
- $\text{ion}^\infty(V)$ probabilidad de compuerta abierta en el equilibrio cuando $t \rightarrow \infty$.
- (ion) Probabilidad de que cada compuerta (n, m, h) esté abierta.
- $(1 - \text{ion})$ Probabilidad de que cada compuerta (n, m, h) esté cerrada.
- $\tau_{\text{ion}}(V)$ Tiempo que toma llegar al equilibrio.

Lo que vamos a ver es que forma de escribir la ecuación depende precisamente del número de compuertas que tenían para poder abrirse y cerrarse. Reescribir la ecuación de esta manera lo que nos permite es medirlo en términos de estas probabilidades de que se abran y cierren las compuertas que serían

Esta probabilidad se empieza a alterar conforme cambiamos el voltaje, pero no va a llegar a su valor de equilibrio sino hasta después de pasado un cierto periodo.

Dinámica del voltaje durante un disparo

Ahora qué pasa cuando tomamos en cuenta que todas las compuertas están reaccionando al mismo tiempo. Notemos primeramente como está reaccionando la membrana ante un impulso eléctrico o voltaje, en la siguiente imagen 2.8.



Figura 2.8 En la primera parte los canales están en un estado de reposo y la membrana está polarizada. En la segunda parte los canales han sido afectados por un impulso recibido desde el cono axónico, las compuertas de sodio se abren permitiendo el paso de iones de sodio al interior de la membrana y dejando a la membrana despolarizada. Momentos después la membrana llega a un estado de hiperoxialación donde intentará regresar al estado de equilibrio que tenía previamente, para esto la subpuerta de inactivación de sodio cerrará hasta no permitir el paso de sodio y el canal de potasio abrirá sus compuertas para dar salida a los potasios (iones positivos) que fluyan hacia el exterior de la membrana, así dejando el voltaje de la membrana incluso más negativo de lo que tenía durante su estado polarizado.

Ahora lo que vemos en la imagen 2.8 se grafica de manera un poco más apagada a lo que pasa en los experimentos de la siguiente forma en la imagen 2.9.

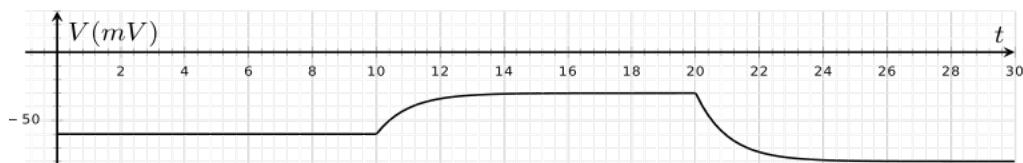


Figura 2.9 Gráfica del cambio de voltaje en la membrana dado un impulso a través del tiempo. Cuando se rebasa el voltaje umbral, los canales de Na⁺ y K⁺ interactúan para producir una rápida despolarización de la membrana provocando una elevación del voltaje, para luego hiperpolarizarla. Durante el momento de despolarización la membrana puede llegar a valores positivos en este caso en particular el estímulo no es tan grande y se queda en valores negativos.

Ahora lo anterior está en términos de lo deseado, veamos entonces que pasó en las mediciones de Hodgkin y Huxley con el axón en las siguientes gráficas 2.10, donde nos está mostrando como las subpuertas n y los factores τ , α y β del canal de potasio se comportaron antes, durante y después del estímulo del voltaje. Recordemos que n nos indica la probabilidad que las compuertas de potasio estén abiertas, este es un factor

2. Modelo de Hodgkin-Huxley

adimensional. τ es el tiempo que tarda en llegar a un estado de equilibrio. α y β las probabilidades que las compuertas del canal de potasio pasen de cerrados a abiertos y viceversa.

Entonces notamos que en el mismo periodo de tiempo, la membrana está en reposo y conforme va recibiendo el voltaje incrementa la probabilidad que las compuertas de potasio estén abiertas, es decir n va incrementando conforme al estímulo, mientras que el estado de reposo es claramente alterado provocando que el valor τ disminuya considerablemente. La probabilidad que las compuertas de potasio pasen de un estado cerrado a uno abierto durante el proceso (α) aumenta prácticamente de forma exponencial, mientras que la probabilidad de que pasen de abierto a cerrado disminuye poco a poco. Con esto cumpliendo lo esperado en la dinámica del voltaje, al notar como está reaccionando el canal de potasio durante la polarización y despolarización (pulso).

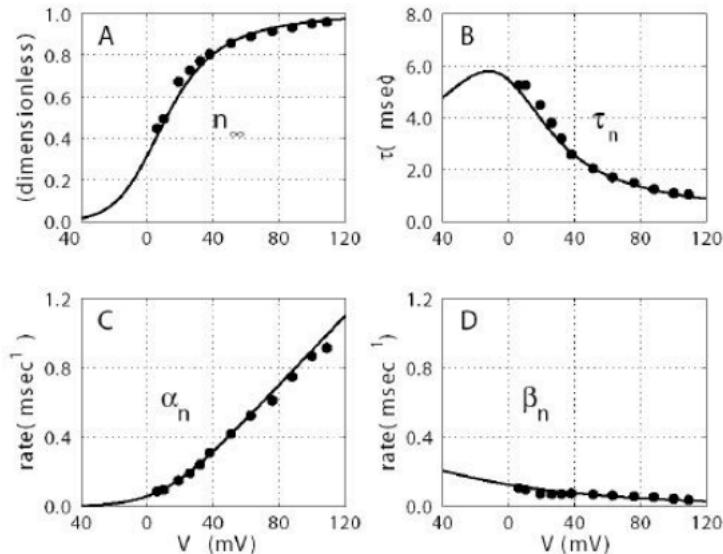


Figura 2.10 Medición experimental de los parámetros y ajuste manual de curvas. Imagen de Nelson 2004

Con estas medidas experimentales ellos dan con curvas paramétricas ajustadas a los factores α y β expresadas de la siguiente forma:

$$\alpha_n = \frac{0.01(10 - V)}{e^{\left(\frac{10 - V}{10}\right)} - 1} \quad \beta_n = 0.125e^{-\frac{V}{80}}$$

$$\alpha_m = \frac{0.01(25 - V)}{e^{\left(\frac{25 - V}{10}\right)} - 1} \quad \beta_m = 4e^{-\frac{V}{18}}$$

$$\alpha_h = 0.07e^{-\left(\frac{V}{20}\right)}$$

$$\beta_h = \frac{1}{e^{\left(\frac{30-V}{10}\right)} + 1}$$

Ahora veamos las gráficas de la dinámica del disparo pero ya con las compuertas del potasio y sodio interactuando al mismo tiempo, en las figuras 2.11 y 2.12

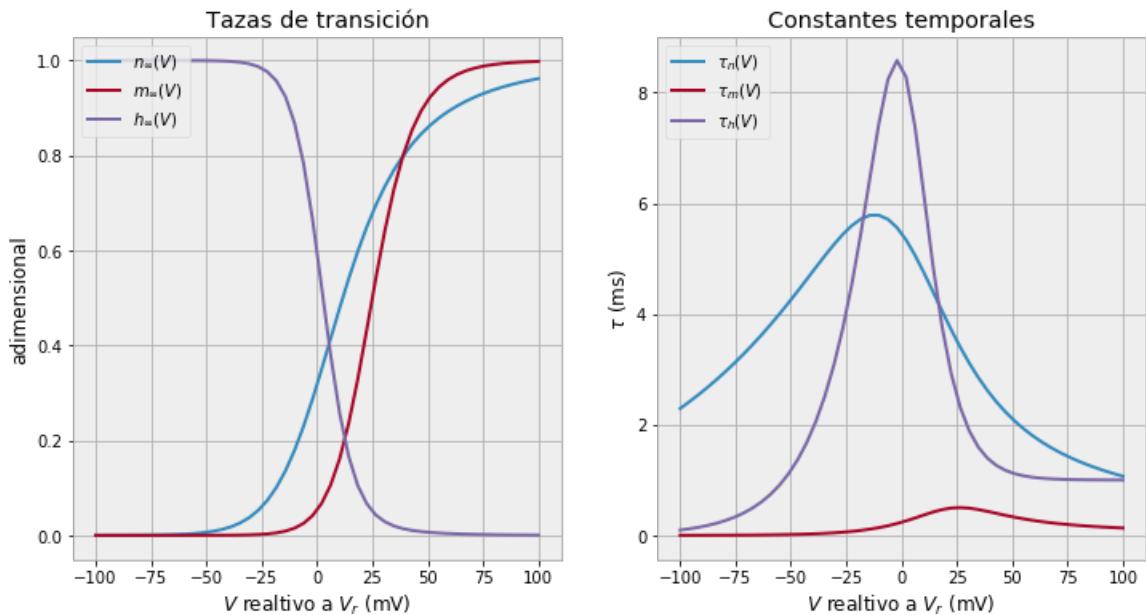


Figura 2.11 Activación e inactivación de los canales. Del lado izquierdo vemos que alrededor de los -50mV aumenta la probabilidad que las compuertas de potasio abran y los potasios salgan, el sodio tarda un poco más en reaccionar para dejar entrar a los sodios, y la probabilidad que quede no bloqueado disminuye, hasta bloquear por completo a los iones de sodio alrededor de los 50mV. Del lado derecho vemos como τ , va interactuando conforme al voltaje, el Na^+ reacciona rápidamente ante él impuso pues regresa rápidamente a su estado de equilibrio, esto indica porque aún que el sodio abre sus compuertas, la compuerta de bloqueo se cierra rápidamente, dejando inactivado el canal, luego el K^+ reacciona más lentamente para regresar a su estado de equilibrio dejando más tiempo activado el canal y salgan los potasios.

2. Modelo de Hodgkin-Huxley

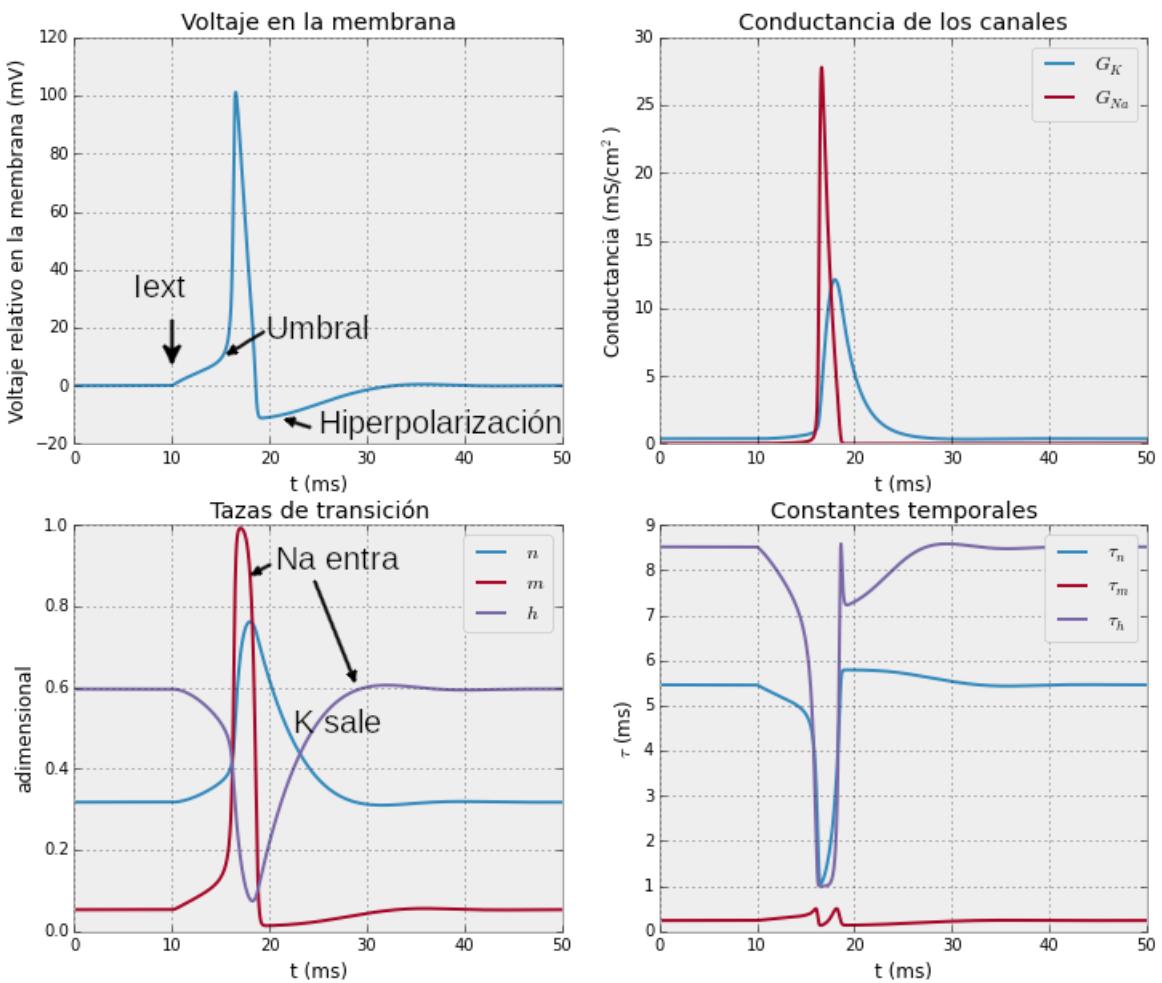


Figura 2.12 Medidas experimentales del estímulo y la reacción de todos los componentes de la membrana. El origen en estas gráficas realmente representa el punto de equilibrio que es alrededor de los -70mV. Del lado superior izquierdo mostrando como cambia el voltaje de la membrana respecto al tiempo, del lado superior derecho el comportamiento de la conductancia de los canales mostrando que aunque la conductancia del sodio reacciona más, es más breve, mientras que el potasio reacciona en menor medida pero durante más tiempo. En la parte inferior derecha la taza de transición de las compuertas n, m y h , mostrando que en cuando llega el impulso el primero en reaccionar es el sodio permitiendo que entre muy brevemente el sodio e inactivándose casi inmediatamente después, mientras que en ese momento los potasios se están liberando hacia la parte exterior de la neurona. Finalmente del lado inferior izquierdo mostrando como se comporta las constantes temporales, mostrando que las compuertas de activación de sodio no son tan afectadas comparado a la compuerta de bloqueo, notando algunos cambios bruscos en esta, mientras que el potasio si se nota más afectado y durante más tiempo pero recuperándose sin cambios bruscos.

Simulación usando el método de Euler

En esta sección se listará como estamos resolviendo las ecuaciones diferenciales, para tener una simulación numérica y se trata del algoritmo de integración⁵. Las gráficas de la sección anterior se obtuvieron con el método de Euler que se describe más adelante.

Algoritmo 1 Algoritmo de integración de Euler [Wells pp51].

```

1: function INTEGRADISPARO( $T, \Delta T, V_0, I_{ext}(t)$ )
2:   Inicializar arreglos de longitud  $T[], V[], n[], m[], h[], G_{Na}[], G_K[], \tau_n[], \tau_m[], \tau_h[] \leftarrow$ 
     arreglo[numeroDePasos]
3:    $V[0] \leftarrow V_0$ 
4:   for  $t = 0$  at  $= T$  cada  $\Delta t$  do
5:     Calcular  $\alpha_n, \beta_n, \alpha_m, \beta_m, \alpha_h, \beta_h$  utilizando  $V(t)$ .
6:     Calcular las tres  $\tau_x$  y  $x^\infty$  apartir de las anteriores.
7:     Calcular las probabilidades de las compuertas  $n, m, h$ , utilizando las ecuacio-
       nes en diferencias en su forma matricial  $\Pi(t + \Delta t) = A_\pi \Pi(t) + B_\pi$ .
8:     Calcular  $G_{Na} = g_{Na} m^3 h$  y  $G_K = g_K n^4$ .
9:     Almacenar los resultados de este paso en los arreglos
      $T[], V[], n[], m[], h[], G_{Na}[], G_K[], \tau_n[], \tau_m[], \tau_h[]$ 
10:     $I_{ext} \leftarrow I_{ext}(t)$ 
11:    Calcular  $V_m(t + \Delta t)$ 
12:   end for
13:   Devolver los arreglos  $T[], V[], n[], m[], h[], G_{Na}[], G_K[], \tau_n[], \tau_m[], \tau_h[]$  con los re-
       sultados para los tiempos  $[0, T]$ 
14: end function
```

Comenzamos con un valor inicial y a partir de ahí empleamos las ecuaciones, para calcular las tangentes, aproximamos a la curva con su tangente.

Para la función INTEGRADISPARO necesitamos cuatro valores de entrada que van a provocar diferentes comportamientos:

1. T nos indica durante cuánto tiempo queremos correr la simulación.
2. ΔT nos indica que tan finos queremos que sean los pasos recordemos que vamos a aproximar la función con segmentos de recta siguiendo la tangente. Si hacemos pasos demasiado pequeños nos vamos a tardar demasiado en hacer el cálculo.
3. V_0 es el voltaje inicial en donde empieza nuestra simulación donde estaba en nuestra neurona cuando empezamos a trabajar.

⁵Hodgkin-Huxley Simulation Using Euler's Method lo puedes encontrar en la siguiente liga <https://webpages.uidaho.edu/rwells/techdocs/Biological%20Signal%20Processing/Chapter%2003%20The%20Hodgkin-Huxley%20Model.pdf>

2. Modelo de Hodgkin-Huxley

4. $I_{ext}(t)$ es la corriente externa, de qué magnitud fue el toque que le estamos dando en este momento al axón

A partir de los elementos iniciales proporcionados ya podemos calcular lo demás. Vamos a querer guardar lo que está ocurriendo para todos los tiempos desde cero hasta t en cada delta, y lo vamos a hacer en forma de arreglos donde en la posición [0], está la primera medición en $t=0$ y la posición t está la medición en el tiempo t . Vamos a tener toda una serie de puntos donde estamos guardando estos pasos para inicializarlo.

Sabemos que necesitamos es un primer valor a partir del cual vamos a calcular la tangente y vamos a ir aproximando lo demás, entonces para eso queríamos *el voltaje inicial*, como nosotros sabemos donde estaba en reposo nuestra célula originalmente, vamos a poder guardar ese voltaje como el primer valor para nuestra simulación. Ahora todos los demás elementos como α_s y β_s y etc. se pueden calcular si ya conocíamos ese voltaje inicial, entonces a partir de este momento podemos repetir el mismo ciclo tantas veces como sea necesario para cubrir, el intervalo. Desde el tiempo inicial hasta el tiempo t , brincando de delta T en delta T . Entonces dado un voltaje vamos a calcular las diferentes α_s que son las que se medían experimentalmente originalmente utilizando las ecuaciones de las curvas paramétricas ajustadas ?? (paso 5).

Ya calculadas las alfas y betas ahora si se puede calcular las τ , n^∞ , m^∞ , h^∞ (paso 6). Teniendo estas entonces podemos calcular las probabilidades para las compuertas n , m , h usando las ecuaciones en diferencias en forma matricial, estas matrices se pueden expresar como 2.13.

$$\begin{bmatrix} n(t + \Delta t) \\ m(t + \Delta t) \\ h(t + \Delta t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (1 - \Delta t / \tau_n) & 0 & 0 \\ 0 & (1 - \Delta t / \tau_m) & 0 \\ 0 & 0 & (1 - \Delta t / \tau_h) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} n(t) \\ m(t) \\ h(t) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} (\Delta t / \tau_n) n_\infty \\ (\Delta t / \tau_m) m_\infty \\ (\Delta t / \tau_h) h_\infty \end{bmatrix}.$$

Figura 2.13 Forma matricial para el cálculo de las probabilidades de las compuertas n , m , h .

Ahora esta parte fue importante sobre todo por el asunto de las pérdidas numéricas, recordemos que la computadora tiene una representación en punto flotante, lo cual quiere decir que un número real no se puede representar en la computadora, esto es importante por el problema del truncamiento, cada vez que se truncan dígitos al momento de calcular estamos perdiendo precisión, por esto es importante la forma en la que se procede a hacer los cálculos porque puede que se llegue a resultados un tanto distintos a los deseados aunque los cálculos sean correctos.

Ya teniendo estos datos podemos fácilmente calcular las conductancias, simplemente sustituyendo los valores (paso 8).

Es bueno una vez que ya terminamos de calcular estos términos que se van a necesitar

en la ecuación principal 2.2 que es la del voltaje de la membrana, ir almacenando en los *resultados temporales* dentro de nuestros arreglos en la casilla que les corresponda, para ese momento (paso 8). En el paso 9, es donde ya vamos a utilizar *la corriente externa* para meterla en la ecuación diferencial para el voltaje. Una vez que tengamos esto tenemos que repetirlo para cada paso, se está calculando el tiempo t , entonces conforme avance el tiempo, va a dar el siguiente valor del voltaje, ya teniendo el siguiente valor del voltaje se va a poder usar para el siguiente paso ("como valor inicial nuevo") y así nos vamos a seguir todo el tiempo. Terminando el tiempo asignado a la simulación, tenemos ya los arreglos llenos de los datos que nos van a poder permitir graficar, qué fue lo que sucedió en cada tiempo, con cada canal y es precisamente así que se puede graficar las mediciones presentadas en la sección anterior.

Información condificada en las dendritas

En esta última sección de este capítulo, se va a tratar el cómputo en las neuronas, que vamos a simplificar para poder modelar las neuronas artificiales. Ya vimos detalladamente que pasa a lo largo del axón de la neurona, se ha mencionado que son quienes conforman la región que recibe la información (disparos / pulsos). Estos mandados desde los botones de las terminales de las neuronas presinápticas y son las dendritas las encargadas de enviar estas señales hasta el soma de la neurona y hacer que estas señales químicas se transformen o no en impulsos eléctricos. Ahora la siguiente cuestión es ¿Podemos hacer que se dispare más de una vez (con el mismo estímulo)?.

Los disparos que produzca una neurona depende fuertemente de la interacción con sus neuronas vecinas. Recordemos que durante el período refractario lo que sucede, es que cuando se acumula información en las periferias del cuerpo de la neurona a través de las dendritas y de su cuerpo es porque; está recibiendo información de neuronas vecinas y eso va a hacer que dispare.

Algunas neuronas tienen el período de refractario muy pequeño y disparan frecuentemente, por las conexiones que tienen con sus vecinas, son neuronas que mandan frecuentemente información y a veces pueden lanzar una serie de pulsos muy seguidos, en otras ocasiones puede haber interrupciones entre estas series de pulsos (ver imagen 2.14, en caso de los seres humanos podemos referirnos a las neuronas motoras que están en constante recepción y transmisión de información).

Por otro lado, hay otras neuronas que son muchísimo más pasivas y disparan muy rara vez (neuronas que están a niveles más altos, como reconocimiento de olores, colores, imágenes). Y también nos encontramos con casos donde aparentemente una neurona no reacciona ante ningún estímulo, hasta que pasa un estímulo muy específico⁶ y está

⁶Neuronas individuales que forman conceptos abstractos, responden por ejemplo, al nombre de un ser humano. Es así como se descubrió la neurona 'Jennifer Aniston', que disparaba cada vez que el retrato de la actriz se mostraba a los sujetos. Estas neuronas, que responden ante la presentación de

2. Modelo de Hodgkin-Huxley

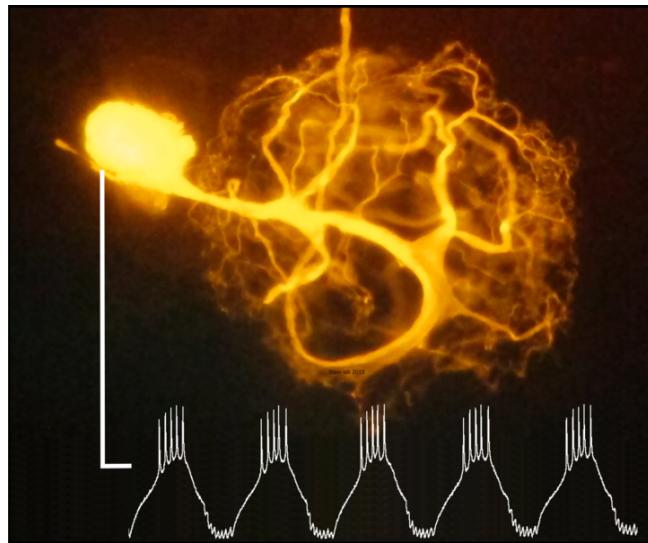


Figura 2.14 Disparos de una neurona, Wstein, 14 September 2013, Wikimedia Commons. Esta foto muestra la neurona de cangrejo que se tiñó mediante la inyección intracelular de un colorante fluorescente. El recuadro muestra una grabación de las oscilaciones rítmicas del potencial de membrana. Las grabaciones fueron realizadas por Christopher Goldsmith en el laboratorio de Wolfgang Stein en la Universidad Estatal de Illinois, https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/c/ca/PD_neuron_staining_and_recording.png, CC BY-SA 3.0.

dispara (neuronas conceptuales o aisladas). La comunidad científica aún no se atreve a afirmar si este tipo de neurona solo dispara ante ese estímulo específico, o simplemente se trata de un evento que cumple con todas las condiciones para que esta neurona reaccione y mande un pulso. Cabe mencionar que estas neuronas se encuentran en las capas más altas de abstracción de procesamiento del cerebro⁷. Este tipo de diferencias entre neuronas te será más fácil recordar si regresas a la última sección del primer capítulo donde se encuentra un diagrama de los procesos de información en los que puede invertir una neurona, este diagrama es 1.5.

En este momento notamos la gran importancia de la codificación de la información en las redes neuronales de un cerebro. Donde la frecuencia de potenciales de acción nos muestran, ciertos patrones que nos indican el nivel de abstracción al que está respondiendo la neurona y el tipo de información que ayuda codificar o decodificar.

Teniendo ahora noción del papel que juegan los patrones de la frecuencia de disparos, se han hecho numerosas investigaciones acerca de estos. En un intento de entender mejor como es que un cerebro recibe la información desde el exterior, procesa y finalmente provoca ciertas reacciones ante el estímulo. En la siguiente imagen 2.15 que es el resultado

algunas imágenes recibieron la denominación de “células abuelas”.

⁷En la siguiente liga se puede encontrar información más detallada acerca de la investigación con estas neuronas: <https://www.nature.com/articles/s41598-020-64466-7>

de un artículo donde se utilizaron diferentes métodos para simular disparos de neuronas y notamos la clasificación de estos patrones que se dan ante ciertos estímulos. Cada uno de estos patrones, están codificando cosas distintas, donde una misma neurona podría alternar entre diferentes patrones dependiendo de cuál es el estímulo que está recibiendo. Si bien ha habido algunas propuestas donde se tratan de hacer neuronas artificiales que tomen en cuenta la frecuencia de disparos aún hay un amplio campo de investigación en este tema.

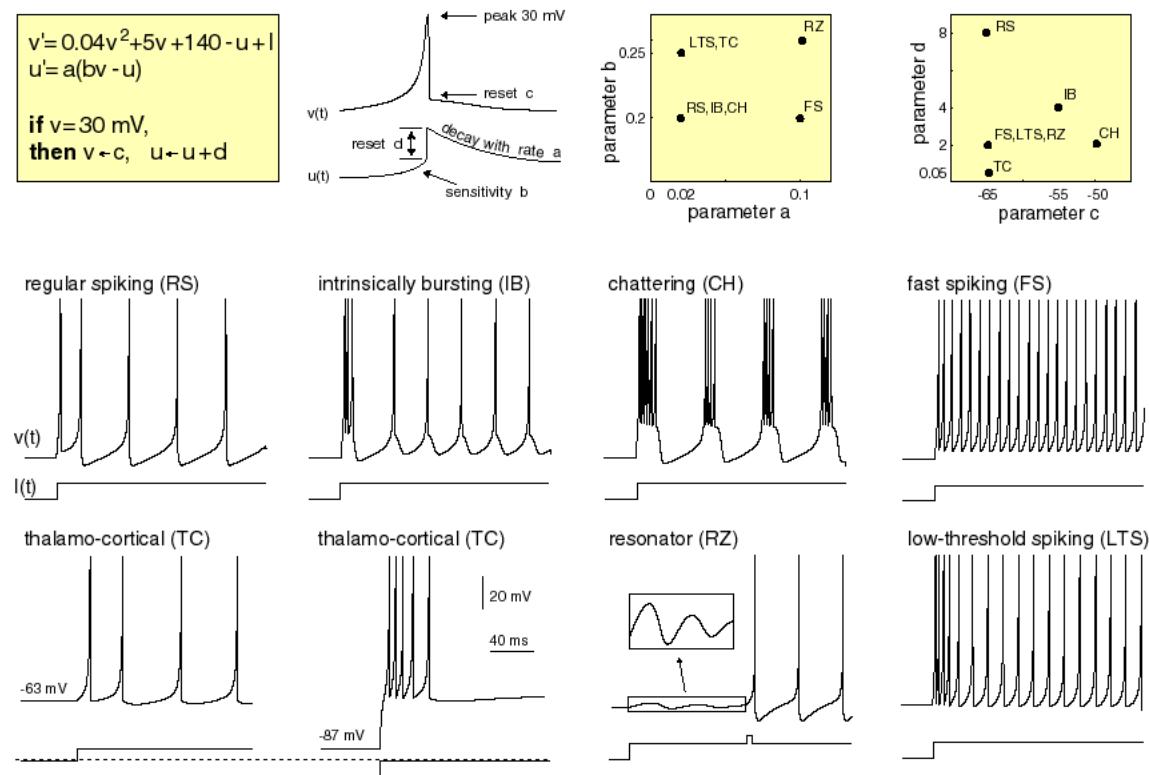


Figura 2.15 Diferentes patrones de disparo (simulados), Eugene M. Izhikevich, 2003, The Neurosciences Institute, <http://www.izhikevich.org/publications/spikes.html>

Por último mostremos la situación del sistema auditivo con la siguiente imagen 2.16:

2. Modelo de Hodgkin-Huxley

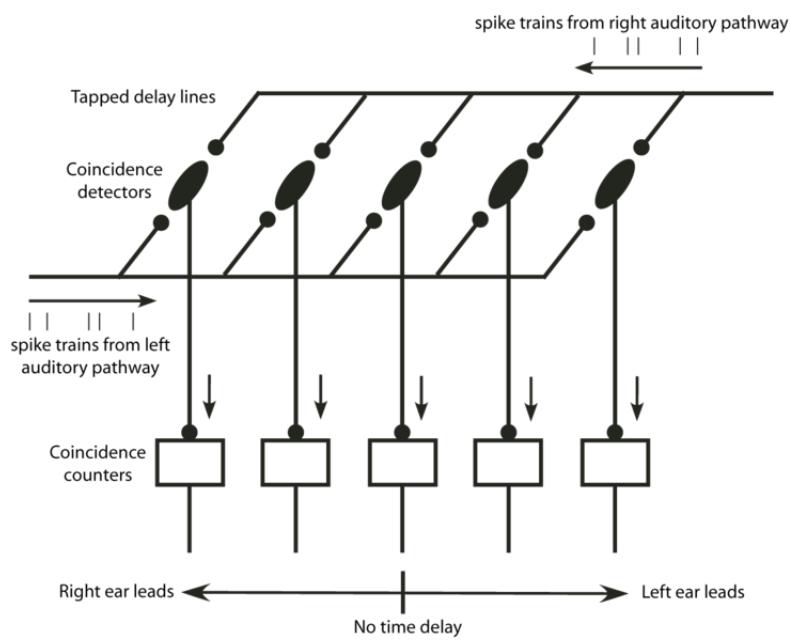


Figura 2.16 Localización del sonido por disparidad, Ian Stevenson, 7 enero 2008, El sistema auditivo registra y analiza pequeñas diferencias en el tiempo de llegada de los sonidos a los dos oídos para estimar la dirección desde la cual el sonido es emitido, <http://www.scholarpedia.org/w/images/4/4d/JeffressFig1.png>

La imagen muestra cómo computan las neuronas, este ejemplo se trata del sistema de audio humano. Cuando nosotros oímos podemos tratar de inferir aproximadamente desde donde está siendo emitido el sonido y eso se logra gracias a que tenemos neuronas conectadas al área auditiva (tanto con el oído derecho como con el oído izquierdo). La señal auditiva va a tardar más en llegar a un oído que al otro, dependiendo de su posición en el espacio, por lo que el cerebro siempre tratar de calcular ese desfase. En el esquema se representa como dentro del espacio de una persona se encuentra una fuente de sonido. Dependiendo de la dirección que provenga (izquierda o derecha), las neuronas receptoras de cada oído harán un cálculo rápido de la distancia a la que se percibió la señal, estás llegarán al cerebro y en algún punto enlazaran con neuronas donde estás cuentan las diferencias de distancias percibidas hasta llegar a dar con el resultado, dándonos a saber cuáles receptores (izquierda o derecha) están más cerca de la señal, y así ubiquemos desde donde proviene el sonido.

3 | Aprendizaje de máquina

Introducción

En este capítulo se desarrolla el proceso que pasa una máquina para que *aprenda*, para esto notemos el concepto de aprender. En los seres humanos se denota como el hecho de adquirir el conocimiento de algo mediante el estudio o la experiencia a partir de ejemplos específicos en nuestro medio, entonces aquellos problemas que inicialmente no pueden resolverse, puedan ser resueltos después de obtener más información acerca del problema. Desde pequeños empezamos por aprender por palabras (conceptos) que asociamos con algo específico, para después relacionar que varios objetos pertenecen a un tipo de conjunto y otros no. Como que un muñeco, una pelota y unos bloques de construcción de plástico, pertenecen a un conjunto denominado como "juguetes", y que plato, taza, y tazón no pertenecen a este conjunto sino al conjunto "vajilla". Entonces para organizar los conceptos que vamos aprendiendo hacemos uso de una función booleana, donde la entrada es el concepto, la pregunta es, ¿Este objeto pertenece a un cierto conjunto de objetos con características similares? y la salida es falso o verdadero. A este proceso, se le conoce como *aprendizaje de conceptos* y en este curso lo simplificamos como *función booleana de aproximación mediante ejemplos*.

Ahora lo que denotamos como el hecho que una máquina aprenda, lo vemos como cualquier programa que mejore su desempeño en alguna tarea mediante la experiencia. Con más formalidad se denota como:

Definición 3.1

Aprendizaje maquina: Se dice que un programa de computadora aprende, si su desempeño en T , medido por P , mejora con la experiencia E . Tal que:

- T es un tipo de tarea.
- P es una medida de desempeño.

3. Aprendizaje de máquina

- *E* la experiencia con ejemplos (entrenamiento).

,^a.

^aMachine Learning, Mitchell 1997, pag. 14.

Algunos ejemplos para definición anterior pueden ser los siguientes:

- *T*, como:

- ★ Jugar un juego de mesa.
- ★ Clasificar varios tipo de hojas.
- ★ Reconocer una voz en particular.

- *P*, como:

- ★ Porcentaje de juegos ganados en las partidas.
- ★ Porcentaje de hojas correctamente clasificadas.
- ★ Porcentaje de reconocimiento de timbre de la voz.

- *E*, como:

- ★ Jugar juegos de práctica.
- ★ Una secuencia de imágenes etiquetadas.
- ★ Una secuencia de audios etiquetados.

A partir de ahora nos dedicaremos a definir correctamente tareas que nos interese que un programa aprenda, para entender la forma más abstracta del problema y así proponer los algoritmos que nos ayuden a resolverlo.

Consideremos también que los sistemas de redes neuronales artificiales son un tipo de algoritmo para la representación del proceso de aprendizaje. Un problema de aprendizaje bien definido requiere una tarea bien especificada, medidas de desempeño y datos para obtener experiencia.

El aprendizaje maquina se apoya de disciplinas, como la inteligencia artificial, probabilidad, estadística, complejidad computacional, psicología, neurobiología y filosofía.

Para proponer un algoritmos de aprendizaje automático necesitamos, elegir el tipo de experiencia de entrenamiento, definir la función objetivo a aprender y un algoritmo para aprender la función objeto a partir de ejemplos de entrenamiento.

Los algoritmos de aprendizaje maquina han sido utilizados ampliamente por la industria bancaria, por gobiernos y por su puesto por el area de la salud. En la industria bancaria por

ejemplo, donde es necesario aprender las reglas generales para determinar la solvencia crediticia, a partir de las bases de datos. Por los gobiernos para el reconocimiento de rostros humanos a partir de imágenes. En el área de salud para a partir de bases de datos de pacientes descubrir automáticamente regularidades implícitas en los resultados de tratamientos.

Espacio de Hipótesis

El aprendizaje automático, es utilizar datos disponibles para, aprender una tarea mediante una función que mejor mapee entradas a ciertas salidas. A esto se le llama aproximación de función, en el que aproximamos una función de destino desconocida (que suponemos que existe) que puede asignar mejor las entradas a las salidas en todas las observaciones posibles del dominio del problema.

Una función de un modelo que se aproxima a la función objetivo y realiza asignaciones de entradas a salidas se denomina hipótesis.

Ahora estas funciones pueden tener formas muy generales en el aprendizaje de máquina pueden tener forma, por ejemplo, de estructuras de datos, como los árboles de decisión, donde cada nodo pregunta si o no, pertenece una clasificación. Pueden ser también funciones matemáticas como el caso de las redes neuronales, entonces la forma que tomen estas hipótesis en general puede abarcar muchos métodos y estructuras.

Entonces el aprendizaje consiste en, explorar un espacio de posibles hipótesis para encontrar la hipótesis (una función) que mejor encaje, de acuerdo a lo que se obtuvo en los ejemplos de entrenamiento, y predecir alguna característica de salida deseada. Usualmente se denotan como sigue:

- h (hipótesis): una sola hipótesis, por ejemplo una instancia o modelo candidato específico que asigna entradas a salidas, se puede evaluar y se usa para hacer predicciones.
- H (conjunto de hipótesis): Un espacio de posibles hipótesis para mapear entradas.

Una breve ejemplo para denotar un espacio de hipótesis sería el problema de saber los días que nos conviene ir al cine, donde nuestra tarea T es aprender a predecir el conjunto de días que nos conviene ir al cine, basado en los atributos de los días, donde cada hipótesis la representaremos apartir de un conjunto de atributos de las instancias (días), entonces cada hipótesis es un vector con tres atributos, *tiene2x1*, *esEstrenoDePelicula*, *actoresConocidos*. Para cada atributo de la hipótesis tendría uno de los siguientes valores; Si, No, ?. Donde ? indica que cualquier valor es válido para ese atributo.

Cuando alguna instancia x cumpla con todos los atributos de una h , entonces $h(x) = 1$ y x es un ejemplo positivo. Entonces para representar la hipótesis, que nos conviene ir

3. Aprendizaje de máquina

solo los días con 2×1 , y que hay películas donde los actores son conocidos, la escribimos como $h(<Si, ?, Si>) = 1$, la hipótesis que cualquier día nos conviene ir al cine la denotamos como $h(<?, ?, ?>) = 1$, nuestra función objetivo la denotamos como una función booleana $c : X \rightarrow \{0, 1\}^{|X|}$, el conjunto de los 365 días del año, entonces $c(x) = 1$ cuando en los datos nos dicen que con la instancia x conviene ir al cine, $c(x) = 0$ en caso que no. Por tanto para aprender la tarea T , necesitamos *una hipótesis h en H tal que $h(x) = c(x)$ para todas las x en X* . La tarea de aprendizaje del concepto c requiere aprender el conjunto de instancias que lo satisface, describiendo este conjunto mediante una conjunción de restricciones sobre los atributos de la instancia.

Estas hipótesis (funciones) pueden llegar a ser sumamente complejas y tener que mapear datos de entrada con muchas formas ej. imágenes, trayectorias, etc. En el caso de las redes neuronales, el espacio de hipótesis está determinado por la arquitectura de la red. Vamos a definir el espacio de hipótesis, cuando decidimos qué neuronas vamos a poner en nuestro sistema, como las conectamos entre sí y cómo van a transferirse información de una a la otra y cuántas neuronas van a ser. Lo que veremos a lo largo del curso son diferentes arquitecturas y el impacto que tiene hacer diferentes modificaciones así como las matemáticas que existen detrás de estas.

Clasificación de los conjuntos de datos

La experiencia E para aprender la vamos a obtener mediante un conjunto datos, llamados datos de entrenamiento, estos se separan en tres bloques:

- **Entrenamiento:** Datos con los cuales se ajustan los parámetros de la hipótesis (del 50 % al 80 % de los datos). En este bloque se escoje que función del espacio fue mejor para el aprendizaje.
- **Validación:** Datos utilizados para ajustar los parámetros (hiperparámetros) del algoritmo de entrenamiento, que puedan afectar qué hipótesis es seleccionada (del 25 % al 10 % de los datos y no deben ser usado durante el entrenamiento). Un ejemplo de un hiperparámetro para redes neuronales son el número de nodos ocultos en cada capa.
- **Prueba:** Datos utilizados para evaluar la posibilidad de que la hipótesis aprendida generalice¹ a datos no vistos anteriormente. Esta porción que se mantiene aparte. Con estos se evalúa el modelo, se reporta la eficacia del modelo según los resultados en este conjunto (del 25 % al 10 % de los datos).

¹Se desea que nuestro modelo de aprendizaje, una vez entrenado con datos que ya hemos visto, se pueda usar con datos nuevos. Para ello debemos asegurarnos que el modelo no ha simplemente memorizado las muestras de entrenamiento, sino que ha aprendido propiedades del conjunto.

El conjunto de datos de entrenamiento se usa para aprender una hipótesis y el conjunto de datos de prueba para evaluarla.

Tipos de aprendizaje

Aprendizaje Supervisado, el modelo usa datos etiquetados a una respuesta específica(labeled data), durante el entrenamiento se intenta encontrar una función que aprenda a asignar los datos de entrada (input data) con los datos en el etiquetado. Para después predecir una relación, dado un dato totalmente nuevo para el modelo. Los modelos pueden ser:

- Regresión: Un modelo de regresión busca predecir valores de salida continuos. Por ejemplo, en predicciones meteorológicas, de expectativa de vida, de crecimiento de población.
- Clasificación: En un problema de clasificación se desea predecir una salida discreta. Por ejemplo, identificación de dígitos, diagnósticos.

Aprendizaje no supervisado, es usado cuando no se tienen datos “etiquetados” para el entrenamiento. Solo sabemos los datos de entrada. Por tanto, únicamente podemos describir la estructura de los datos, para intentar encontrar algún tipo de organización que simplifique un análisis. Por ello, no se tienen valores correctos o incorrectos (es utilizado para aprender de una manera autoorganizada).

Aprendizaje por refuerzo, inspirado en la psicología conductista; donde el modelo aprende por sí solo el comportamiento a seguir basándose en *recompensas y penalizaciones*. Este tipo de aprendizaje se basa en mejorar la respuesta del modelo usando un proceso de retroalimentación (*feedback*). Su información de entrada es el feedback que obtiene del mundo exterior como respuesta a sus acciones. Aprende a base de ensayo-error.

Mientras que el aprendizaje supervisado y el no supervisado aprenden a partir de datos obtenidos en el pasado, el aprendizaje por refuerzo aprende desde cero, es decir, con un estado inicial y su ambiente, va aprendiendo a futuro, mediante posibles penalizaciones o recompensas. El *aprendizaje por refuerzo* es usado en videojuegos porque cada vez que se realizan las acciones correctas se ganan puntos y entonces se entrena a la gente para que pueda conseguir la mayor cantidad de puntos. En este siempre hay: un agente, un ambiente definido por estados, acciones que el agente lleva a cabo (que le llevan de un estado a otro), y recompensas o penalizaciones que el agente obtiene.

En cada acción, el agente solo conoce el estado en el cual se encuentra y las acciones posibles que puede elegir a partir de ese estado. No sabe si llegando al siguiente estado, obtendrá mejores o peores recompensas, irá aprendiendo en cada estado qué acciones lo llevarán a obtener una mayor recompensa a largo plazo, y que el valor de las acciones en ese estado puedan subir. *Se enfoca en que el agente aprenda una política óptima*

3. Aprendizaje de máquina

para alcanzar el objetivo. El agente siempre está en fases de *exploración* y *explotación*, en la fase de exploración el agente toma una acciones de manera aleatoria, y en la de explotación va a tomar acciones basándose en cuán valiosa es realizar una acción a partir de un estado dado.

En plataforma de ventas en línea es donde podemos encontrar este tipo de modelo que están entrenados con este tipo de aprendizaje, donde al iniciar la sesión no conoce nada del usuario, solamente tiene un ambiente dado por los productos de la plataforma y su estado inicial es cero, para hacer individual la experiencia del usuario y que compre más. El algoritmo realiza la acción de mostrar ciertos productos (algún estado) si el usuario da clic a estos productos, el agente recibirá un punto de recompensa, por lo cual pasará a otro estado donde ofrecerá productos del mismo estilo donde pueda maximizar una venta, así se irá adaptando a cada usuario.

Parte II

Redes dirigidas acíclicas

4 | Perceptrón simple

Perceptrón

El perceptrón fue la primera red neuronal artificial (o ANS, Artificial Neural Systems) descrita algorítmicamente. En las décadas de los 60's y 70's, lo popularizó el psicólogo Franck Rosenblatt, en su libro llamado Principios de neurodinámica, donde presentó varios modelos de perceptrones, en el Laboratorio Aeronáutico de Cornell en Estados Unidos, originalmente estaba diseñado para ser una máquina, en vez de un algoritmo. Estaba diseñado específicamente para el reconocimiento de imágenes donde, cada peso era un cable físico por pixel de entrada, este era una matriz de 200 x 200, conectados aleatoriamente a las "neuronas", las actualizaciones de los pesos se realizaron mediante motores eléctricos.

El perceptrón es en sí, es la representación de un sola neurona, este se ocupa para la clasificación de patrones en un conjunto de datos multivariados, con ese se obtienen fronteras lineales en el plano, mediante un algoritmo de aprendizaje que veremos más adelante.

Recordando, una neurona es un celula elemental que a partir de un vector de entrada procedente del exterior o de otras neuronas (estímulo), proporciona una única respuesta (si activo el potencial de acción o no), ver figura 4.1. Los elementos que actúan en una neurona los podemos listar como:

- **Entradas:** $x_j(t)$. Las variables de entrada y salida pueden ser binarias (digitales) o continuas (analógicas) dependiendo del modelo de aplicación.
- **Pesos sinápticos:** w_{ij} . Representan la intensidad de interacción entre cada neurona presináptica j y la neurona postsináptica i .
- **Regla de propagación:** $h_i(t) = \sigma(w_{ij}x_j(t))$. Proporciona el valor del potencial postsináptico, de la neurona i en función de sus pesos y entradas.

$$\star h_i(t) = \sum_{i=0}^n w_{ij}x_i, \text{ Es una suma ponderada de las entradas con los pesos sinápticos. Así, si la entrada es positiva, dependiendo de los pesos podemos}$$

saber si fue una sinapsis excitadora (pesos positivos) o inhibidora (pesos negativos).

- **Función de activación o de transferencia:** $a_i(t)$ Proporciona el estado de activación actual, de la neurona i en función de su estado anterior, $a_i(t - 1)$ y de su potencial postsináptico actual.
 - * $a_i(t) = f_i(a_i(t - 1), h_i(t))$, es la que usualmente se usa.
 - * $a_i(t) = f_i(h_i(t))$, en algunos modelos solo se considera que el estado actual no depende del tiempo anterior.
- **Función de salida:** $F_i(a_i(t))$ Da la salida actual, $y_i(t)$, de la neurona i en función de su estado de activación actual. El estado de activación de la neurona se considera como la propia salida.
 - * $y_i(t) = F_i(a_i(t))$
 - * $y_i(t) = F_i(f_i(a_i(t - 1), \sigma(w_{ij}, x_j(t))))$

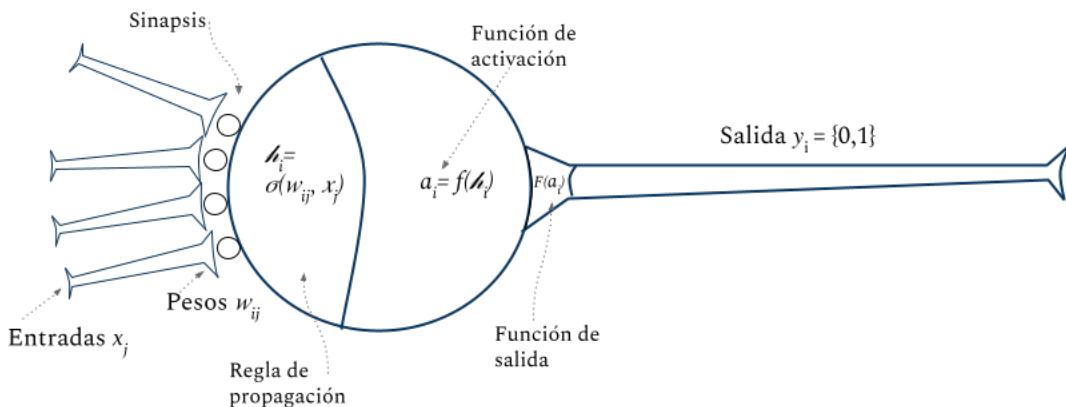


Figura 4.1 Neurona vista como un modelo artificial (perceptrón).

Un perceptrón toma un vector de entradas de números reales, calcula una combinación lineal de estas entradas, luego emite un 1 si el resultado es mayor que algún umbral y -1 de lo contrario. Es decir, dadas las entradas $x_1 \dots x_n$, la salida $\sigma(x_1, \dots, x_n)$ calculada por el perceptrón es 1 si $w_0 + w_1x_1 + w_2x_2 + \dots + w_nx_n > 0$ y -1 de lo contrario, donde cada w es una constante \mathbb{R} , un peso, que determina la contribución de la entrada x a la salida del perceptrón. La constante w_0 es un *umbral* (bias) que la suma de las entradas con los pesos debe superar para que el perceptrón emita un 1. En otras palabras es un peso que va a actuar junto con una entrada de valor 1, que vamos a poder ajustar para que nuestra función de activación, se mueva de derecha a izquierda en el plano para ayudarnos a ajustar nuestros resultados, provocando un gran impacto en el aprendizaje.

4. Perceptrón simple

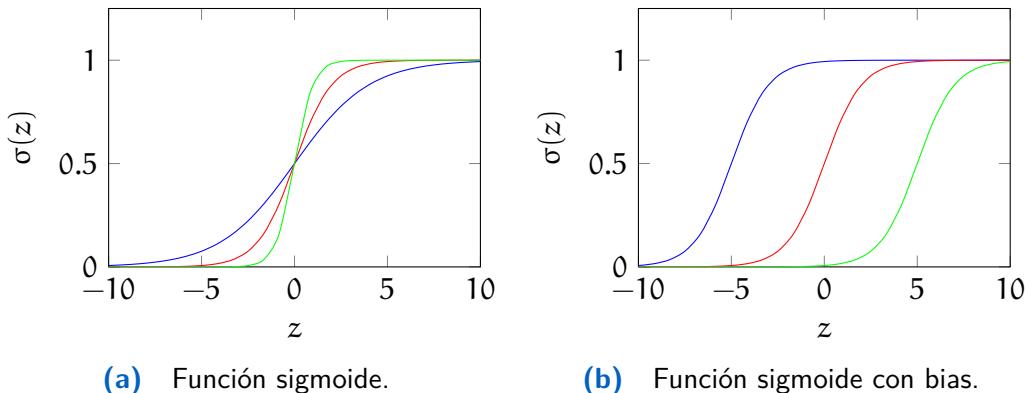


Figura 4.2 Comportamiento de la función de activación (sigmoide) de un perceptrón con una sola entrada, (b) el perceptrón sin el uso de bias, (b) con el uso del bias, donde apesar de estar representandos con la misma entrada , el uso del bias afecta en los resultados de salida. Así si quisieramos que este perceptrón nos diera $y = 0$ con una entrada $x = 2$ sin el uso, ni ajuste del bias sería imposible, pues en (a) apesar que la gráfica azul está la entrada está ajustada con el peso $w = 0.5$, la roja con el $w = 1$, y la verde con el $w = 2$ solo lo logramos alargarla un poco, haciendo que entradas que antes eran correctas ahora caigan 0 también. Entonces lo que necesitamos es más bien "mover" la gráfica, esto lo logramos con la gráfica (b) donde la entrada (única) está sumada con un bias (umbral) $x_0 = 1$, ajustado en azul con peso $w_0 = 5$, en rojo con $w_0 = 0$, en verde con $w_0 = -5$ y el peso $w_1 = 1$. Donde con $w_0 = -5$ logramos nuestro objetivo de tener una salida $y = 0$ con $x = 2$. El bias nos permite mover la función fuera del origen.

Esto se muestra en la siguientes graficas 4.2b. Más adelante hablaremos de su regla de entrenamiento (Training rule).

El hecho de que un perceptrón aprenda implica elegir valores para los pesos denotados también por θ . Ahora, el espacio H de las hipótesis candidatas consideradas en el aprendizaje del perceptrón, es el conjunto de todos los posibles vectores de pesos.

$$H = \{w | w \in \mathbb{R}^{n+1}\}$$

Si bien en el momento que se publicó los logros con el modelo del percetrón las expectativas eran bastante altas, a medida de los años los científicos Marvin Minsky and Seymour Papert desestiman en gran medida los alcances que realmente se puede tener con el perceptrón, al mostrar¹ que no puede predecir operaciones lógicas que no sean linealmente separables, tal es el caso de la función XOR, que no es separable linealmente, siendo imposible que pueda aprender esta función. Esto y el gran costo que representaba procesar todos los elementos que implicaba el entrenamiento, causa que por un buen

¹En 1969 publican Marvin Minsky y Seymour Papert que perceptrones de una sola capa (simples) solo son capaces de aprender a distinguir patrones linealmente separables, en el libro "Perceptrons".

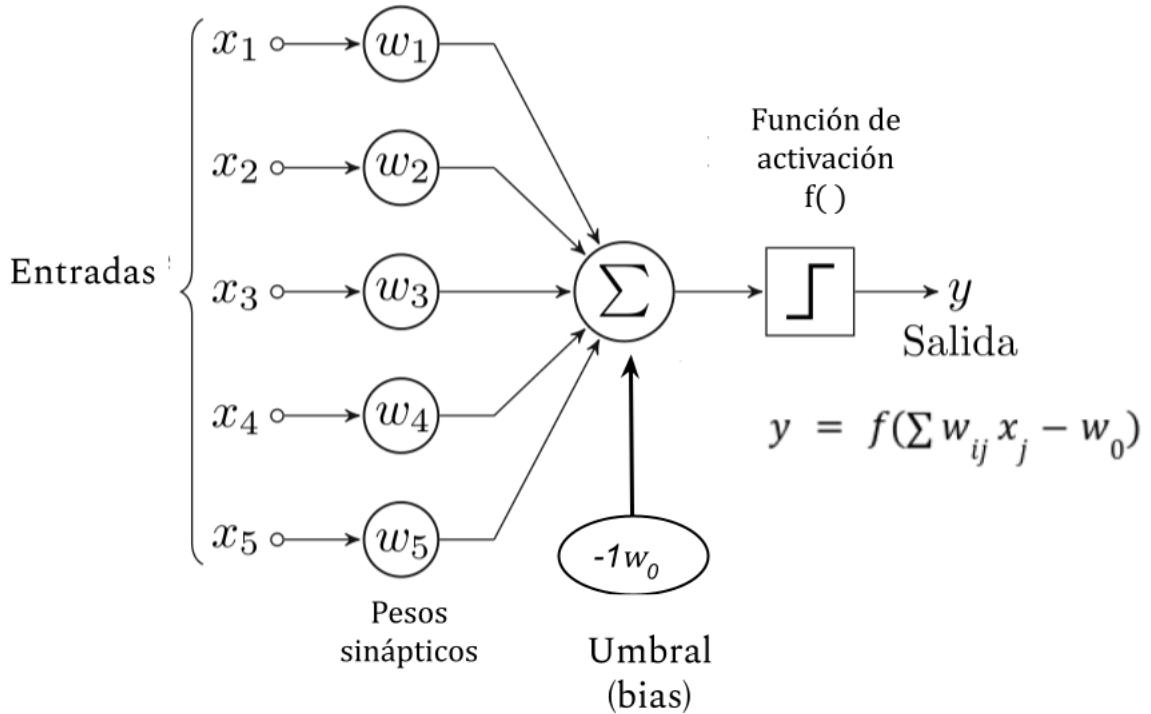


Figura 4.3 Modelo estandar de un perceptrón.

tiempo se desetime el uso del perceptrón. Es hasta después de unas decadas que vuelve a tener relevancia con la propuesta de un perceptrón multicapa usando retropagación (Feedforward), siendo estos capaces de resolver la función XOR

Compuertas lógicas con neuronas

Aquí se muestra como se puede utilizar un perceptrón para simular compuertas lógicas tales como el or, not, and.

Para simular la compuerta *not*, como está es una función booleana de $B \rightarrow B$, tal que $\text{not}(x) = -x$ entonces en un plano de dos dimensiones, la podemos representar con dos puntos, el $p_1 = (0, 0)$ y $p_2 = (1, 0)$ donde p_1 representa cuando $\text{not}(0) = 1$, p_1 representa cuando $\text{not}(0) = 1$. Teniendo el espacio de la función definido lo que nos toca es, separar el plano para clasificar las entradas, este claramente se puede separar con una linea vertical, o con lineas con pendiente 1 o -1 . Para esta función solo necesitamos de una entrada y un sesgo (bias), donde la entrada la combinaremos con un peso, este peso lo asignaremos a tanteo (por la sencillez de la operación). Así el peso $w_1 = -1$ y el peso asignado al bias sera $w_0 = 0.5$, ahora con esto datos podemos:

- Hacer la función de propagación donde $h(x) = (x * -1) + (0.5) * 1 = 0.5 - x$

4. Perceptrón simple

- Hacer la función de activación escalón $a(x) = \text{sgn}(h) = \text{sgn}(0.5 - x)$
- Dar la salida donde $s(1) = \text{sgn}(0.5 - 1) = 0$ y $s(0) = \text{sgn}(0.5 - 0) = 1$, en este caso la salida es la identidad de la activación.

x	h	s
0	0.5	1
1	-1.5	0

Algo similar va a pasar con la compuerta *and* y *or* donde al necesitar de dos entradas para la compuerta, asignaremos dos entradas para el perceptrón igualmente y las representaremos en el plano con cuatro puntos, donde cada punto representa una instancia y se le asigna valor positivo o negativo en el plano, así pues para el *and* tenemos los puntos $p_1 = (0, 0)$, $p_2 = (0, 1)$, $p_3 = (1, 0)$, negativos y $p_4 = (1, 1)$ el único positivo. Así nos damos cuenta que necesitamos una recta con pendiente negativa y fuera del origen, que nos separe estas clases de puntos. Por tanto para el bias le asignamos un peso de $w_0 = -1.5$, $w_1 = 1$ y $w_2 = 1$, con estos datos podemos:

- Hacer la función de propagación donde $h((x_1, x_2)) = (x_1 * 1) + (x_2 * 1) + (-1.5) * 1 = x_1 + x_2 - 1.5$
- Hacer la función de activación escalón $a((x_1, x_2)) = \text{sgn}(h) = \text{sgn}(x_1 + x_2 - 1.5)$
- Dar la salida donde $s = a(x)$, es la identidad de la activación.

x_1	x_2	h	s
0	0	-1.5	0
0	1	-0.5	0
1	0	-0.5	0
1	1	0.5	1

Para la compuerta *or* es algo muy similar pues podemos igualmente representar la función con cuatro puntos en el espacio cada uno representando una instancia, solo que ahora tres de estos puntos serán positivos y solo uno negativo, los puntos positivos serían $p_2 = (0, 1)$, $p_3 = (1, 0)$ y $p_4 = (1, 1)$, mientras que $p_1 = (0, 0)$ negativo, el plano lo podemos dividir con una linea recta con pendiente negativa, así le asignamos $w_0 = -0.5$, $w_1 = 1$ y $w_2 = 1$, con esto hacemos los paso que ya sabemos:

- Hacer la función de propagación donde $h((x_1, x_2)) = (x_1 * 1) + (x_2 * 1) + (-0.5) * 1 = x_1 + x_2 + 0.5$
- Hacer la función de activación escalón $a((x_1, x_2)) = \text{sgn}(h) = \text{sgn}(x_1 + x_2 + -0.5)$

- Dar la salida donde $s = a(x)$, es la identidad de la activación.

x_1	x_2	h	s
0	0	-0.5	0
0	1	0.5	1
1	0	0.5	1
1	1	-1.5	1

Tomando el hecho que en la naturaleza las neuronas van pasando información en una estructura que forma niveles de abstracción, esto lo modelamos como capas de neuronas conectadas entre sí, cada capa haciendo su trabajo de abstracción. El perceptrón simple es un modelo neuronal unidireccional, una capa de entrada y otra de salida, que por si solo no puede separar todas las funciones lógicas pues tenemos el XOR, para resolver esto usaron perceptrones multicapa que se explicará más adelante en el curso.

Funciones de activación

Recordando que la forma de las funciones de activación es $y = f(x)$, donde x representa el potencial postsináptico e y el estado de activación de la neurona, es decir si va a lanzar un disparo o no. Las funciones de activación más empleadas son:

Funciones de error

Entonces tomando como base el perceptrón, una vez obtenidas las salidas con una primera iteración nos daremos cuenta de que tan lejos o que tan cerca estuvimos de la respuesta correcta, con esto darnos la oportunidad de que pesos ajustar respecto a sus entradas, en la segunda iteración. Ahora para facilitarnos esto y tomando en cuenta que el entrenamiento consiste en varias iteraciones hasta llegar a aprender la tarea T , hacemos uso de una función de error que nos ayude a minimizar la diferencia de error en las salidas.

Primero veamos el entrenamiento para una sola neurona, para esto haremos uso de la regla de aprendizaje del perceptrón (learning rule perceptron), donde para cada entrada, en la capa de salida se le calcula la desviación a la función objetivo. El cual utilizamos para ajustar los pesos del perceptrón (ver fig 4.5).

Usualmente al principio del entrenamiento se asignan pesos aleatorios, a medida que avance el entrenamiento, se van modificando con cada iteración, así $w_i \leftarrow w_i + \Delta w_i$. Esto con base a [la regla de aprendizaje](#) donde:

4. Perceptrón simple

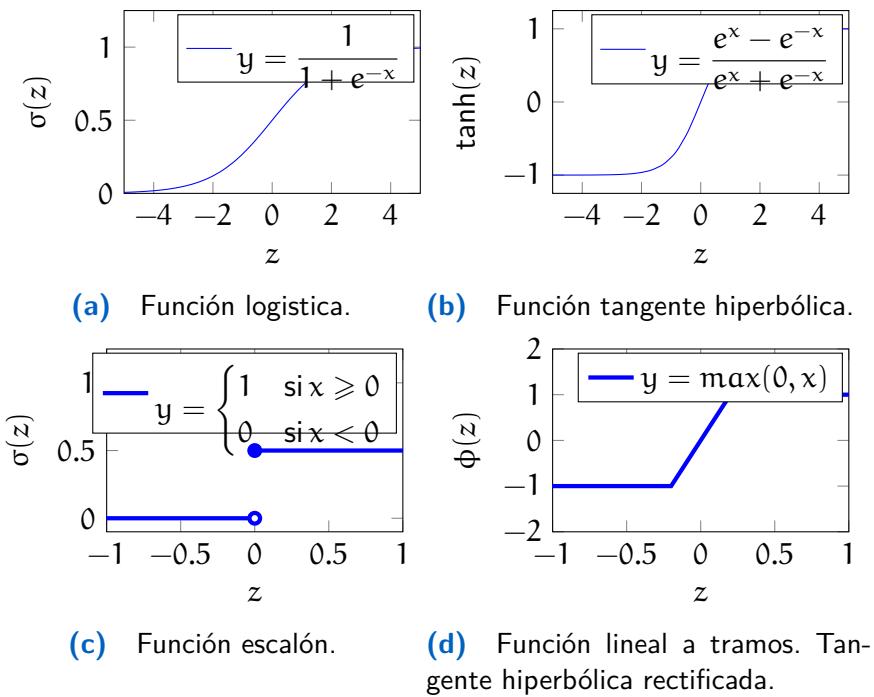


Figura 4.4 Las funciones de activación más usadas son la función sigmoide $\sigma(z)$ y la tangente hiperbólica $\tanh(z)$.

$$\Delta w_i = \alpha(y - y_{out})x_i \quad (4.1)$$

Con y es la salida deseada, y_{out} la salida generada, α la taza de aprendizaje (learning rate) y x_i la entrada i . Lo que hace la taza de aprendizaje es moderar el grado en que los pesos son cambiados con cada iteración, se le asigna un valor muy pequeño (0.1 o 0.2) y conforme se logran ajustar los pesos se minimiza aún más.

Para entrenar un perceptrón, utilizamos cualquier método de optimización de funciones para encontrar los parámetros w que minimizan el error con alguna de las siguientes funciones de error:

Diferencias al cuadrado, también conocida como regla aprendizaje delta, es la suma de cuadrados de errores que se tuvieron con cada ejemplar el el conjunto de entrenamiento. Los podemos describir como:

$$\frac{1}{2m} \sum_{m=0}^{M-1} (y_m - a_m)^2 \quad (4.2)$$

con y_m y a_m , la salida obtenida dado un ejemplar m y la salida correcta del ejemplar m respectivamente.

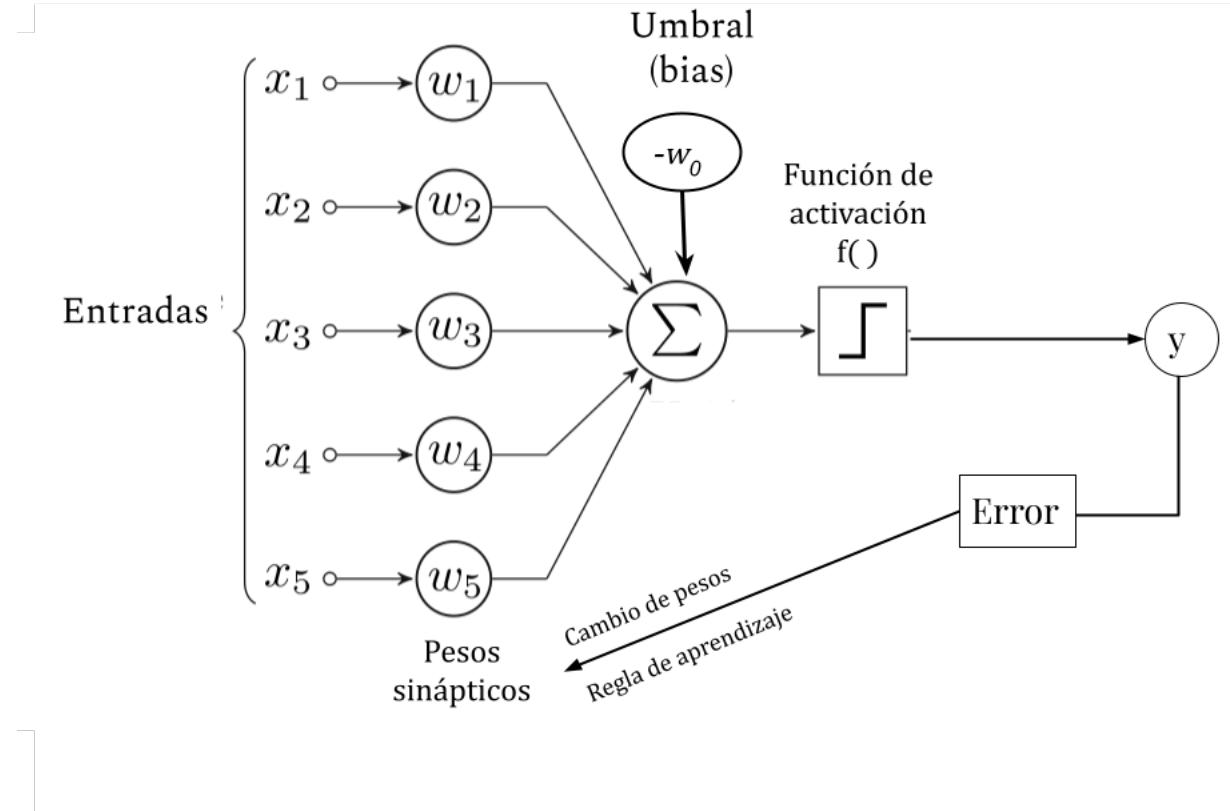


Figura 4.5 Modelo estandar de un perceptrón.

Entropía cruzada. Se usa para problemas de clasificación ya que su comportamiento es más suave (soft) y permite hacer clasificaciones más certeras. Se define como:

$$L(\Theta) = -\frac{1}{m} \sum_{m=1}^{m=0} (y^m \log(a_m) + (1 - y_m) \log(1 - a_m)) \quad (4.3)$$

Entonces juntando los conceptos que ya sabemos podemos describir el algoritmo de entrenamiento para el perceptrón de la siguiente forma:

1. Iteramos sobre todos los ejemplares.
2. Para cada ejemplar se calcula la función de propagación, es decir la suma ponderada.
3. Se calcula la función de activación con esta suma.

4. Perceptrón simple

4. Se calcula la función de salida.
5. Actualización de pesos de acuerdo a la regla de aprendizaje.
6. Repetir de 1-6 hasta que los pesos nos satisfagan, un número de iteraciones establecidas.

Medidas de rendimiento

Las medidas de rendimiento de una red nos sirven para ver de manera concreta como se comportó nuestra red, durante el entrenamiento. Que fue lo que pudo aprender (clasificar). Si tuvo un sobreajuste, es decir, memorizo y por tanto, será incapaz de predecir la clase a la que pertenece realmente el ejemplar. Para esto se usan las siguientes herramientas:

Matriz de confusión : (Confusion matrix) Es una matriz, donde las celdas representan las predicciones que hizo nuestro modelo de clasificación de clases, respecto a las salidas esperadas. Así siendo las columnas las salidas y 's del modelo entrenado y las filas las salidas esperadas y_{true} . Nos facilita a ver cuando un clasificador está confundiendo clases, contabilizando a que clase etiqueto a los diferentes ejemplares. Ahora veamos, que puede estar representando cada celda en la matriz de confusión, estos pueden ser:

1. **VP** Verdaderos positivos (*TP, True Positive*): La clasificación de los ejemplares predichos, condicen con las etiquetas esperadas de los ejemplares.
2. **VN** Verdaderos negativos (*TN, True Negative*): El ejemplar que no es parte de clase, no son asignados a esa clase, son predichos correctamente.
3. **FP** Falso positivo (*FP, False Positivo*): El ejemplar que **no** es parte de una clase i fue clasificado como tal.
4. **FN** False negativo (*FN, False Negative*): El ejemplar que es parte de una clase i no fue clasificado como tal.

Ejemplo 4.1. Notemos un ejemplo sencillo, supongamos que tenemos una tarea binaria, donde queremos indicar que una persona está embarazada (de acuerdo a unos estudios). Ahora tenemos que:

- **VP**, sería predecir que una mujer está embarazada y que en efecto esté embarazada. (**Correcto**)
- **VN**, sería con un hombre que no está embarazado y pues en efecto no está embarazado. (**Correcto**)
- **FP**, sería predecir que un hombre está embarazado y **no** este embarazado. (**Error, tipo 1**)

- ***FN***, sería predecir que una mujer **no** está embarazada y esta embarazada. (**Error, tipo 2**)

Entonces dados los resultados binarios que nos entregó el modelo, los médicos nos dan las respuestas correctas a 10 estudios, representadas en la siguiente tabla.

Ejemplar	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Sujeto	M	F	M	F	M	M	F	F	F	M
Etiqueta	No	Si	No	Si	No	No	No	Si	No	No
Clase	0	1	0	1	0	0	0	1	0	0
Predicho	0	0	0	1	0	1	0	1	0	0
Valores	VN	FN	VN	VP	VN	FP	VN	VP	VN	VN

Con estos datos, podemos construir nuestra matriz de confusión MC contabilizando las salidas obtenidas respecto a las deseadas. Quedando así de la siguiente manera:

		Salidas y	
		Si	No
Etiquetas	Si	VP = 2	FN = 1
	No	FP = 1	VN = 6

Tabla 4.1 Matriz de confusión binaria.

Ahora para una modelo que sea multiclase, en el que tengamos que clasificar varias clases de ejemplares. Tendremos una matriz M de $n * n$ donde n es el número de clases, así los valores **VP**, **VN**, **FP**, **FN**, son calculados para cada clase e identificados en la matriz M de la siguiente forma, también puedes ver la figura 4.6:

- **VP**, para la clase i será la celda $M[i][j]$ con la $i = j$.
- **VN**, para la clase i será la suma de los valores de toda la matriz menos los valores de la fila i ni los valores de la columna i .
- **FN**, para la clase i será la suma de los valores en la fila i , excepto la celda $M[i][j]$, con $i = j$ que es el **VP**.
- **FP**, para la clase i será la suma de los valores en la columna i , excepto la celda $M[i][i]$ que es el **VP**.

4. Perceptrón simple

Valores para la clase i		Salidas y del clasificador			
		clase 1	clase 2	clase i	clase n
Etiquetas ytrue	clase 1	VN	VN	FP	VN
	clase 2	VN	VN	FP	VN
	clase i	FN	FN	VP	FN
	clase n	VN	VN	FP	VN

Figura 4.6 Matriz de confusión para clasificador multiclasses.

Ejemplo 4.2. Tenemos un clasificador encargado de identificar las cinco vocales del español, escritas a mano. Entonces tenemos un total de 5 clases representadas por a, e, i, o, u, cada letra representada por un número del 0 al 4. Así la clase 0 = a, la clase 1 = e y así respectivamente. Este fue entrenado con 15 ejemplares etiquetados y se obtuvieron los siguientes resultados:

Ejemplar e	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
Etiqueta	a	e	i	o	u	a	a	e	i	i	o	u	o	u	a
Clase y _{true}	0	1	2	3	4	0	0	1	2	2	3	4	3	4	0
Predicho y	0	1	3	3	2	1	1	1	2	2	4	4	3	2	0

Ahora para hacer la matriz de confusión MC notamos que tenemos una matriz de 5x5, donde MC[i] = Predicho y MC[j] = EtiquetasReales. Entonces necesitamos contabilizar las predicciones y asignarlas a sus respectivas celdas, donde con la tabla anterior notamos que en el ejemplar e3 con y_{true}(e3) = 2, se predijo que y(e3) = 3, entonces MC[2][3] += 1, pues la etiqueta nos posiciona en la fila 2 y lo predicho en la columna 3. Ahora en el ejemplar e4 con y_{true}(e4) = 3 se predijo que y(e4) = 3, entonces MC[2][2] += 1. Así con cada ejemplar vamos a ir sumando su clasificación. Para construirla tendríamos un pseudocódigo siguiente:

```
def getMC (Ejemplares, y):
    """
    :param y: salidas obtenidas (int)
    """
    MC = [len(y)] [len(Ejemplares)] # y == Ejemplares
    full_zeros(MC)
    for e in range (0, len(Ejemplares)):
        predicho = y[e]
        y_true = Ejemplares[e].etiqueta
```

```

MC[predicho][y_true] += 1
return MC

```

Dados los datos anteriores tenemos, la siguiente matriz de confusión:

		Salidas y				
		1	2	3	4	5
Etiquetas	1	2	2	0	0	0
	2	0	2	0	0	0
	3	0	0	2	1	0
	4	0	0	0	2	1
	5	0	0	2	0	1

Tabla 4.2 MC = Matriz de confusión multiclas.

Para calcular los valores *VP*, *VN*, *FP*, *FN*, por clase se propone el siguiente pseudocódigo:

```

MC = getMC(y_salidas, y_true)

VP = VN = FP = FN = [0,0,0,0,0]

for i in range(len(MC)):
    for j in range(len(MC[0])):
        FN[i] = FN[i] + MC[i][j] if (i != j) else FN[i]
        FP[i] = FP[i] + MC[j][i] if (i != j) else FP[i]
        VP[i] = MC[i][j] if (i == j) else VP[i]
        VN[i] = sum(MC) - FN[i] - FP[i] - VP[i]

```

Si quisiéramos saber los valores *VP*, *VN*, *FP*, *FN*, para todo el desempeño total, simplemente sumamos lo obtenido en cada clase así:

```

VP_total = sum(VP)
VN_total = sum(VN)
FP_total = sum(FP)
FN_total = sum(FN)

```

Ahora los valores de cada celda nos representan lo siguiente:

4. Perceptrón simple

- **VP_{total}**, toda la diagonal de la matriz. La salida del modelo coincide con lo etiquetado con el ejemplar.
- **VN_{total}**, todas las veces que no era la clase i y dijó que no era de la clase i.
- **FN_{total}**, todas las veces que era *clase_i* y dijó que era *clase_x*. (deseado FN = 0)
- **FP_{total}**, todas las veces que predijo que era *clase_i* y era *clase_x*. (deseado FP = 0)

Así que, si los valores que no están en la diagonal de la matriz son cero o todas nuestras clasificaciones están en la diagonal, podemos decir que nuestro modelo aprendió a clasificar correctamente todas las clases.

Precisión y recuperación : La precisión (*precision*) nos dice la proporción de ejemplares que se logró clasificar correctamente. Mientras que recuperación (*recall*) nos dice cuantas asignaciones de lo que nos interesa pudo clasificar correctamente en otras palabras donde del total de las respuestas correctas que se pueden tener, cuantas respuestas positivas acertadas se tuvo.

$$P = \frac{VP}{VP + FP} = \frac{\text{VerdaderosPositivos}}{\text{ValoresEsperados}} \quad (4.4)$$

$$R = \frac{VP}{VP + FN} = \frac{\text{VerdaderosPositivos}}{\text{ValoresPredichos}} \quad (4.5)$$

Valores para la clase i		Salidas y del clasificador			
		clase 1	clase 2	clase i	clase n
Etiquetas ytrue	clase 1	VN	VN	FP	VN
	clase 2	VN	VN	FP	VN
	clase i	FN	FN	VP	FN
	clase n	VN	VN	FP	VN

Recall = VP / (VP+FN)
Cuantos valores esperados fueron asignados realmente.

Precisión = VP / (VP+FP)
Cuento de lo que clasifico fue correcto

- Cuando el modelo detecta los ejemplares, pero los incluye en otras clases también: *P* es bajo y *R* es alto.
- Cuando el modelo no detectó bien los ejemplares, pero tampoco los incluyó en otras clases: *P* es alto y *R* es bajo.

- Cuando el modelo detecta los ejemplares y no los incluye en otras clases: P y R es alto.
- Cuando el modelo no detecta los ejemplares: P y R es bajo.

En ocasiones le daremos más importancia al recall y en otras a la precisión. Retomando el ejemplo previo 4.1, no nos importa tanto los casos de error tipo 1, donde el modelo se equivoca con los ejemplares negativos, nos importa los errores de tipo 2, los Falsos Negativos, en este caso le daremos especial atención al Recall y que este sea alto. Pero si bien nuestra tarea es detectar cuando un correo es spam, no impacta tanto que aunque en ocasiones un correo sea spam, no lo clasifique como tal (error tipo 2 FN), nos es crucial que un correo que no sea spam nos lo clasifique como tal (error tipo 1 FP). Así deseando que los falsos positivos se acerquen a cero, dándonos como resultado una precisión alta aunque el recall sea bajo.

Exactitud y medida f : La exactitud (*accuracy*) es una medida de cuántas predicciones correctas en total hizo el modelo para el conjunto de datos completo (no se recomienda usar si tienes clases desbalanceadas, es decir, muchos elementos de una clase y poco de otra pues nos puede fallar totalmente con las clases pequeñas y aun así su valor sería alto). La medida f (*f score*) se utiliza para combinar las medidas de precisión y recall en un solo valor. Es práctico porque hace más fácil el poder comparar el rendimiento combinado de la precisión y la recall. Se dan las ecuaciones a continuación:

$$\text{Accuracy} = A = \frac{VP + VN}{VP + VN + FP + FN} = \frac{VP + VN}{\text{TodosLosValoresClasificados}} \quad (4.6)$$

$$F = \frac{2}{\frac{1}{P} + \frac{1}{R}} = 2 \frac{P * R}{P + R} \quad (4.7)$$

La medida f, también la podemos escribir (con un poco de aritmética) como:

$$F = \frac{2VP}{2VP + FP + FN} \quad (4.8)$$

5 | Perceptrón multicapa

Intro

Perdí el archivo :CCCC

XOR

Anteriormente, habíamos logrado separar clases de ejemplares siempre y cuando estos se pudieran modelar en un plano linealmente separable. Hasta ahora había sido un reto importante (no logrado) hacer clasificaciones de ejemplares distribuidos en un plano no separable linealmente, como lo es *la función XOR* donde, tenemos que las respuestas positivas se encuentran en una diagonal opuesta a las respuestas negativas y no hay manera de separar a los blancos de los negros con una sola frontera lineal, lo que hace imposible separar con un solo perceptrón. Entonces notamos que necesitamos de dos líneas que nos permitan separar el plano. Así llegamos a la idea que necesitamos más de una capa, que nos permita hacer la siguiente separación del plano.

Entrada x_1	Entrada x_2	Salida y
0	0	0
0	1	1
1	0	1
1	1	0

Figura 5.1 Tabla de verdad para la función XOR.

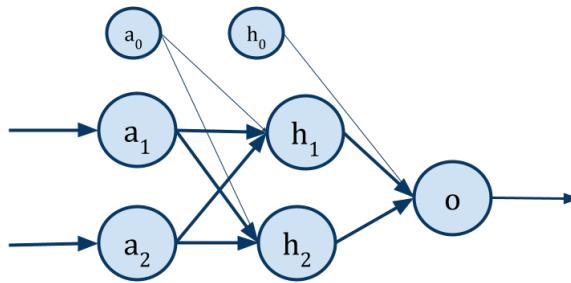


Figura 5.2 Perceptrón para la función XOR, con una capa oculta.

En la tabla de verdad notamos que para la función XOR, cuando la suma de las entradas es:

- par (tomando en cuenta al cero como par) la salida es 0.
- impar la salida es 1.

Para poder aprender la función únicamente tenemos que añadir una capa intermedia, la llamada capa oculta. Esta capa será la responsable de tomar las características de los vectores de entrada.

Ahora para la función tenemos dos entradas, una capa oculta (con dos neuronas) y una salida. Las neuronas en la capa oculta nos permitirán dividir el plano. Así, una solución sería que las neuronas ocultas denotadas por h (*hidden* de oculto en inglés) comparten pesos, la primera neurona h_1 haría la función OR, haciendo la distinción entre las entradas 00, la segunda neurona h_2 haría la función NAND haciendo posible distinguir el vector de entrada 11, una vez obtenido estos resultados de la capa oculta la neurona de salida o de output se encargara de distinguir la intersección entre estas, ejecutando la función AND. En resumen, la función **XOR** la podemos escribir como:

$$\begin{aligned} \text{XOR} &= (x_1 \vee x_2) \wedge \neg(x_1 \wedge x_2) \\ \text{XOR} &= \text{AND}(\text{OR}(x_1, x_2), \text{NAND}(x_1, x_2)) \end{aligned} \tag{5.1}$$

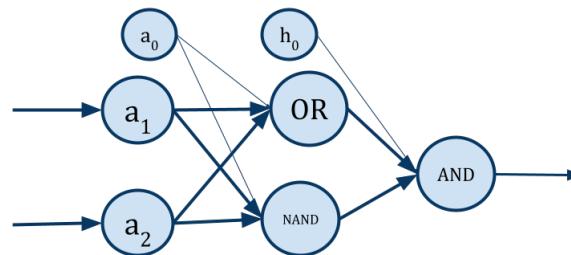


Figura 5.3 Solución para perceptrón de la función XOR.

Propagación hacia adelante manual

En esta parte vamos a ver como podemos evaluar la red para la solución que se dio en la sección anterior. (Recordemos que también se pueden dar otras soluciones para el XOR).

Entonces el procedimiento matemático general para poder evaluar una red cuando tenemos más de un perceptrón. Veamos primero que pasa con el **xor**, y el **nand**, por el momento no tomaremos en cuenta las neuronas de entrada a puesto que solo son usadas para almacenar las entradas. La capa oculta está formada realmente por dos perceptrones, que dan su salida a una neurona más que es la capa de salida de nuestra red. Para calcular sus salidas debemos aplicar la suma ponderada de las entradas a una función activación, así podemos ver que la salida de una neurona oculta es la siguiente:

$$z_j = g(\sum_i w_{ij} a_i) \quad (5.2)$$

A estos perceptrones a su vez se les están aplicando la función de activación sigmoide:

$$h_j = \frac{1}{1 + e^{-z}} \quad (5.3)$$

Así la neurona de salida recibe a los perceptrones ya evaluados y listos para aplicar pesos a estos y una función de activación, que en este caso son dados de la siguiente forma:

$$z_o = g(\sum_j w_{jo} h_j) \quad (5.4)$$

$$o = \frac{1}{1 + e^{z_o}} \quad (5.5)$$

Así tomando de ejemplo la función XOR, los valores de la capa oculta son evaluados de la siguiente forma, donde x_1 y x_2 son evaluados por 0 o 1 según sea necesario:

$$\begin{aligned} h_0 &= 1 \\ h_1 &= g(1w_{01} + x_1w_{11} + x_2w_{21}) \\ h_2 &= g(1w_{02} + x_1w_{12} + x_2w_{22}) \end{aligned} \quad (5.6)$$

Entonces hasta aquí ya tenemos los valores de la capa oculta, una vez que ya tenemos este conjunto de valores podemos empezar a trabajar con el tercer perceptor, sus valores de entrada van a estar dados por los valores de activación de h_1 y h_2 y por un sesgo,

pues recordemos que es la función Nand , por tanto necesitamos movernos ligeramente del origen. Lo que vamos a tener aquí la fórmula se ve similar, lo único es que ahora los valores de entrada fueron los valores que obtuvimos en el cálculo de la capa anterior:

$$o = g(h_0w_{0o} + h_1w_{1o} + h_2w_{2o}) \quad (5.7)$$

Como estamos trabajando capa por capa, primero entran los valores con los que van a trabajar todos los perceptrones, después calculamos todos los de la capa oculta que son independientes entre sí, aunque tengan en común las mismas entradas y finalmente hacemos el cálculo de la siguiente capa, que en ese caso es la salida, pero bien podría ser otra oculta.

Por la forma de recorrer la red (de izquierda a derecha) este algoritmo obtiene su nombre de *propagación hacia adelante*, pues lo calculado en la neurona de la capa anterior se propaga directamente a la siguiente capa, en inglés se conoce como *feedforward*. Cuando tenemos la evaluación de las capas ocultas, podemos obtener finalmente la salida final, con una evaluación final.

Si bien está forma de evaluación nos lleva al resultado correcto, este método se puede simplificar sobretodo en el caso que estemos manejando más entradas y más perceptrones en las capas ocultas. Así nos daremos cuenta que es posible usar matrices, esta forma de evaluación la veremos en la siguiente sección.

Propagación hacia adelante vectorizada (con matrices)

La sección anterior si bien nos da la idea somera de como van a ser las operaciones para el aprendizaje ahora veamos lo de forma matricial. Esto nos ayudará a en un momento dado escribirlo en el lenguaje de nuestra convención.

Retomando la red neuronal de la sección anterior ahora con pesos.

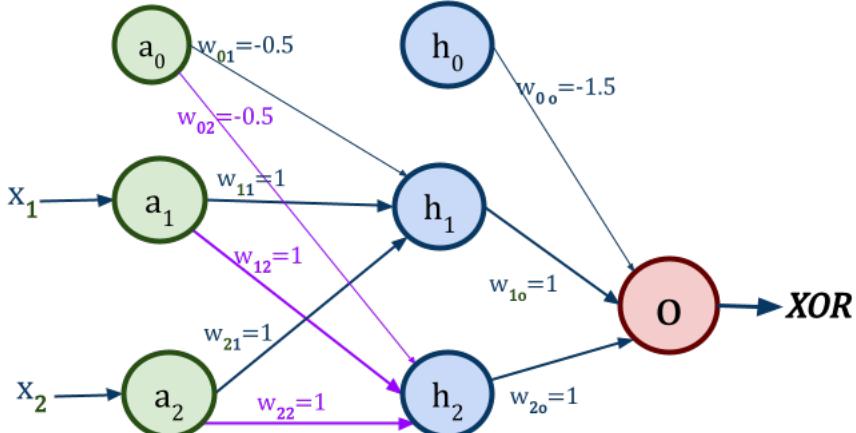


Figura 5.4 Función XOR, con capa oculta

Ahora veamos a las entradas como un vector de la siguiente forma:

$$A = \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Ahora para poder hacer los siguientes cálculos acomodamos los pesos correspondientes a cada perceptrón. Para el primer perceptrón tomamos los pesos que están conectados desde la neurona de origen a_0, a_1 y a_2 hacia la neurona oculta h_1 (los índices de los pesos indican, el origen y el destino, en ese orden), los colocamos en un renglón de la matriz de pesos, así representamos nuestro primer perceptrón y hacemos lo mismo para h_2 , así obtenemos la siguiente matriz de pesos:

$$W = \begin{bmatrix} w_{01} & w_{11} & w_{21} \\ w_{02} & w_{12} & w_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.5 & 1 & 1 \\ 1.5 & -1 & -1 \end{bmatrix}$$

Ya que tenemos la representación de las entradas y pesos en vectores podemos hacer la representación de la activación de estas neuronas de la capa oculta, que es de la forma $H = g(W * A)$, que de forma matricial lo podemos escribir de la siguiente forma:

$$H = \begin{bmatrix} h_1 \\ h_2 \end{bmatrix} = g \left(\begin{bmatrix} -0.5 & 1 & 1 \\ 1.5 & -1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \right) = g \left(\begin{bmatrix} 0.5 \\ 0.5 \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

La matriz resultante representa los valores de activación resultantes en cada perceptrón, el primer valor de la matriz representa el resultado de la activación de h_1 y el segundo a h_2 . Así ahora tenemos al vector H que sera el vector de entrada para la neurona de

salida o, procedemos de la misma forma tomando en cuenta al sesgo h_0 y a los pesos en forma matricial, nos queda de la siguiente forma $o = g(W_{ho} * H)$:

$$o = g \left(\begin{bmatrix} -1.5 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \right) = g([0.5]) = [1]$$

Hasta este momento ya logramos resolver la función XOR para una sola entrada, esta forma de resolver una red la llamaremos convención 1. Si queremos que nos de la respuesta a varias entradas al mismo tiempo tendríamos que modificar un poco la representación de nuestros valores, trasnspodiendo las matrices anteriores que teniamos. Que se verían de la siguiente forma:

$$A^T = [a_0 \ a_1 \ a_2] = [1 \ 0 \ 1]$$

$$W^T = \begin{bmatrix} w_{01} & w_{02} \\ w_{11} & w_{12} \\ w_{21} & w_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.5 & 1.5 \\ 1 & -1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$$

$$H = g(A^T * W^T)$$

$$H = [h1 \ h2] = g \left([1 \ 0 \ 1] \begin{bmatrix} -0.5 & 1.5 \\ 1 & -1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \right) = g([0.5 \ 0.5]) = [1 \ 1]$$

$$o = g \left([1 \ 1 \ 1] \begin{bmatrix} -1.5 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \right) = g([0.5]) = [1]$$

Esta forma se llama la convención 2, lo que estamos haciendo en la convención 2 es más bien poner nuestro ejemplar de manera horizontal. Así cada renglón de A va a representar una entrada el primer valor de cada renglón siempre será el sesgo. Así al tener varias entradas de la siguiente forma:

$$X = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

A la matriz A es X transpuesta y le agregamos los sesgos, quedando así:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

La capa oculta quedaría de la siguiente forma $H = g(W^T A)$

$$H = g \left(\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -0.5 & 1.5 \\ 1 & -1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \right) = g \left(\begin{bmatrix} -0.5 & 1.5 \\ 0.5 & 0.5 \\ 0.5 & 0.5 \\ 1.5 & -0.5 \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

El resultado de esta matriz H es que, la primera columna está representando la neurona que evalua la función OR y la segunda columna representa el NAND. Para obtener la salida de la neurona o que es un AND, haríamos las mismas operaciones anteriores solo que con sus respectivos pesos y valores de H^T , así obteniendo lo siguiente $o = g(H'W^T) = \text{XOR}$:

$$o = g \left(\begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1.5 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \right) = g \left(\begin{bmatrix} -0.5 \\ 0.5 \\ 0.5 \\ -0.5 \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Más adelante esta representación, nos ayudará cuando estemos trabajando con redes neuronales que necesiten *diferentes tipos de características*, como; edades, número de hijos, tamaño de una casa, etc. Esta anotación es mucho más visual para la forma en que vamos a recibir la información (tabla de datos), por eso es más usada esta versión.

Interpretación matemática del mapeo no lineal

En esta sección vamos a ver por qué agregar una capa más nos permite calcular funciones que no era posible calcular antes es decir no basta con tener más percepciones en realidad necesitamos tener percepciones que reciban como entrada la salida de percepciones anteriores y esto lo vamos a notar aquí por eso el selector es una función tan útil para poder explicar estos conceptos de entrada que teníamos al inicio de la función sort eran los valores 0 0 0 1 1 0 y 1 1 estos solamente los podría bueno puede utilizar perceptor únicamente para evaluar funciones que sean linealmente separables entonces cuando hemos aplicado la primera capa donde pudimos poner tantas operaciones como que hicimos lo que hicimos fue tomar estas entradas y mapear las a un conjunto distinto y esté ocurriendo en este nuevo conjunto

Observen que las entradas ahora son 01 11 11 10 es decir estas dos están duplicadas ya no tengo el 0 0 por eso es que se dice que trabajamos con un mapeo no lineal nuestra función sigmoide o nuestra función escalón transformaron nuestro espacio de manera que no tenemos ahora una relación 1 a 1 qué efecto va a tener. Aquí tenemos una vez más cuáles son las entradas originales las entradas que se obtuvieron es bueno salidas de las capas ocultas que van a hacer ahora las entradas para el último perceptor entonces veamos acá qué pasó con este cuadro aquí teníamos cuatro datos que no eran linealmente

separables después de la primera capa fue como haberlo plegado a otro espacio de dos dimensiones, pero observen ahora que como esto es bueno vamos a ver quién se mató a quién el 0 0 se convirtió en 0,1 es decir este para acá el 0,1 se convirtió en 1,1 este fue para acá el 1010 también se convirtió en 1,1 es otro de acá y el 11 se convirtió en el 10 está aquí entonces nuestros puntos negros como que giraron un poquito y quedaron aquí y nuestros dos puntos blancos quedaron mapeados uno encima del otro en el mismo punto de este lado.

Entonces ahora sí lo puedo separar con un plano qué pasa en medio de los dos cualesquiera que lo logre es bueno entonces estos tres valores quedaron mapeados ahora a un nuevo espacio que por cierto tiene una dimensión solo hay un valor. Entonces el paso fundamental radicó en que pudimos mapear este espacio hacia un espacio nuevo donde si es posible separar a nuestros datos linealmente y sobre esto pues ya simplemente aplicamos lo que podía hacer cualquier perceptual matemáticamente ese es el poder que nos está añadiendo una capa de en medio y básicamente lo podemos generalizar ahora si a cualquier función. Es posible quitar los sesgos si utilizamos la función escalón como función de activación y definimos precisamente el menor o igual para la parte del escalón en esta ocasión vamos a obtener valores que están exactamente en este punto de salto así es que vamos a tener que decir quién queda a la izquierda quien quiere a la derecha y entonces podemos hacer esto igual se necesitan dos capas, pero podemos quitarnos la parte de los sesgos porque nuestras fronteras si están pasando por ser un coma se hace solo por curiosidad bien aquí tenemos entonces ya esa interpretación vemos que los ceros negativos se van a tomar como ceros y solamente los positivos van a quedar como unos y automáticamente se puede hacer esta versión resumida.

Propagación hacia adelante para el perceptrón multicapa

Ahora para el modelo de una red en general tenemos nuestra arquitectura base que va a ser una red en capas también se le conoce como el perceptron multicapa (tipo feed-forward) en esta primera versión tenemos la capa de entrada que realmente solo recibe las entradas y el sesgo. Las salidas de cada capa sirven de entradas a la capa inmediatamente posterior en la red multicapa. Por lo general todas las salidas de una capa se distribuyen a todas las neuronas de la siguiente capa, formando capas completamente conectadas (fully-connected layers). Cuando la red multicapa incluye más de una capa oculta, se dice que la red neuronal es profunda [deep neural network]. Los niveles de actividad de las neuronas de cada capa vienen dados por una función de activación no lineal de los niveles de actividad de las neuronas de la capa inferior.

(Insertar imagen de red).

Anteriormente habíamos estado asignando pesos a ojo/intuición, esto porque eran pocos los valores de entrada, esto normalmente no es así y vamos a desconocer en la totalidad los pesos necesarios que se aproximen a nuestra función objetivo.

5. Perceptrón multicapa

La red neuronal es en sí, es una función que nos va permitir pasar un vector de n dimensiones a uno de m dimensiones, con n la cantidad de características en nuestros datos y m la cantidad de características que necesitamos obtener.

Entonces vamos a utilizar un tipo de codificación que se utiliza para la clasificación, llamado One-hot encoding, donde nos vamos a enfocar en el valor más elevado en nuestros resultados. Ahora nuestros problemas involucran más de dos clases, donde cada renglón de nuestra matriz de salida nos va indicar si pertenece o no a una clase, algún ejemplar dado. Así tenemos cada dimensión en la matriz va a representar una clasificación, por ejemplo si queremos distinguir en una imagen entre un coche, casa, animal lo podríamos codificar de la siguiente forma:

$$\text{Salida1} = \text{coche} = [1 \ 0 \ 0] \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\text{Salida2} = \text{casa} = [0 \ 1 \ 0] \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\text{Salida3} = \text{vaca} = [0 \ 0 \ 1] \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Toda la parte del aprendizaje, de reconocer distintos patrones, obtención de características varias, va a quedar entre *la capa de entrada y las capas ocultas*, para que al final nos quedemos únicamente con el problema de separar las clases unas de otras tantas sean necesarias, *en la capa de salida* y tengamos nuestra información clasificada. Así cada neurona de salida es una clase, específica, entonces si se activó esa neurona nos indica que nuestro ejemplar pertenece a dicha clase. Es importante no escatimar en el número de perceptrones necesarios para la clasificación a la salida, pues esto podría resultar en asignación conjunta de características, que se podrían interpretar como similitudes entre clases y en caso de no existir, dificultaan enormemente la distinción entre características y generar fallos a la red. Siempre asignar tantas dimensiones de salida (perceptrones) como clases.

Los cálculos para cada capa intermedia realmente son las mismas que hemos visto anteriormente representándose de la siguiente forma:

$$a_j^{(l+1)} = g \left(\sum_i w_{ij}^{(l)} a_i^{(l)} \right) \quad (5.8)$$

Con $l + 1$ representando el número de capa a la que vamos, g la función activación (normalmente podemos usar la función sigmoide) y a_i los valores de las entradas.

6 | Entrenamiento por retropropagación

Esquema general entrenamiento

En este capítulo vamos a trabajar con el entrenamiento (específicamente por retropropagación), en esta sección abordaremos primero el esquema general del entrenamiento. A lo largo del capítulo veremos la derivación del primer algoritmo de entrenamiento para perceptrones multicapa (este es de los más comunes en esta área y el primero descrito propiamente).

En el tercer capítulo habíamos visto el concepto de aprendizaje para una máquina, ahora vamos a definir en que consiste aprender algo en el campo de las redes neuronales. Retomando lo descrito en ese capítulo, recordemos que aprender para un modelo es más que nada encontrar una función que se asemeje a ciertas salidas específicas, esta función está dentro de un espacio de funciones posibles propuestas. La función que deseamos encontrar modela algún tipo de tarea que nos interesa que se aprenda.

Definición 6.1

El problema de aprendizaje para un perceptrón multicapa: Dada una arquitectura de red neuronal, encontrar los pesos tales que la función $h\Theta(x)$ (definida por la red neuronal) aproxime, hasta cierta tolerancia, la función de interés $f(x)$. Con x los datos de entrada.

En la definición anterior, el vector x , consisten en distintas características de los ejemplos provistos, según sea el problema a resolver, por ejemplo:

- Segmentos de alguna canción.
- Píxeles de imágenes.
- Valores equivalentes a precios del mercado.

En este momento nos estamos concentrando en problemas de clasificación así que estas redes están clasificando los ejemplos según ciertas características. Estas clasificaciones

6. Entrenamiento por retropropagación

pueden ser muy interesantes, algunas por ejemplo se pueden dedicar a clasificar canciones, identificando ciertas emociones que transmiten como tristeza o alegría.

Nuestra red neuronal va empezar sus cálculos apartir de los datos de entrada x , entonces al finalizar cada uno de los ejemplares va a ser mapeado a alguna clase (en el espacio de clases). Por medio de una función donde $f(x)$ es nuestra función ideal que hacer el mapeo exacto los ejemplares a su clase. Así si logramos que nuestra función $h\Theta(x)$ se aproxime a $f(x)$, la red neuronal nos daría las respuestas esperadas dado ciertos ejemplares, como por ejemplo:

- Dado unas imágenes de distintas plantas, identificar correctamente el nombre de cada una.
- Dado un fragmento de canción indicarnos su género.
- Dada una oración identificar si contiene un mensaje de odio.

Entonces el reto de la red neuronal es aproximar una función $f(x)$ (que se asume existe en el universo), primero debemos intentar calcular $h\Theta(x)$ (h de hipótesis, de un espacio de hipótesis). Esta hipótesis puede que aproxime muy bien la función pero en la mayoría de los casos no es así, entonces iremos haciendo ajustes a los pesos (que definen la función h) para que pueda aproximarse lo más posible a nuestra función objetivo.

Como en muchos casos vamos a intentar aproximar funciones que no corresponden a un concepto matemático, sino más a percepciones humanas tales como sentimientos o clasificar abstracciones humanas, entonces se puede dar el caso que realmente no se pueda aproximar con total exactitud la función y le demos un cierto *grado de tolerancia*, donde se asume que se pueda dar ciertos errores en ciertos ejemplares. Dependiendo del contexto vamos a asignar el rango de tolerancia de errores.

Es importante notar que si los datos de entrenamiento resultan clasificados con mucha precisión es probable que la red este aprendiendo datos no útiles para la tarea dada, es decir ese aprendiendo *ruido*. Y al momento pasar los ejemplares de prueba no entregue buenos resultados.

Entrenar una red para que se aproxime a la función objetivo cada vez más, debemos hacer lo siguiente:

- Definir una *función de error* o pérdida J (o L de lost, pérdida en inglés) que mida la distancia entre los valores deseados y los valores obtenidos con un conjunto de pesos dados Θ .
- Utilizar alguna *técnica de optimización* de funciones que minimize este error.
- Definir la *arquitectura* de la red, la *función de error* y la técnica de optimización, considerando el tipo de función objetivo.

Una vez que ya sabemos en qué consiste el entrenamiento veamos un esquema general conocido como *entrenamiento por retropropagación* o propagación hacia atrás, en inglés *Backpropagation*. Anteriormente habíamos visto la evaluación de una red con propagación hacia delante (de izquierda a derecha), con la retropropagación vamos a recorrer la red hacia atrás (de derecha a izquierda), de la siguiente forma:

- Utilizar *la regla de la cadena* para obtener el gradiente de la función de error con respecto al conjunto de pesos, dado un conjunto de datos de entrenamiento \mathbf{X} con sus etiquetas \mathbf{Y} .
- Utilizar *descenso por el gradiente* para encontrar un mínimo, lo suficientemente bueno, de la función de error. Esta técnica es la más sencilla, por eso usualmente se utilizaba en un principio
 - * La idea es que al inicio no sabemos cuánto deben de valer los pesos para modelar correctamente la función, entonces al comienzo se hace una asignación aleatoria de pesos. Existe un conjunto de pesos ideales a los cuales queremos aproximar nuestros pesos aleatorios. Con estos calculamos el error que tiene nuestros pesos, haciendo las comparaciones con los datos que se obtuvieron al aplicar el feedforward, sobre los datos de entrada con los datos esperados. El desenso por el gradiente va modificar poco a poco los pesos, para tengamos una nueva (y mejor) aproximación y nos acerquemos más a una región donde el error sea menor. Para calcular el descenso por el gradiente, se calculan las derivadas de la función de error con respecto a los parámetros.
 - * Entonces tenemos una actualización de la siguiente forma:

$$\Theta' = \Theta - \alpha \nabla_{\Theta} J \quad (6.1)$$

Donde Θ es la propuesta para nuestros parámetros iniciales, ∇_{Θ} es el gradiente que nos da el máximo acenso de la función de error, el cual lo invertimos con el menos, para que siempre nos dirigamos al mínimo local más próximo.

- Se puede usar otra técnica de optimización más avanzada, pero esta también involucraría al gradiente.
- La derivación original utilizaba diferencias al cuadrado como función de error. Esta la pueden consultar en Russell, Stuart y Peter Norving (2010). Artificial Intelligence, A Modern Approach.
- Para problemas de clasificación es más efectivo usar entropía cruzada como método de optimización. Para problemas de regresión es adecuado usar diferencias al cuadrado.

Función de error: Entropía cruzada

En esta sección veremos una de las funciones de error más utilizadas en el campo de redes neuronales, usada sobre todo en problemas de clasificación, la entropía cruzada (en inglés *cross entropy*) la cual tiene su origen en el área de la teoría de la información, la cual mide: **la cantidad de bits necesarios para identificar una clase** dada la hipótesis de la red representada como $h_{\Theta}(x)$, que trata de asemejar la función objetivo $y(x)$, la cual es la que tiene los valores reales asociados a las etiquetas.

Uno de los labores de la red neuronal es codificar con *bits* la información que recibe para hacer asignaciones de las características encontradas y así clasificarlos. Todo el tiempo se está intentando predecir si la función propuesta se asemeja lo suficiente a la función objetivo, en caso de ser así ser podrá codificar adecuadamente nuestros ejemplares.

La formula de entropía cruzada usada en este texto será la siguiente:

$$J(\Theta) = -\frac{1}{m} \left[\sum_{i=1}^m \sum_{k=1}^{s_L} y_k^i \log(h_{\Theta}(x^i))_k + (1 - y_k^i) \log(1 - h_{\Theta}(x^i))_k \right] \quad (6.2)$$

donde:

- m es el número de ejemplares del entrenamiento.
- s_L es el número de neuronas en la capa L .
- y_k es el valor para la k -ésima neurona de salida y toma valores en 0,1.

En la primera parte notamos que tenemos una fracción, está es en esencia la que nos da el promedio de error de la red sobre el número de ejemplares de entrenamiento evaluados en ese momento (m). Seguido de una multiplicación de la suma de los ejemplares que nos da todas las contribuciones de error, que está a su vez contiene la suma de las neuronas en la capa de salida de las neuronas de cada clase. Así en esta suma podemos distinguir dos partes, la primera es una multiplicación que compone de la etiqueta real asociada al ejemplar multiplicado por el logaritmo de la etiqueta asignada por la red, y la segunda parte de una multiplicación de uno menos la etiqueta real por el log de uno menos lo dado por la red. Así en esta parte se está tomando en cuenta las dos posibilidades que puede tomar cada neurona de salida respecto al ejemplar dado, 0 no pertenece a la clase y 1 pertenece a la clase.

En el primer caso y_k toma el valor de cero, entonces la primera parte de esta sección se va también a cero, es ahí donde la segunda parte nos permite evaluar que tan lejos estuvimos de la respuesta correcta usando el logaritmo de ésta. Ahora supongamos que lo deseado era que la neurona predijo 1 pero lo correcto era 0, la primera parte se va a cero y en la segunda parte tendremos un logaritmo de un número cercano a cero dandonos

que nos vamos a acercar a menos infinito, es por eso importante el signo negativo en la parte inicial de la función, pues nos va ayudar a que la función nos indique a infinito cuando estamos errados en el resultado.

Ahora en caso de obtener la respuesta deseada, con una salida de 0 cuando en efecto era este, entonces tendremos el $\log(1)$ que es cero, así nuestra función de error valdrá 0, este caso es poco común pues recordemos que para función de activación h_Θ usando la función logística solo se acerca al 1. El caso que lo deseado era que nos diera 1 la neurona esta contemplado en la primera parte donde de nuevo con la ayuda del logaritmo en caso de dar la respuesta incorrecta 0 este apuntara hacia menos infinito y con ayuda del menos de afuera va hacia infinito, y en caso de estar en lo correcto nos vamos a acercar al cero, dandonos como resultado un error cercano a cero.

En resumen con esta función si estamos en lo correcto vamos a acercarnos a cero, de lo contrario va a tener hacia infinito.

Derivada de la función logística

Para poder calcular el gradiente, primero debemos ver la derivada de la función logística. Recordemos en la siguiente figura como se ve la función logística.

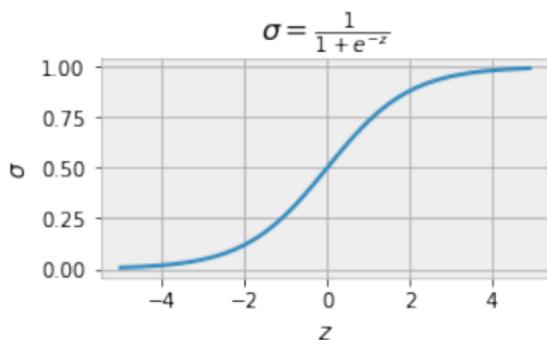
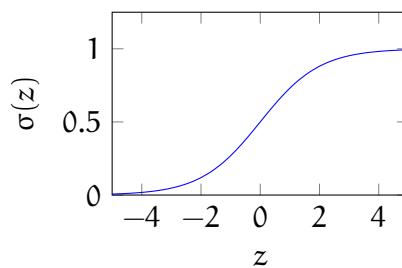


Figura 6.1 Gráfica función logistica.



(a) Función logistica.

Figura 6.2

6. Entrenamiento por retropropagación

La función logística estandar centrada en el origen como en la figura 6.1 se escribe de la siguiente forma:

$$\sigma(z) = \frac{1}{1 + e^{-(z)}} \quad (6.3)$$

Los siguientes calculos son realizados para un solo perceptrón, en concreto uno de salida, donde este está recibiendo los datos de salida de neuronas en la capa oculta, así el factor z que está recibiendo la función, es la combinación lineal de los valores de entrada multiplicados por los pesos asignados para este perceptrón y sumados todos. Entonces $z = X\Theta = [X_0\theta_0 + X_1\theta_1 + \dots + X_n\theta_n]$. Así nuestra función queda de la siguiente forma:

$$\sigma_\Theta(X) = \frac{1}{1 + e^{-X\Theta}} \quad (6.4)$$

Entonces vamos a calcular la derivada de esta función con respecto a cualquiera de estos parámetros i de z . Por la regla de la cadena comenzamos calculando la derivada queda de la siguiente forma:

$$\frac{\partial \sigma}{\partial \theta_i} = -\frac{1}{(1 - e^{-X\Theta})^2} e^{-X\Theta} (-x_i) \quad (6.5)$$

Reescribiendo la misma derivada con un poco de álgebra nos queda de la siguiente forma:

$$\frac{\partial \sigma}{\partial \theta_i} = \frac{1}{1 + e^{-X\Theta}} \frac{e^{-X\Theta}}{1 + e^{X\Theta}} x_i \quad (6.6)$$

Con la reescritura anterior nos damos cuenta que tenemos la función sigma en uno de los productos así que procedemos a sustituirlo y a sumar y restar unos unos. Así obteniendo lo siguiente:

$$\frac{\partial \sigma}{\partial \theta_i} = \sigma_\Theta(X) \frac{e^{-X\Theta} - 1 + 1}{1 + e^{X\Theta}} x_i \quad (6.7)$$

Vamos a separar a conveniencia los términos de la siguiente forma:

$$\frac{\partial \sigma}{\partial \theta_i} = \sigma_\Theta(X) \left(\frac{1 + e^{-X\Theta}}{1 + e^{-X\Theta}} - \frac{1}{1 + e^{-X\Theta}} \right) x_i \quad (6.8)$$

Así sustituyendo con la función sigmoide y llevando a uno, llegamos a lo siguiente:

$$\frac{\partial \sigma}{\partial \theta_i} = \sigma_\Theta(X)(1 - \sigma_\Theta(X))x_i \quad (6.9)$$

Entonces lo que tenemos es una propiedad bastante interesante de la función logística. Se está calculando la derivada de sigma con respecto al exponente o sea que sería: Entonces lo que vemos es que la derivada de la sigmoide es la sigmoide por uno menos la sigmoide:

$$\frac{\partial \sigma}{\partial \theta_z} = \sigma(1 - \sigma) \quad (6.10)$$

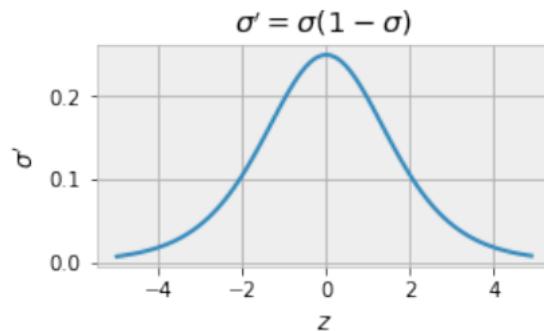


Figura 6.3 Gráfica de la derivada de la función logística.

Las funciones logísticas se utilizan a menudo en redes neuronales para introducir no linealidad en el modelo o para sujetar señales dentro de un intervalo específico. Un elemento de red neuronal popular calcula una combinación lineal de sus señales de entrada y aplica una función logística limitada como función de activación al resultado; este modelo puede verse como una variante "suavizada" de la neurona umbral clásica.

Estas relaciones dan como resultado implementaciones simplificadas de redes neuronales artificiales con neuronas artificiales. Las funciones sigmoidales que son antisimétricas con respecto al origen (por ejemplo, la tangente hiperbólica) conducen a una convergencia más rápida cuando se entrena red con retropropagación.

Una opción común para la activación o "plastamiento" funciones, usadas para grandes magnitudes para mantener la respuesta de la red neuronal limitada.

Las funciones logísticas se utilizan en varios roles en estadística. Por ejemplo, son la función de distribución acumulativa de la familia logística de distribuciones y, un poco simplificadas, se utilizan para modelar la posibilidad que tiene un jugador de ajedrez de vencer a su oponente en el sistema de clasificación.

En la siguiente sección veremos la derivada de la función de error.

Entrenamiento en la última capa

En esta sección nos vamos a enfocar en la última capa de red, consideraremos la siguiente red de la figura 6.4.

6. Entrenamiento por retropropagación

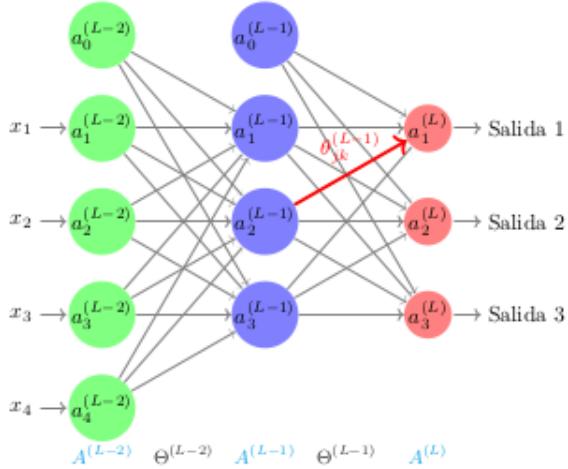


Figura 6.4 Red neuronal(entrenamiento última capa.)

Vamos a calcular el gradiente considerando que estamos evaluando a la red para un ejemplar. Una vez que la red tomó los valores de entrada (neuronas en verde) y los evaluó pasando por la capa oculta (neuronas en azul) hasta asignar el ejemplar a una neurona de salida (neuronas en rojo). Lo que la función de error está midiendo es la *distancia* entre lo que obtuvimos en la capa de salida y una colección de etiquetas objetivo, es decir, la clasificación real del ejemplar.

Entonces por ahora nuestra función de error está actuando solo sobre la capa de salida, pero recordemos que para llegar a la evaluación de cualquiera de las neuronas en la capa de salida, se calculó la activación de la capa oculta y de la capa de entrada. Con los respectivos pesos de cada capa. Entonces podemos decir que los valores obtenidos en la evaluación final dependen directamente de los pesos en cada capa.

Tomando en cuenta lo anterior, el gradiente lo vamos a calcular capa por capa. Desde la capa de salida hasta la capa de entrada. Lo primero que tenemos que calcular es como dependió la función de error de los pesos de la capa oculta (azul) que la antecede.

La notación que vamos a usar más adelante va a considerar las neuronas de entrada con el índice i , las neuronas de la capa oculta con el índice j , y las neuronas de salida con el índice k . Así, los pesos que conectan a la neurona j con la neurona k , se representan como θ_{jk} .

Para denotar la capa que estamos haciendo referencia vamos a emplear el superíndice (L) con referencia a last, último en inglés, dado que estamos haciendo los cálculos desde la última capa, hacia atrás, la penúltima capa se va a indicar con $(L - 1)$, la anterior de esta como $(L - 2)$ y así sucesivamente. Entonces, para referirnos a un peso para la última capa, que conecta a la penúltima capa con la de salida, se escribe como θ_{jk}^{L-1} que es el peso marcado en rojo en la figura 6.4.

Usemos la entropía cruzada como función de error, para un ejemplar 6.2:

$$J(\Theta) = - \left[\sum_{k=1}^{s_L} y_k^{(i)} \log(a_k^{(L)}) + (1 - y_k^{(i)}) \log(1 - a_k^{(L)}) \right] \quad (6.11)$$

La suma está tomando en cuenta que el ejemplar puede ser clasificado a una de las varias clases a poder asignar s_L , es decir, el número de neuronas en la capa L. Los valores obtenidos de la activación las neuronas están definidos por $a_k^{(L)}$, y los deseados por y_k .

Lo siguiente a hacer es calcular la derivada con respecto a los pesos que conectan la última capa con la penúltima capa, es decir, $\theta_{jk}^{(L-1)}$.

Entonces vamos a calcular la parcial de error con respecto a uno de los pesos de la capa anterior. Así la suma se "va" dado que el peso solo va a afectar a la k-esima neurona, quedando solo con la operación que se efectúa en esta, usando la regla de cadena obtenemos lo siguiente:

$$\frac{\partial J}{\partial \theta_{jk}^{L-1}} = - \left[y_k \frac{\partial}{\partial \theta_{jk}^{(L-1)}} g(z_k) - \left(\frac{1 - y_k}{1 - a_k^L} \right) \frac{\partial}{\partial \theta_{jk}^{(L-1)}} g(z_k) \right] \quad (6.12)$$

Con:

$$z_k = \sum_{j'=0}^{s_{L-1}} \theta_{j'k} a_{j'}^{L-1} \quad (6.13)$$

Recordemos que $a_k^{(L)}$ está calculado por una función de activación $g(z_k)$. Donde z_k es la suma de las combinaciones lineales de las neuronas conectadas hacia la neurona k_n . Estos valores son calculados en el algoritmo de propagación hacia adelante. Los escribimos aquí para recordar como está siendo calculada la parcial.

De la derivada de la suma sólo queda $a_{j'}$ con $j' = j$. Siguiendo la regla de la cadena para los términos que nos faltaba nos queda lo siguiente:

$$\frac{\partial J}{\partial \theta_{jk}^{L-1}} = - \left[\frac{y_k}{a_k^{(L)}} g'(z_k) - \left(\frac{1 - y_k}{1 - a_k^L} \right) g'(z_k) \right] a_j^{(L)} \quad (6.14)$$

Simplificando, nos queda lo siguiente:

$$\frac{\partial J}{\partial \theta_{jk}^{L-1}} = - \left[\frac{y_k(1 - a_k^{(L)}) - a_k^{(L)}(1 - y_k)}{a_k^{(L)}(1 - a_k^{(L)})} \right] g'(z_k) a_j^{(L)} \quad (6.15)$$

Recordando que la derivada de la sigmoide queda como $g' = g(1 - g)$ tenemos que:

$$g'(z_k) = a_k^{(L)}(1 - a_k^{(L)}) \quad (6.16)$$

6. Entrenamiento por retropropagación

Así nos queda como:

$$\frac{\partial J}{\partial \theta_{jk}^{L-1}} = - \left[\frac{y_k - y_k a_k^{(L)} - a_k^{(L)} + a_k^{(L)} y_k}{a_k^{(L)}(1 - a_k^{(L)})} \right] a_k^{(L)}(1 - a_k^{(L)}) a_j^{(L)} \quad (6.17)$$

Y haciendo un poco de álgebra nos queda como:

$$\frac{\partial J}{\partial \theta_{jk}^{L-1}} = -a_j^{(L-1)}(y_k - a_k^{(L)}) \quad (6.18)$$

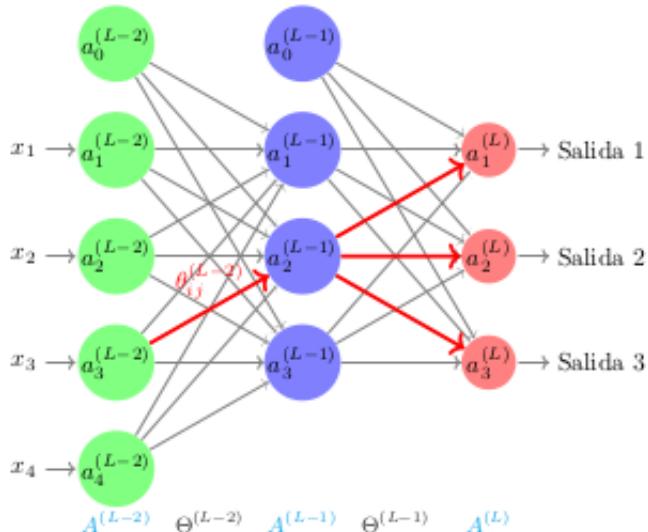
Representando a $(y_k - a_k^{(L)})$ como δ_k nos queda:

$$\frac{\partial J}{\partial \theta_{jk}^{L-1}} = -a_j^{(L-1)}\delta_k \quad (6.19)$$

Esta última notación con delta se usa pues con esto estamos representando el error que se cometió en la última capa, pues es la diferencia entre lo deseado y lo que se obtuvo realmente.

Con esto ya sabemos calcular todas las parciales del error con respecto a los pesos hacia la última capa. En la siguiente sección seguimos con el cálculo para las siguientes capas.

Parcial con respecto a los pesos en la última capa



En esta sección vamos trabajar con la última capa, vamos a tener un poco más de elementos pero va a ser sencillo agregarlos en primer lugar vamos a tener que observar quienes se ven afectados por el nuevo peso con respecto al cual queremos derivar bien aquí tenemos un poco más de transmisión de efecto este peso solamente afecta a esta neurona pero a través de esta neurona. ahora si estamos conectados con absolutamente todas las otras neuronas.

Retomando la entropía cruzada de la sección anterior 6.11

$$J(\Theta) = - \left[\sum_{k=1}^{s_L} y_k^{(i)} \log(a_k^{(L)}) + (1 - y_k^{(i)}) \log(1 - a_k^{(L)}) \right] \quad (6.11)$$

Capa anterior:

$$\frac{\partial J}{\partial \theta_{jk}^{L-2}} = - \sum_{k=1}^{s_L} \left[\frac{y_k}{a_k^L} \frac{\partial}{\partial \theta_{jk}^{(L-2)}} g(z_k) - \left(\frac{1 - y_k}{1 - a_k^L} \right) \frac{\partial}{\partial \theta_{jk}^{(L-2)}} g(z_k) \right] \quad (6.20)$$

Con:

$$z_k = \sum_{j'=0}^{s_{L-1}} \theta_{j'k} a_{j'}^{L-1} \quad (6.21)$$

Entonces tenemos que:

$$\frac{\partial J}{\partial \theta_{jk}^{L-2}} = - \sum_{k=1}^{s_L} (y_k - a_k^L) \theta_{jk} \frac{\delta}{\delta \theta_{Lj}^{(L-2)}} a_j^{(L-1)} \quad (6.22)$$

Sustituyendo a $(y_k - a_k^L) = \delta_k$ y a $a_j^{(L-1)} = g(z_j)$ nos queda:

$$\frac{\partial J}{\partial \theta_{jk}^{L-2}} = - \sum_{k=1}^{s_L} (\delta_k) \theta_{jk} \frac{\delta}{\delta \theta_{Lj}^{(L-2)}} g(z_j) \quad (6.23)$$

Con:

$$z_j = \sum_{i'=0}^{s_{(L-2)}} \theta_{i'j}^{L-2} a_{i'}^{(L-2)} \quad (6.24)$$

Así finalmente tenemos que:

$$\frac{\partial J}{\partial \theta_{jk}^{L-2}} = - \sum_{k=1}^{s_L} \delta_k \theta_{jk} g'(z_j) a_i^{(L-2)} = \delta_j^{(L-1)} a_i^{(L-2)} \quad (6.25)$$

Entonces aquí vamos a tener que hacer los toman en cuenta más términos clientes para poder hacer esta derivación voy a tener que volver a empezar desde un principio es decir

6. Entrenamiento por retropropagación

vamos a volver a empezar con la función de error original y vamos a tener que empezar a derivar desde aquí vamos a recordar ahora que cada vez que calculamos los valores de activación en la última capa bueno estos provienen en realidad también dependen de el valor de activación en esta neurona de acá atrás entonces eventualmente vamos a tener que regresar hasta acá y el valor de esta neurona pues dependió ahora sí directamente del peso que nos está interesando entonces vamos a ir desarrollando poco a poco esa composición de funciones entonces comencemos con el mismo paso de antes calculamos la derivada parcial de jota con respecto al peso correspondiente pero ahora si no puedo eliminar la suma que tengo al inicio porque todos los valores de salida dependen de el peso con el que estamos trabajando entonces lo que vamos a tener aquí ahorita es que nos quedamos con la suma lo único que estoy haciendo ahora es pasarla junto con el signo menos recordemos que la derivada de una suma es la suma de las derivadas entonces podemos meter inmediatamente nuestro problema de derivar a la parte de adentro y simplemente dejar la suma que fuera entonces la primera parte se ve idéntica que antes esto es una constante derivada del logaritmo eso no entre acá para poder calcular esta parcial entonces tenemos que recordar como estaba escrita y lo mismo va a ocurrir de este lado va a salir del signo menos por lo que teníamos acá adentro y tenemos entonces $1 - \frac{1}{1 + e^{-x}}$ entre acá por la parcial de estar acá es lo que estamos sustituyendo acá ya hicimos todas las cuentas todo lo que se cancela entonces no es necesario volverlo a hacer simple y sencillamente llegamos a lo que ya teníamos antes era $y = \frac{1}{1 + e^{-x}}$ menos acá todo esto a lo que se le había llamado delta acá y lo que vamos a empezar ahora es a sacar un poquito los detalles estábamos antes derivando con respecto antes de vestido con respecto a j_k y solamente nos había quedado un término aquí en este caso estamos derivando con respecto a y y jota y quien depende de y y jota pues son las a_{jk} es básicamente estos pesos son constantes. Entonces de la primera capa que el error cometido por la última capa lo podíamos ver directamente como la diferencia entre lo que queríamos y lo que logramos calcular esto tiene una característica bastante interesante es exactamente por cada neurona tenemos uno de estos después venía la parcial de j con respecto a cada uno de los pesos observemos que por cada uno de estos errores vamos a tener de hecho tantos componentes de éstas como pesos estaban conectados con la carísima neurona entonces de estos tenemos un montón y lo único que teníamos que hacer era multiplicar este valor único por el valor de activación de la neurona con la cual estaba conectado y bueno aquí el signo menos que venimos cargando por la definición de la función de error y ya está ahora equipo se ve con estas tres neuronas bien en la definición de este delta j donde tenemos un producto de las delta casa que venían capa que está más hacia adelante multiplicados por los pesos correspondientes tenemos una suma sobre todos los elementos en última capa y una vez que hicimos esto viene multiplicar por función prima evaluada en la receta j observemos una vez más que está nada más depende de jota no depende de las casas entonces por eso lo podríamos poner entonces realmente le suma nada más afecta este ya que tenemos entonces este producto este que está aquí.

Resumiendo tenemos:

$$\delta_k^{(L)} = (y_k - a_k^{(L)}) \quad (6.26)$$

$$\delta_j^{(L-1)} = \left(\sum_{k=1}^{S_L} \delta_k^{(L)} \theta_{jk} \right) g'(z_j) \quad (6.27)$$

Y sus respectivas derivadas:

$$\frac{\partial J}{\partial \theta_{jk}^{(L-1)}} = -a_j^{(L-1)} \delta_k^{(L)} \quad (6.28)$$

$$\frac{\partial J}{\partial \theta_{ij}^{(L-2)}} = -a_i^{(L-2)} \delta_j^{(L-1)} \quad (6.29)$$

Otra vez tenemos uno por cada neurona en la capa de en medio entonces aquí tenemos las casas aunque vamos a tener las jotas y tenemos uno por cada una de estas este se suele interpretar también como la contribución el error o el error que cometieron todas las neuronas en la capa de en medio y observen que el error de cada neurona pues realmente tiene una es la suma de como contribuyó al error de todas las neuronas que estaban en la capa siguiente pues tiene mucho sentido no se están participando en todos lados pues su error es la suma de todos los errores a los cuales contribuyó y entonces para calcular el gradiente otra vez nos queda una fórmula bastante sencilla es multiplicar este único error por el valor de activación de la neurona con la cual estaba conectada en la capa anterior y de esta manera podemos obtener todas las parciales con respecto a los pesos que estaban conectados con estas neuronas y aquí tenemos todos esos y este que quedaría la parte de hacer el cálculo directamente el siguiente problema que vamos a tener es bueno si podríamos implementar perfectamente ya con un algoritmo de descenso por el gradiente con estas fórmulas que tenemos aquí. Simplemente tendremos un montón de ciclos for para estar calculando todas estas sumas y multiplicaciones sin embargo la forma en la que se acostumbra a trabajar ahora con las redes neuronales no es directamente calculando esto componente por componente sino que lo vamos a utilizar con notación matricial esto va a tener varias ventajas por un lado la notación va a ser muchísimo más compacta y por otro lado va a permitir en la implementación de los algoritmos con procesadores con gpu de manera que estas operaciones se están realizando en paralelo y entonces trabajamos muchísimo más rápido con las redes neuronales y realmente el estar utilizando notación matricial va a tener un impacto directo sobre el tiempo que tardan en ejecutarse nuestros algoritmos.

Vectorización

La red hasta este momento solo había sido representada mediante nodos, ahora vamos a hacer el uso de una notación en particular la cual consta de matrices y vectores. Para generalizar nuestras fórmulas en la derivación matemática.

Consideremos todos los datos involucrados durante el entrenamiento:

6. Entrenamiento por retropropagación

1. Hay S_L neuronas de salida, para las cuales se calculará el error.
2. Se puede calcular el promedio del gradiente para m ejemplares simultáneamente.
3. Si escribimos los datos en forma matricial, es posible paralelizar estos cálculos utilizando operaciones de matrices.

Denotemos nuevamente nuestra función de error:

$$J(\Theta) = -\frac{1}{m} \left[\sum_{i=1}^m \sum_{k=1}^{S_L} y_k^i \log(h_\Theta(x^i))_k + (1 - y_k^i) \log(1 - h_\Theta(x^i))_k \right] \quad (6.30)$$

Ahora con nuestros datos en forma matricial:

$$X = \begin{pmatrix} x_0^{(1)} & \cdots & x_n^{(1)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_0^{(m)} & \cdots & x_n^{(m)} \end{pmatrix} \quad (6.31)$$

$$Y = \begin{pmatrix} y_0^{(1)} & \cdots & y_{S_L}^{(1)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ y_0^{(m)} & \cdots & y_{S_L}^{(m)} \end{pmatrix} \quad (6.32)$$

$$\Theta^{(l)} = \begin{pmatrix} \Theta_{01} & \cdots & \Theta_{0s_l} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Theta_{(s_{(l-1)}+1)} & \cdots & \Theta_{(s_{(l-1)}+s_l)} \end{pmatrix} \quad (6.33)$$

Podemos reescribir:

$$\delta_k^{(L)} = (y_k - a_k^{(L)}) \quad (6.34)$$

$$\delta_k^{(L)} = (y_k - a_k^{(L)}) \quad \Delta^{(L)} = Y - A^{(L)}$$

$$\frac{\partial J}{\partial \theta_{jk}^{L-1}} = -\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m a_j^{(L-1)(i)} \delta_k^{(L)(i)} \quad \nabla^{(L-1)} = -\frac{1}{m} (A^{(L-1)})^T \Delta^L$$

$$\delta_j^{(L-1)} = \left(\sum_{k=1}^{S_L} \delta_k^{(L)} \theta_{jk} \right) g'(z_j) \quad \Delta^{(L-1)} = \Delta^{(L)} \left(\Theta_{[1, :]}^{(L-1)} \right)^T \circ g'(Z^{(L-1)})$$

$$\frac{\partial J}{\partial \theta_{jk}^{L-2}} = -a_i^{(L-2)} \delta_j^{(L-i)} \quad \nabla^{(L-2)} = -\frac{1}{m} (A^{(L-2)})^T \Delta^{L-1}$$

Vectorización 3

Las fórmulas vectorizadas se pueden escribir en forma general con: *Error cometido por la última capa L.*

$$\Delta^{(L)} = Y - A^{(L)} \quad (6.35)$$

Error cometido por cualquier capa l-1.

$$\Delta^{(L-1)} = \Delta^{(L)} \left(\Theta_{[1, :]}^{(L-1)} \right)^T \circ g'(Z^{(L-1)}) \quad (6.36)$$

$$g'(Z^{(l-1)}) = A^{(l-1)} \circ (1 - A^{(l-1)}) \quad (6.37)$$

Componentes del gradiente con respecto a los pesos en Θ^{l-1} .

$$\nabla^{(L-1)} = -\frac{1}{m} (A^{(L-1)})^T \Delta^L \quad (6.38)$$

Nuestra formula de error, es un promedio de la suma de errores que se tuvo en cada ejemplar (i) del total de ejemplares m. Para poder empezar a trabajar con matrices vamos a empezar a ver cómo están escritos nuestros datos todo recordemos como habíamos dicho que íbamos a escribir nuestras entradas de entrenamiento la idea es que cada ejemplar es un renglón tenemos n características, está pensando en que estamos agregando aquí los sesgos y después lo que ocurre con nuestras etiquetas de clasificación recordemos que en redes neuronales utilizamos el one hot en coding. Entonces aunque si tenemos cinco clases tenemos cinco neuronas de salida y eso quiere decir que nuestra etiqueta tiene algo así este sería una etiqueta en la que la clase correcta es la que está en la tercera neurona otro ejemplar podría ser de esta manera y pues aunque solamente haya uno que sea distinto de cero la forma en la que van a venir empaquetadas nuestras respuestas correctas va a ser precisamente en forma de matriz donde tenemos sobre los renglones tantos bits como neuronas haya en la última capa y tenemos hacia abajo los m ejemplares de entrenamiento después recordemos cómo teníamos escritas las matrices de pesos teníamos por cada columna los pesos que contribuyen a la a una neurona en la siguiente capa entonces sobre cada renglón tendríamos a tener tantos pesos como neuronas haya en la capa cl y hacia abajo vamos a tener tantos pesos como neuronas había en la capa sl-1 y que contribuyeron al siguiente elemento en ese l. Así que tendríamos a las diferentes neuronas que van a estar en nuestra nueva capa eso es lo que va a hacer es que cuando multipliquemos x y z nos queden otra vez los valores de cada en la siguiente capa con los renglones correspondientes a los ejemplares de entrenamiento y horizontalmente

6. Entrenamiento por retropropagación

los valores de activación de cada neurona en la siguiente bien entonces partes importantes ejemplares de entrenamiento hacia abajo para estos dos aquí el décima capa hacia acá está para I menos uno ahora están copiadas acá del lado izquierdo las fórmulas tal y como las obtuvimos ejemplar por ejemplar y lo que vamos a hacer ahora es escribirlas en forma matricial bueno que ya me adelanté ya se las escribí entonces va a ser más fácil. Lo que estamos viendo aquí para eso voy a utilizar ahora otro programa y aquí está vamos a utilizar aquí para que pueda dibujar qué es lo que está primero que teníamos en delta está en la capa no en la capa I bueno voy a dibujar aquí ahorita una pequeña red neuronal en este conector y entonces nos estamos preguntando por qué pasa con él aquí está él bueno lo que decíamos era que vamos a tener una de estas del estás por cada uno de nuestras neuronas de salida y lo que vamos a ver es qué tenemos los ejemplares hacia abajo y las neuronas horizontales los valores que tengo aquí verticalmente los acosté y es lo que tengo acá ya vimos también entonces que la llega realmente tiene varios bits horizontalmente y la sas también entonces si yo restó enrique menos acá observen que esto en realidad es un vector tengo una componente por cada neurona de salida entonces aunque aquí les saquemos componente por componente pues tengo uno de cada uno. El hacer las combinaciones de todos contra todos es cuando obtengo el efecto que ocurrió con cada peso pero quiero sumar estos productos para todos los ejemplares de entrenamiento y sumarlos bueno eso es prácticamente lo que hace una multiplicación de matrices ahora para poder hacer todo esto en un solo paso lo que tenemos que hacer es acomodar las acorde mente nos vamos a hacer lo siguiente ya habíamos dicho que esta delta que realmente tiene forma de matriz como ésta de tal manera que mira aquí hacia acá tenemos todos los es el es y así aquí abajo tenemos todos nuestros ejemplares de entrenamiento bueno y que sabemos de la aj y también son los valores de activación y queremos combinar cada j de cada ejemplar de entrenamiento con su respectiva que del mismo ejemplar de entrenamiento y después multiplicarlos y sumarlos bien entonces vamos a acomodar a la sas de la siguiente manera y vamos a poner hacia acá a los ejemplares de entrenamiento y así acá a los elementos son ordenadas iba a suceder si yo hago esto observen que se multiplican ejemplares de entrenamiento contra ejemplares de entrenamiento misma aj contra mismos del tak as pero de diferentes ejemplares de entrenamiento cada uno con su respectivo y además se suman para definir la coordenada que va a quedar aquí cuando yo tomé este contra la siguiente columna entonces otra vez vamos a estar multiplicando en ejemplares contra mi ejemplares los vamos a sumar y nos va a dar el dato que tengamos aquí los conservamos las columnas que teníamos acá si cuando empiece a hacerlo con los renglones voy a tener entonces lo que ocurre con las s menos el c Im no son tan clones que teníamos acá y esto es sumamente interesante porque esto que está aquí debería de resultarnos un poco conocido si sl - solo vamos a ver que teníamos acá sl sl - 1 tiene exactamente la misma forma en la matriz de pesos y no es coincidencia recordemos que es lo que estamos tratando de calcular estamos tratando de calcular el gradiente el ingrediente es la parcial con respecto a cada uno de los pesos entonces lo que acabamos de obtener es ese gradiente que tiene acomodadas cada una de las parciales en la posición que corresponde al mismo peso pero en la matriz de pesos bastante bonito muy bien entonces por eso cuando ponemos la matriz a él pero transpuesta para que tengamos ahora si los ejemplares de entrenamiento de forma

horizontal.

Entonces podemos obtener en una multiplicación de matriz todos los componentes del gradiente para los pesos en esa capa lo que ocurre con las siguientes bueno de hecho con los siguientes gradientes es que se van a hacer exactamente igual lo único que nos queda ligeramente entretenido es cómo vamos a calcular los errores de las capas intermedias hay entonces que observar lo siguiente en primer lugar las ventas van a tener la misma forma que éste es que primas entonces simple y sencillamente van a ser dos matrices donde se tienen que multiplicar componentes a componentes las vamos a poner con este símbolo que significa circo digo se llama cirque y significa multiplicación componente a componente entre estas dos matrices ahora como vamos a escribir ésta se parece a lo anterior pero ahora sobre lo que queremos es sumar es sobre las neuronas de salida recordemos que la contribución al error de una neurona de la capa intermedia pues es la suma sobre los errores a los que contribuyó en todas las neuronas en la capa siguiente entonces del ejercicio anterior ya debemos de ver como pista en que si queremos hacer una suma sobre estos elementos pues como que esto es lo que vamos a tener que tener en la parte horizontal de la primera matriz y vertical de la segunda entonces de aquí empiezan a salir precisamente los tips de cómo escribir estas 2 estás deltas pues ya tienen automáticamente de manera horizontal lo que está ocurriendo con cada una de las neuronas entonces se quedan exactamente iguales y lo que estaba ocurriendo con los pesos es que entonces vamos a crear los componentes de ese I sobre los renglones los necesitamos tomar la transpuesta para que cumpla con esa condición y en principio y básicamente ya quedaría que ese entonces está en notación extraña que tenemos en la parte de abajo recordemos que si estamos utilizando sesgos si estamos utilizando sesgos tenemos una neurona en esta capa que no está conectada en nadie con nadie en la parte de atrás entonces no existen pesos que hayan hecho que las neuronas de acá contribuyan al error de esta ésta no tenía error es un sesgo entonces aquí no hay nada que calcular por eso lo que tenemos que hacer en la parte de aquí es quitar a los elementos que corresponderían a las así pues el hecho de que los riesgos no están conectados con la capa anterior es básicamente lo que nos está diciendo es que quitemos de la matriz de pesos a todas las conexiones que parten de esta neurona porque estas conexiones pues no bueno ésta no va a estar contribuyendo cada día más bien las que estén en esta capa no están contribuyendo al error de esta neurona entonces lo que ocurría con esta neurona. Finalmente para los componentes del gradiente lo único que vamos a hacer era multiplicar los valores de activación de la capa anterior por los errores de la capa siguiente y eso nos iba a dar ahora sí la participación del gradiente para cada uno de los pesos y esto lo podemos repetir obteniendo uno de una matriz de estos por cada matriz de pesos que hayamos utilizado los con esta técnica básicamente obtenemos el gradiente de pequeños bloques hitos de material de matrices una matriz por cada matriz de pesos si quieren escribir el gradiente entonces como se escribe usualmente en cálculo es como un solo vector pues lo que hay que hacer es aplanar todas esas pequeñas matrices y poner cada una de las componentes en una componente del vector y nos va a quedar un vector gigantesco que tiene tantas tantas componentes como la suma de componentes en todas estas matrices bien y con eso quedaría todo. Lo que se acaba de calcular es el

6. Entrenamiento por retropropagación

gradiente y cuando nosotros hallamos descenso por el gradiente, lo que necesitamos es la dirección inversa, por eso el signo negativo. Entonces finalmente podemos decir en lo qué consiste el algoritmo de propagación hacia atrás, lo único que estamos haciendo es obtener los ejemplares de entrenamiento las respuestas correctas necesitamos saber cuántas que pasan vamos a inicializar nuestras matrices de errores con ceros bueno podremos hacer lo mismo también con las del gradiente empezamos en la haciendo feedforward que es lo que nos indican estas primeras líneas asignando nuestros datos de entrenamiento a la primera capa la capa de chocolate a partir de ahí utilizamos feedforward para ir calculando todos los valores de activación de las siguientes capas hasta llegar a la última y a partir de ese momento podemos empezar a trabajar ahora sí con el entrenamiento de la red. Tomar en cuenta que era lo que queríamos para sustituir en los cálculos de los errores y los gradientes con las fórmulas que tenemos en la parte de atrás y nos importó precisamente las etiquetas y ya que tenemos. Entonces podemos actualizar, ahora si nuestros pesos en paralelo tienen que actualizarse todos al mismo tiempo no para actualizar primero unos y después otros porque eso ya no es el gradiente en paralelo, tenemos que actualizar tomando los pesos que ya teníamos menos alfa por el gradiente de la función de error, repitiendo esto el suficiente número de veces. La idea es que eventualmente estos pesos nos permitan encontrar un mínimo de la función de error.

Así el algoritmo queda de la siguiente forma:

Algoritmo 1 Propagación hacia atrás.

```
1:  $X \leftarrow$  ejemplos de entrenamiento.  
2:  $Y \leftarrow$  respuestas correctas.  
3:  $L \leftarrow$  número de capas.  
4: Sean las matrices  $\Delta_{s_{l+1} \times s_l}^{(l)} \leftarrow 0$  con  $l \in [1, L - 1]$ .  
5:  $A^{(1)} \leftarrow X$   
6: for all  $l \in [2, L]$  do  
7:    $A^{(l)} \leftarrow$  sigmoide( $A^{(l-1)}\Theta^{(l-1)}$ ) (propagación hacia adelante).  
8: end for  
9: for all  $l \in [L - 1, 1]$  do  
10:   Calcular  $\Delta^{(l)}$   
11:   Calcular  $\nabla^{(l)}$   
12: end for  
13: for all  $l \in L - 1$  do  
14:    $\Theta^{(l)} \leftarrow \Theta^{(l)} - \alpha \nabla^{(l)}$                                 ▷ Descenso por el gradiente  
15: end for
```

Figura 6.5 Algoritmo de retropropagación.

7 | Optimización del entrenamiento

Problemas en redes profundas

Hasta este momento ya se ha visto como modelar desde una neurona hasta una red neuronal propiamente, se ha visto como hacer la configuración de tal manera que nos clasifique ejemplares, así como detectar el error en los pesos asignados y ajustarlo para mejores resultados. Ahora al momento de modelar redes neuronales profundas (en inglés deep neuronal networks, *DNN*) tenemos que aceptar que el cálculo de estas asignaciones y ajustes requieren tiempo de cálculo, así llegando al *primer problema, el tiempo de computación*. Y ademas nos podemos encontrar con *el problema del sobreaprendizaje* este aparece cuando tenemos demasiadas hipótesis válidas pero no de suficientes datos para poder descartar todas menos la correcta.

Cuando ajustamos los parámetros de una red neuronal a los datos del conjunto de entrenamiento, no podemos diferenciar las características realmente útiles de las irrelevantes o de las debidas al muestreo del conjunto de entrenamiento, por lo que siempre estamos expuestos al riesgo de sobreajuste (*overfitting* en inglés).

Métodos de regularización o la disminución de pesos o la dispersión, se puede aplicar durante el entrenamiento para combatir el sobreajuste. Alternativamente, la regularización de dropout, omite aleatoriamente neuronas de las capas ocultas durante el entrenamiento. . Finalmente, los datos se pueden aumentar a través de métodos como el recorte y la rotación, de modo que los conjuntos de entrenamiento más pequeños se pueden aumentar de tamaño para reducir las posibilidades de sobreajuste.

Las DNN deben considerar muchos parámetros de entrenamiento, como el tamaño (número de capas y número de unidades por capa), la tasa de aprendizaje y los pesos iniciales. El barrido a través del espacio de parámetros para obtener parámetros óptimos puede no ser factible debido al costo en tiempo y recursos computacionales. Varios trucos, como el procesamiento por lotes (calcular el gradiente en varios ejemplos de entrenamiento a la vez en lugar de ejemplos individuales) aceleran el cálculo, lo veremos más adelante. Las grandes capacidades de procesamiento de las arquitecturas de muchos núcleos (como GPU) han producido aceleraciones significativas en el entrenamiento.

Para mayor información del tema se sugiere leer el siguiente enlace:

7. Optimización del entrenamiento

CHAPTER 5 Why are deep neural networks hard to train? <http://neuralnetworksanddeeplearning.com/chap5.html>

El siguiente enlace les puede ayudar a ver como cada hiperparametro puede afectar a los resultados de la red neuronal. <https://quetzalcoatl.ciencias.unam.mx/moodle/mod/url/view.php?id=634&redirect=1>

Para ayudarnos a los calculos con el gradiente vea los siguientes enlaces:

- <https://youtu.be/nUUqwaxLnWs>
- <https://youtu.be/FDCfw-YqWTE>

Gradiente desvaneciente (o que explota)

El gradiente desvaneceiente o que explota en inglés *Gradient descent* es un método general de minimización para cualquier función f . En redes neuronales el gradiente es un cálculo que nos permite saber cómo ajustar los parámetros de la red de tal forma que se minimice su desviación a la salida. Entonces retomando lo que hacemos en el entrenamiento una vez calculadas las salidas de las neuronas es calcular los deltas asociados a las diferentes neuronas de la red, para lo que recorremos la red hacia atrás(desde la capa de salida hasta la capa de entrada):

Con las ecuaciones que ya vimos anteriormente (insertar ecuaciones).

Una vez realizada la propagación hacia atrás de los errores, actualizamos los pesos de la red utilizando la expresión asociada al gradiente.

(insertar ecuaciones :P).

En el ajuste de un peso asociado a la entrada x_i de una neurona, intervienen tres factores:

- el valor de la entrada x_i
- la derivada de su función de activación dada su entrada neta
- una señal de error que depende de la capa en la que nos encontramos y que proviene de las siguientes capas de la red.

En el algoritmo de propagación de errores, partimos de una señal de error observada en la capa de salida de la red y vamos propagando esa señal de error hacia atrás por toda la red. Pudimos notar que el gradiente del error de una neurona oculta se podía calcular combinando los gradientes del error para las neuronas de la siguiente capa de la red.

Si el nivel de activación de una neurona es bajo, los pesos asociados a las sinapsis que reciben como entrada la salida de la neurona se ajustarán lentamente. La presencia de pesos elevados en los caminos desde la neurona oculta hasta la salida indicarán una contribución elevada al gradiente del error. En el momento en el que una neurona (sigmoide) se satura, los gradientes del error serán muy bajos y la neurona oculta dejará de aprender, ya que los ajustes que realizamos sobre sus pesos son proporcionales a la derivada de su función de activación. En el mejor de los casos, aprenderá muy lentamente.

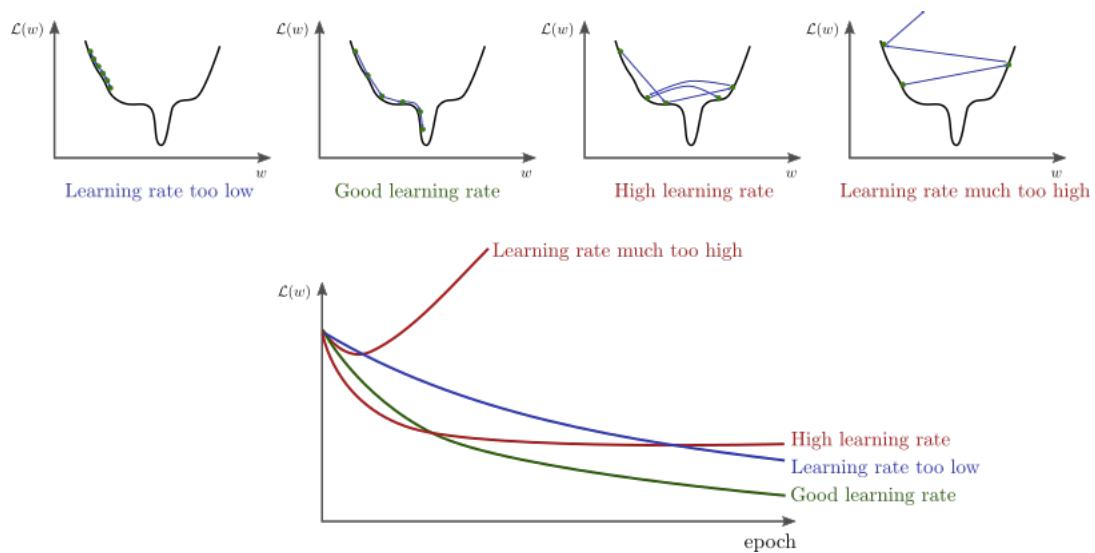


Figura 7.1 Rehacerla bien. por copyright..

Lo más habitual es que las capas más alejadas de la salida de la red aprendan más lentamente que las capas más cercanas a la salida. Dado que los niveles de activación de las neuronas están acotados y los resultantes a menudo son menores que 1. En casos extremos, el gradiente será prácticamente nulo, por lo que la red será incapaz de aprender. Dandonos el problema conocido como gradiente desvaneciente en inglés *vanishing gradient*.

También puede darse el caso opuesto. Si los pesos de la red aumentan en exceso durante el entrenamiento de la red (p.ej. si utilizamos una tasa de aprendizaje demasiado elevada que hace que el gradiente descendente sea inestable y diverja), los factores involucrados en el cálculo del gradiente tomarán valores mucho mayores que 1. En este caso, el problema es el contrario al gradiente devanesciente y tendríamos la explosión del gradiente *exploding gradient*.

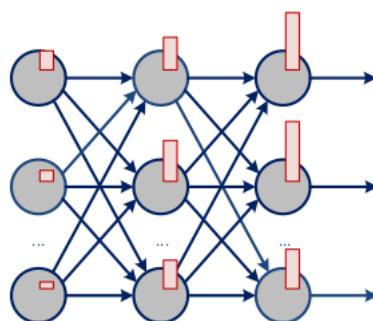
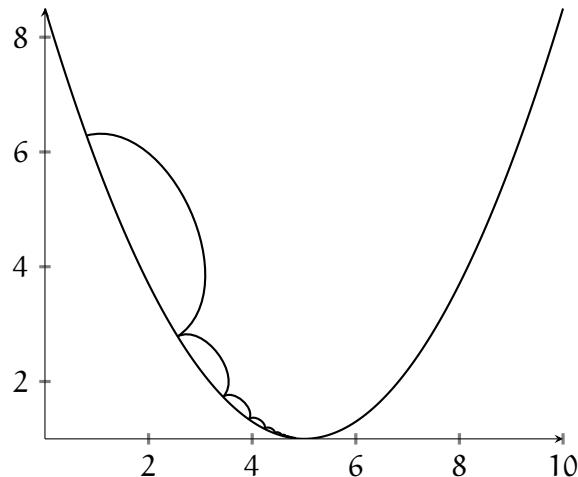


Figura 7.2 La magnitud del gradiente varía de una capa a otra durante el entrenamiento de una red neuronal multicapa

En resumen, el aprendizaje basado en gradiente descendente usando retroporpagación puede no funcionar demasiado bien cuando el nivel de activación de una neurona j es bajo (lo que afecta al ajuste de los pesos de las neuronas que reciben como entrada la salida de la neurona j), las neuronas sigmoidales se estancan (por lo que las derivadas de sus funciones de activación serán bajas, lo cual afecta al entrenamiento de sus pesos y, potencialmente, al de las neuronas que las preceden en la red) o la profundidad de nuestra red hace que se vea afectada por problemas como desvanecimiento o explosión del gradiente.

Estilos de entrenamiento

Las varias formas de entrenar una red se dividen en la frecuencia de la actualización de pesos, y el ajuste de sus parámetros, para ello tenemos tres formas:

El entrenamiento en linea en inglés *batch learning* tiene esencialmente el siguiente algoritmo 7.3. Este se caracteriza en que la red es entrenada *ejemplar por ejemplar*,

los pesos son actualizados con cada ejemplar (más frecuencia), haciendo que durante el entrenamiento el gradiente se mueva a direcciones diferentes, por tanto es más propenso a que se llegue a dar un gradiente desvaneciente o una explosión de este. El algoritmo se da a continuación en la fig??.

Algoritmo 1 Entrenamiento en línea.

```

1: for each  $x_i$  in  $X$  do
2:    $h_i \leftarrow \text{PROPAGACIÓN HACIA ADELANTE}(x_i)$ 
3:    $\nabla_{\Theta} J \leftarrow \text{PROPAGACIÓN HACIA ATRÁS}(h_i, y_i)$ 
4:    $\Theta \leftarrow \text{OPTIMIZA}(\Theta, \nabla_{\Theta} J)$ 
5: end for
```

Figura 7.3 Algoritmo en linea.

El entremiento en lotes en inglés *online learning* es cuando se ajustan los pesos de la red tras haber evaluado el gradiente sobre *todos los ejemplares* del entrenamiento. El cálculo del gradiente es más preciso puesto que se toman varios ejemplares en cuenta. Pero esto nos cuesta en el cómputo de la actualización de los parámetros. No es recomendable este entremiento cuando la red aún está lejos de los valores deseados. El algoritmo se da a continuación en la fig??.

Algoritmo 2 Entrenamiento en

```

1:  $H \leftarrow \text{PROPAGACIÓN HACIA ADELANTE}(X)$ 
2:  $\nabla_{\Theta} J \leftarrow \text{PROPAGACIÓN HACIA ATRÁS}(H, Y)$ 
3:  $\text{OPTIMIZA}(\Theta, \nabla_{\Theta} J)$ 
```

Figura 7.4 Algoritmo en lotes.

El entremiento en mini lotes en este se divide el conjunto completo de entrenamiento X en bloques más pequeños X_k y se entrena para cada uno de ellos. Este entremiento busca un equilibrio entre el entrenamiento en linea y el entrenamiento por lotes, dado que no siempre vamos a tener la tasa ideal de aprendizaje para que el gradiente sea preciso, pero tampoco la capacidad de cómputo para entrenar por lotes.

Algoritmo 3 Entrenamiento en minilotes.

```

1: for each  $X_k$  in  $X$  do
2:    $H_k \leftarrow \text{PROPAGACIÓN HACIA ADELANTE}(X_k)$ 
3:    $\nabla_{\Theta} J \leftarrow \text{PROPAGACIÓN HACIA ATRÁS}(H_k, Y_k)$ 
4:    $\Theta \leftarrow \text{OPTIMIZA}(\Theta, \nabla_{\Theta} J)$ 
5: end for
```

Figura 7.5 Algoritmo en minilotes.

Ahora veamos los pros y contra de cada entrenamiento en el entrenamiento por lotes sólo se realiza una actualización de los pesos en cada época de entrenamiento. Para que el cálculo del gradiente del error sea fiable, se necesitará un conjunto de entrenamiento

grande. El coste computacional del cálculo del gradiente será proporcional al tamaño del conjunto de entrenamiento. Si nuestro conjunto incluye millones de ejemplos, como suele ser habitual en big data, el coste de una iteración del algoritmo puede resultar muy costoso. Dado que, se necesitarán múltiples iteraciones para conseguir que el algoritmo converja, el coste computacional del entrenamiento de la red puede ser demasiado elevado.

Así talvez no nos convenga hacer el cálculo para todos los ejemplares, entonces si tomamos una pequeña cantidad de los ejemplares tendríamos una estimación aproximada del gradiente para guiarnos. Cada vez que queramos darle un ajuste a los parámetros de nuestra red.

Ahora en el entrenamiento en linea, la estimación del gradiente, dependerá del ejemplo concreto que se escoga en cada momento, por lo que nos moveremos haciendo zigzag sobre la superficie de error. En problemas de clasificación, conviene evitar mostrarle a la red todos los ejemplos de una clase antes de pasar a los de la clase siguiente. Se recomienda mezclar bien los ejemplares para evitar cambios brusco en el cálculo del error.

El aprendizaje online y el aprendizaje con minibatches son dos formas diferentes del gradiente descendente estocástico. El uso de minibatches suele funcionar mejor que el aprendizaje online pero si no disponemos de hardware paralelo, el aprendizaje online suele ser más rápido. Si usamos aprendizaje online, es decir $k = 1$, el uso de un único ejemplo de entrenamiento introducirá errores significativos en nuestra estimación del gradiente. En realidad, no necesitamos una estimación demasiado precisa, sólo una que nos permita movernos en una dirección adecuada, que nos facilite ir reduciendo el error de la red.

Normalización y normalización por lotes

Un factor importante a tomar en cuenta para un buen desempeño del entrenamiento son las magnitudes del datos de entrada a la red. Entonces para mejorar el desempeño del algoritmo de optimización nos conviene pre-procesar los datos de entrada. Esto mediante una técnica que se llama normalización (*normalization* en inglés).

La técnica que hemos utilizado son técnicas de optimización basadas en el gradiente, la cual a una función de error se calcula el gradiente, este nos da la dirección del máximo descenso, para hacer aproximaciones discretas en los parámetros hasta que tratemos de llegar al mínimo de la función.

Para poder realizar lo anterior necesitamos que las magnitudes de los datos de entrada no estén muy dispersas, es decir que no nos encontraremos con situaciones donde estemos manejando decimales para unos datos y para otros unidades de millones. En estos casos la función de error nunca va a terminar de ajustarse correctamente a estos datos, pues en ocasiones los parámetros para ajustar, van a avanzar de forma distorsionada. Dando la impresión que para unos datos el gradiente avanza muy rápido al centro, mientras que

para otros datos avanza muy lento, esto porque vamos a tener curvas de nivel demasiado elípticas (ver la Figura 7.6), entonces al tomar la dirección que nos da el gradiente, nos va a mover desplazar muy violentamente en algunas y muy lento para otras. Cuando se intente hacer descenso por el gradiente en estas regiones lo que va a pasar es que el vector va a oscilar muy violentamente y nos va a dificultar mucho llegar al mínimo.

Por el contrario, si las magnitudes con las que trabajamos son del mismo orden y contribuyen numéricamente de una manera más proporcionada al error, entonces vamos a tener curvas de nivel más circulares (ver la Figura 7.6). Cuando calculemos el gradiente, la perpendicular se aproximará durante más tiempo a la dirección de máximo descenso.

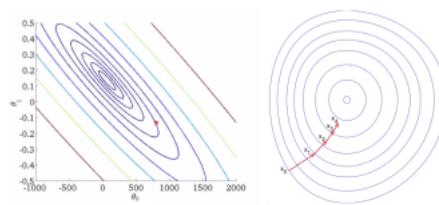


Figura 7.6 Izq: J la función de error con alta excentricidad. Der: J con curvas de nivel tendiendo a círculos

Entonces para asegurar un buen desenso por el grandiente, vamos a preferir siempre trabajar con curvas de nivel circulares, para esto vamos a usar la normalización.

La normalización conciste en centrar los datos aproximadamente en el intervalo $[-1.0, 1.0]$, este intervalo no es estricto para todas las redes basta con definir las magnitudes en un intervalo aceptable para tener curvas de nivel circulares.

Existen varias fórmulas para realizar la normalización, se sugiere la siguiente forma:

- Calcular *la media* μ_i y *varianza* σ_i^2 para cada característica i en los datos del conjunto de entrenamiento X .

- Las formulas son las siguientes, con X_i la columna con la i -ésima característica en los datos de entrenamiento X .

$$\mu_i = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m x_i \quad (7.1)$$

$$\sigma_i^2 = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (x_i - \mu)^2 \quad (7.2)$$

$$X_i = \frac{X_i - \mu}{\sigma^2} \quad (7.3)$$

- La media es el promedio de los datos de entrada.

7. Optimización del entrenamiento

- La varianza es una medida de dispersión, para ver que tan separados están los datos unos de otros.
- La reasignación para cada X_i va a ser, la resta $X_i - \mu$, que va a centrar los datos alrededor del cero, y la división por la varianza σ^2 que va a encoger los intervalos de distancia entre los datos.
- Una vez que la red se entrena con datos normalizados, es necesario almacenar las medias y varianzas utilizadas durante el entrenamiento con el conjunto de entrenamiento X.
- Estos valores serán utilizados para normalizar datos nuevos que vayan a ser evaluados en la red. Esto para evitar que los nuevos datos usen magnitudes fuera del intervalo usado durante el entrenamiento de la red.

Definición 7.1

La normalización permite reducir la excentricidad en la función de error provocada por la disparidad entre los datos de entrada.

Entonces ya tenemos resuelta la situación de la disparidad entre los datos de entrada. Ahora tenemos que, al calcular los valores para las capas intermedias, los valores pueden cambiar sus rangos para las neuronas intermedias. Para esta situación tenemos la normalización por lotes (*batch normalization* en inglés).

La normalización por lotes aplica los beneficios de la normalización a las capas intermedias, haciendo que estén dentro de intervalos no muy grandes para las siguientes capas.

Una ventaja que nos da esta herramienta es que los algoritmos de optimización podrán utilizar *tazas de aprendizaje más altas*, porque los brincos discretos del algoritmo no cambiarán drásticamente el comportamiento de la función de error durante un intervalo más largo.

Otra ventaja es que al normalizar entre capas, permite que cada capa calcule características distintas, independientemente que se otorguen ejemplares con mucho sesgo en una característica en especial. Permitiendo una mejor clasificación aún con datos nuevos.

Definición 7.2

La *normalización por lotes* consiste en:

1. Normalizar la salida de la capa de activación anterior restando su media y

dividiendo entre la desviación estándar.

2. Hacer descenso por el gradiente estocástico.
3. Dos parámetros: γ una desviación estandar y β una media para corrimiento.

Cuando se use el descenso por el gradiente estocástico (el descenso por el gradiente por lotes) modificará los pesos para optimizar J la función de error, y probablemente contrarreste el efecto de la normalización. Para evitarlo, se añaden dos parámetros, también entrenables: γ una desviación estándar y β una media para corrimiento, la idea es que el algoritmo tienda a modificarlos, γ para escalarlos y β para sesgar los datos, en lugar de a los pesos, de modo que los pesos produzcan un cómputo más estable.

Entonces la idea concreta es que dado un minilote B con x_i sus ejemplares, las entradas y_i para la capa siguiente se calculan con las siguientes fórmulas:

$$\mu_B = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m x_i \quad (7.4)$$

$$\sigma_B^2 = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (x_i - \mu_B)^2 \quad (7.5)$$

$$x_i = \frac{x_i - \mu_B}{\sqrt{\sigma_B^2 + \epsilon}} \quad (7.6)$$

$$y_i = \gamma x_i + \beta \equiv BN_{\gamma, \beta}(x_i) \quad (7.7)$$

con ϵ una constante agregada para mantener la estabilidad numérica.

Una vez que hayamos hecho la normalización y hecho la reasignación de datos, nos va a dar los nuevos y_i 's que van a entrar para participar en la combinación lineal que decide si se activan o no las neuronas de la siguiente capa. Los valores γ y β nos van a permitir desnormalizar los datos.

Así llegamos a la parte de *inferencia*, una vez entrenada la red con normalización y normalización por lotes. Vamos a querer usar la red para hacer inferencias, para esto vamos a calcular la media y la varianza sobre los *mini lotes de entrenamiento* la diferencia más grande con respecto a lo anterior la vamos a tener en el cálculo de la varianza, porque se utiliza la variante sin sesgos, estos valores se van a estimar con los mini lotes del conjunto de entrenamiento y estos van a quedar como *constantes fijas*. Cuando entren los nuevos valores que estamos tratando de evaluar con nuestra red neuronal, ya no vamos a calcular otra vez las μ y σ para las capas intermedias. Sino que vamos a utilizar:

$$E[x] = E_B[\mu_B] \quad (7.8)$$

$$Var[x] = \frac{m}{m-1} E_B[\sigma_B^2] \quad (7.9)$$

7. Optimización del entrenamiento

Que son los promedios con los mini lotes que entrenamos, entonces los valores modificados de los valores de activación de cada capa van a estar dados por:

$$y = x \frac{\gamma}{\sqrt{\text{Var}[x] + \epsilon}} + \beta \quad (7.10)$$

Donde y toma el valor x de activación con una red neuronal normal después multiplicarlo por el parámetro gamma (que ya tuvo que haber sido aprendido por el algoritmo de entrenamiento) se va a dividir entre esta desviación estándar pero calculada sobre los datos estadísticos el de lo que salió en esas capas intermedias cuando estábamos realizando el entrenamiento.

Entonces en resumen la idea es la siguiente, dada una capa de la red neuronal con sus valores de activación, antes de pasar a la siguiente capa tenemos que pasar por un proceso por un proceso, *la normalización* para ese proceso necesitábamos la media y la varianza. Sin embargo mientras estábamos entrenando esta media y esta varianza podían ser alterados porque estamos modificando los pesos eso modifique los valores que se estaban calculando aquí y por consiguiente estos dos se van a volver a modificar. Una vez que ese proceso ya terminó y ya decidimos que están fijos los pesos ya tenemos los valores de beta y gamma que vamos a utilizar, es cuando se va a proceder a calcular la última versión de las medias y las varianzas, con los datos de entrenamiento.

Cuando tengamos ya estos valores estables porque ya no estamos modificando nada en la red estos los vamos a guardar y se van a convertir en los valores que vamos a utilizar cuando queramos evaluar un dato nuevo sobre la red que ya está entrenada entonces ahora sí cuando llegue a un dato nuevo cada vez que pasemos por alguna de las capas intermedias vamos a tomar esos valores de activación y vamos a aplicar lo equivalente a la fórmula que teníamos antes esta que está aquí nada más que ahora vamos a utilizar estas constantes que se derivan del escalamiento que tuvimos que hacer cuando estábamos entrenando entonces esto que está acá va a ser el valor que va a entrar a la siguiente capa de la red en lugar de haber utilizado el valor de activación como y una vez que hayamos hecho esto entonces nuestra red también va a tener el mismo tipo de normalización para datos que no habían estado en el conjunto de entrenamiento y además pues ésta es normalización es ya no van a estar cambiando porque dependen nada más de los parámetros.

La mayoría de las apis para el desarrollo de redes neuronales ya tienen estos cálculos programados por detrás y nosotros realmente lo único tenemos que hacer es programarla como una capa, que se le conoce como *capa de normal por lotes*.

Regularización

La última técnica a usar en este texto es la técnica de regularización, esta es usada para librarnos de dos problemas al momento de entrenar. Estos problemas son el *sobre ajuste* y el *ajuste pobre*, en inglés *overfitting* y *underfitting* respectivamente.

Recordemos que dado un problema de aprendizaje, se define un espacio de hipótesis, es decir, una familia de posibles funciones que vamos a utilizar para encontrar la función objetivo, que queremos aproximar.

El espacio de hipótesis puede ser tan grande o tan pequeño como la cantidad de funciones que estén contenidas en él. Así tenemos dos situaciones:

- Si el espacio de hipótesis, no contiene a la función objetivo, entonces por más que ejecutemos los algoritmos de entrenamiento, no va a ser posible llegar a una buena aproximación.

Ejemplo 7.1. *Si la función objetivo tiene la forma de una parábola, y únicamente la intentamos aproximar con funciones lineales, es claro que nunca vamos a dar una buena aproximación.*

- Si el espacio de hipótesis, es demasiado gigantesco, podemos llegar a tener problemas encontrando la respuesta correcta.

Las dos situaciones anteriores nos llevan a los dos problemas antes mencionados:

Ajuste pobre Cuando un modelo, no logra reducir suficientemente el error sobre el conjunto de entrenamiento (menos aún sobre el de validación) ver Figura 7.7.

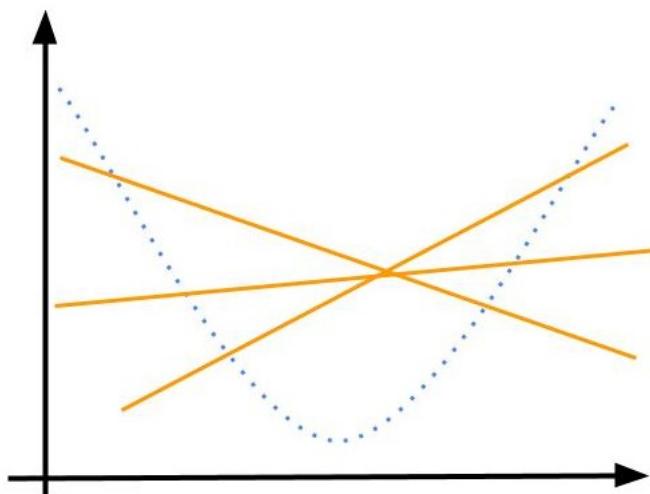


Figura 7.7 Ejemplo de ajuste pobre. La línea punteada es la función objetivo, las líneas naranjas el espacio de hipótesis.

7. Optimización del entrenamiento

Sobre ajuste Cuando un modelo, reduce muy bien el error con el conjunto de entrenamiento, pero con el conjunto de validación el error es muy alto, es decir, la hipótesis no generaliza a datos no vistos previamente, ver Figura 7.8.

Ejemplo 7.2. Los datos del entrenamiento asemejan la función de un polinomio, entonces la red aprende solo a identificar los datos que pasen por la función, al momento de agregar datos nuevos estos probablemente nos se comporten conforme al polinomio y nunca los clasifique adecuadamente.

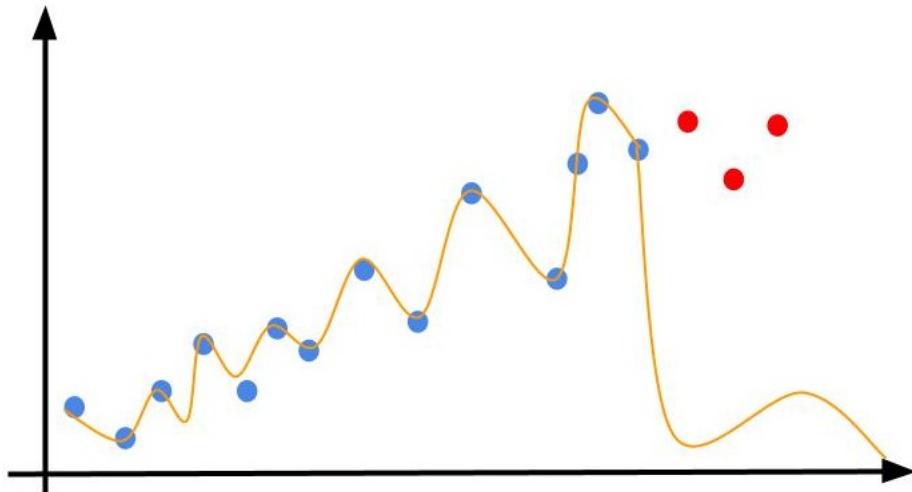


Figura 7.8 Ejemplo de sobre ajuste. La función aproximada de color naranja. Los datos durante el entrenamiento de color azul. Los datos nuevos de color rojo.

Estos dos problemas pueden suceder por dos razones distintas:

1. La cantidad de neuronas, dos casos:
 - **Faltan neuronas:** El espacio de hipótesis es muy simple para poder aproximar la función, es decir, tenemos un *ajuste pobre*.
 - **Sobran neuronas:** El espacio de hipótesis es muy expresivo. No obtiene las características de la función objetivo, sino que memorizó las etiquetas de los datos de entrada, es decir, tenemos un *sobreajuste*.
2. Faltan datos de entrenamiento, entonces independientemente del número de neuronas, el error en los datos de validación no baja, o incluso ni en los datos del entrenamiento.

Cuando nos sobran neuronas lo podemos detectar, porque al reducir neuronas, el desempeño de la red entrenada en el conjunto de entrenamiento, no empeora significativamente, y el desempeño con los datos de validación mejora.

Para automatizar la búsqueda en un espacio de hipótesis lo suficientemente expresiva vamos a usar la regularización.

Lo que vamos a hacer es modificar la función de pérdida, la nueva función va a estar integrada por dos componentes; la función de error (que ya teníamos), y un término de penalización sobre las magnitudes de los pesos de la red. Considerando estas dos anteriores, la función que estamos tratando de minimizar es la suma de esas dos.

El mínimo de esta función hallará un punto de compromiso tal que:

- reduce el error lo más posible
- solo crecen aquellos pesos que contribuyen mejor a reducir el error, compensando por la contribución de su magnitud creciente.

Es decir ahora tenemos una red en la cual colocamos desde el inicio muchas neuronas, lo cual tendería a producir un sobre ajuste. Lo que vamos a hacer es, penalizar los pesos de manera que el algoritmo de optimización haga que solamente aquellas conexiones que realmente están contribuyendo a reducir el error, tengan magnitudes significativas. Aquellas conexiones que no contribuyan entenderán a tener magnitudes muy pequeñas, casi como si no estuvieran ahí. El algoritmo de optimización hará que algunas de las conexiones queden muy débiles y básicamente ya no contribuyan. Entonces la hipótesis que se va a aprender va a ser más sencilla.

Dependiendo de qué tan rigurosos seamos con la penalización podemos hacer que, las únicas conexiones que pueden subir su magnitud en realidad sean muy pocas. También podría darse el problema de ajuste pobre, se tiene que ajustar bien el término de penalización que lo vamos a denotar como λ .

La función de perdida se va actualizar de la siguiente forma:

$$J(\Theta) = \text{Error}(\Theta) + \frac{\lambda}{2m} \sum_{\Theta} \theta^2 \quad (7.11)$$

$$\nabla_{\theta} J^{(l)} = \nabla \text{Error}_{\Theta}^{(l)} + \frac{\lambda}{m} \Theta \quad (7.12)$$

Entonces vamos a tener una gráfica parecida a la siguiente:

7. Optimización del entrenamiento



Figura 7.9 Sobreajuste.

En la ecuación 7.11 que del lado izquierdo tenemos nuestra función de error (podría ser una entropía cruzada, diferencias cuadrado), el segundo término es la penalización, la más común es sumar los todos los cuadrados de las magnitudes, de todos los pesos que tienen la red, este término va a provocar que la función suba de valor, si estamos utilizando pesos con magnitudes grandes.

La manera de minimizar los valores, es dejar subir solamente los valores de aquellos pesos que ayuden a compensar, bajando la penalización. La penalización está regida por el parámetro lambda, entre más grande sea lambda, se observa en la Figura 7.9 que se incrementa el valor de esta función, por culpa de los pesos. Entonces, si la lambda es muy pequeña el término dominante va a ser la función original de error y poca penalización por tanto muy poco efecto, por el hecho de haberle subido la magnitud de los pesos, vamos a obtener un sobreajuste. Esto equivaldría a tener nuestra red neuronal con el montón de neuronas que le pusimos, no hay penalización y podríamos tender precisamente al problema del sobreajuste.

Entonces vamos el lado derecho de la gráfica Figura 7.9. El error en el entrenamiento se está penalizando tanto por los pesos que el algoritmo de optimización, minimizo los pesos y casi no corregio el error, entonces tenemos un ajuste pobre. En ese caso nuestra red no está modelando bien nuestra función, tenemos un error bastante alto y la función de validación también está creciendo.

En la parte de en medio de la gráfica Figura 7.9 es donde de obtiene el equilibrio, entre la cantidad de neuronas adecuadas y la cantidad de pesos significativos, que nos va a minimizar o eliminar el problema de un pobre o un sobre ajuste.

Descarte

Otra estrategia para regularizar es la deserción o descarte de algunas neuronas (*dropout* en inglés). Durante el entrenamiento, una cierta cantidad de salidas de capas ocultas se ignoran *aleatoriamente* (se les da valor final de 0) con probabilidad $1-p$, es decir algunas neuronas de las capas ocultas se activan con un probabilidad p .

En esta técnica no se modifica la función de error, si no se modifica propiamente la red, ver Figura 7.10. En cada época, durante el entrenamiento se puede volver a elegir las neuronas a descartar, o no. La capa alterará su conectividad y buscará caminos alternativos para transmitir la información en la siguiente capa. Como resultado, cada actualización de una capa durante el entrenamiento se realiza con una configuración diferente de la capa. Así se puede simular el entrenamiento de una gran cantidad de redes neuronales con diferentes arquitecturas en paralelo.

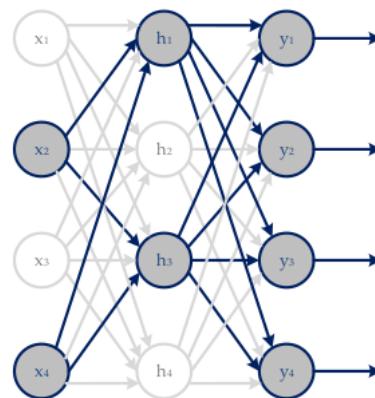


Figura 7.10 Dropout (desarrollado por Geoffrey Hinton y sus estudiantes en la Universidad de Toronto).

Al momento de pasar los datos de prueba, todas las neuronas están activas. Pero se han reducido en p , esto sucede porque después de la eliminación en el entrenamiento, las siguientes capas recibirán valores más bajos. Sin embargo, en la fase de prueba, mantendremos todas las unidades, por lo que los valores serán mucho más altos de lo esperado, es por eso que necesitamos reducirlos, por un factor igual a la tasa de deserción p , para equilibrar el hecho de que hay más unidades activas que en tiempo de entrenamiento. Para información del tema puede leer el capítulo cuatro, sección 4.4.3 Adding dropout, Deep Learning With Python, 2017.

8 | Caso de análisis e interpretación

Red Hinton árbol familiar con numpy (entrenamiento)

En esta sección vamos a ver un ejemplo propuesto por Geoffrey Hinton, en el artículo *Aprendiendo representaciones distribuidas de conceptos*, donde el objetivo es, que una red neuronal aprenda el parentesco entre familiares. Para la creación de esta, se ayuda de lo que conocemos como árboles familiares como el que se ve en la Figura ??.

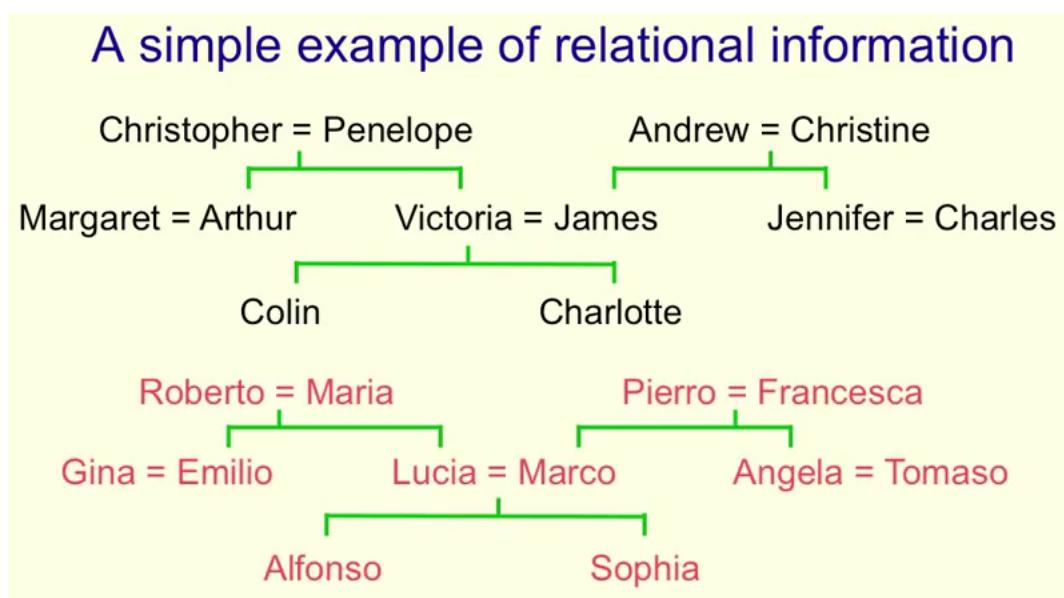


Figura 8.1 Ejemplo de un árbol genealogico de familias nucleares.

En el árbol anterior se pueden apreciar que existen las siguientes 12 relaciones entre personas; hijo, hija, sobrino, sobrina, padre, madre, tío, tía, hermano, hermana, esposo, esposa. Y vamos a tener la siguientes proposiciones para denotarlas se la siguiente forma;

- (colin tiene-padre james)
- (colin tiene-madre victoria)

- (james tiene-esposa victoria)(colin tiene-padre james)
- (colin tiene-madre victoria)
- (james tiene-esposa victoria)

La tarea objetivo: *Que la red siguiente indique la segunda persona de la tercia, dados los valores en las dos primeras posiciones.* Si tenemos los valores [nombre entrada] [tiene-relación] [nombre salida], con los dos primeros datos nos debe dar el tercer dato.

El árbol familiar que se mostro arriba se puede ver como la red mostrada en la Figura 8.2.

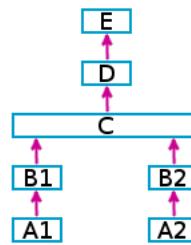


Figura 8.2 Red de relaciones.

El diseño de la red es como se puede ver en la Figura ??:

- Capa uno:
 - ★ 24 neuronas de entrada (una para cada persona).
 - ★ 12 neuronas de entrada (una para cada relación).
- Capa dos:
 - ★ 6 neuronas conectadas con las 24 personas.
 - ★ 6 neuronas conectadas con las 12 relaciones.
- Capa tres:
 - ★ 12 neuronas conectadas a todas las neuronas en la capa 2.
- Capa cuatro:
 - ★ 6 neuronas conectadas a todas las neuronas en la capa 3.
- Capa cinco:
 - ★ 24 neuronas de salida, una para cada persona relacionada con la de entrada.

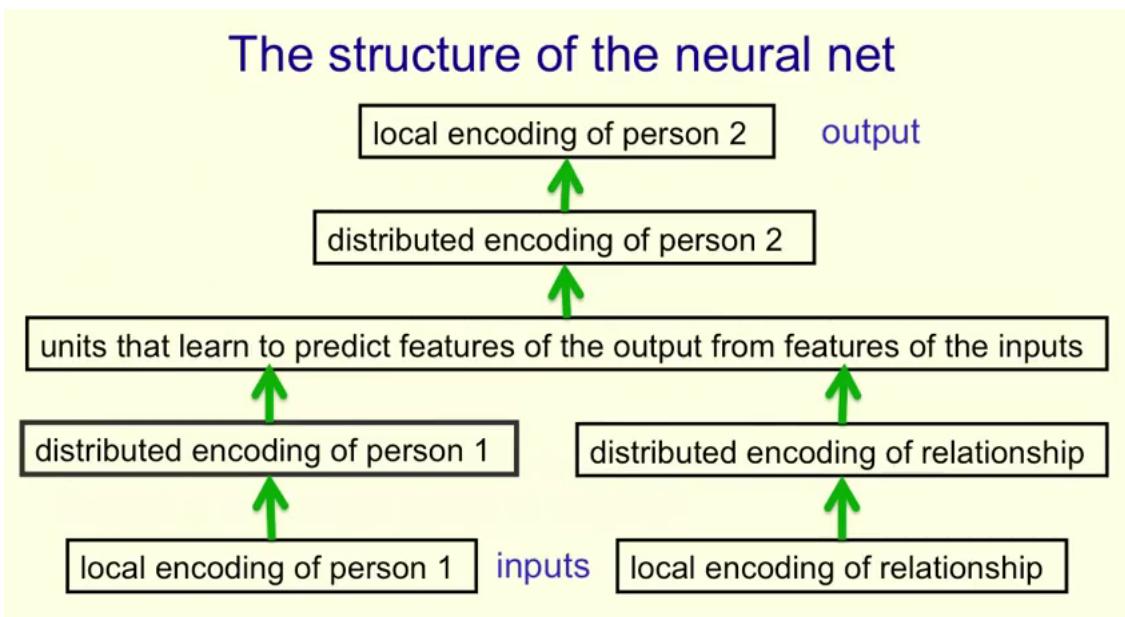


Figura 8.3 Estructura propuesta para la red neuronal de parentesco familiar.

Las datos de entrada son: 112 proposiciones, 100 utilizadas para entrenamiento, con 1500 iteraciones.

Las seis neuronas ocultas en el cuello de botella conectado a la entrada representan las características de las personas que son útiles para predecir la salida, tales como, la rama del árbol genealógico al que pertenece. La capa central aprende cómo las características predicen otras características. Por ejemplo, la persona de entrada es de generación 3 y la relación requiere que la respuesta sea una generación más, entonces implica que la persona de salida es de la generación 2.

Ya con la estructura de la red definida podemos hacer el entrenamiento, primero con la alimentación hacia adelante,

Red Hinton árbol familiar con pytorch

Vacio.

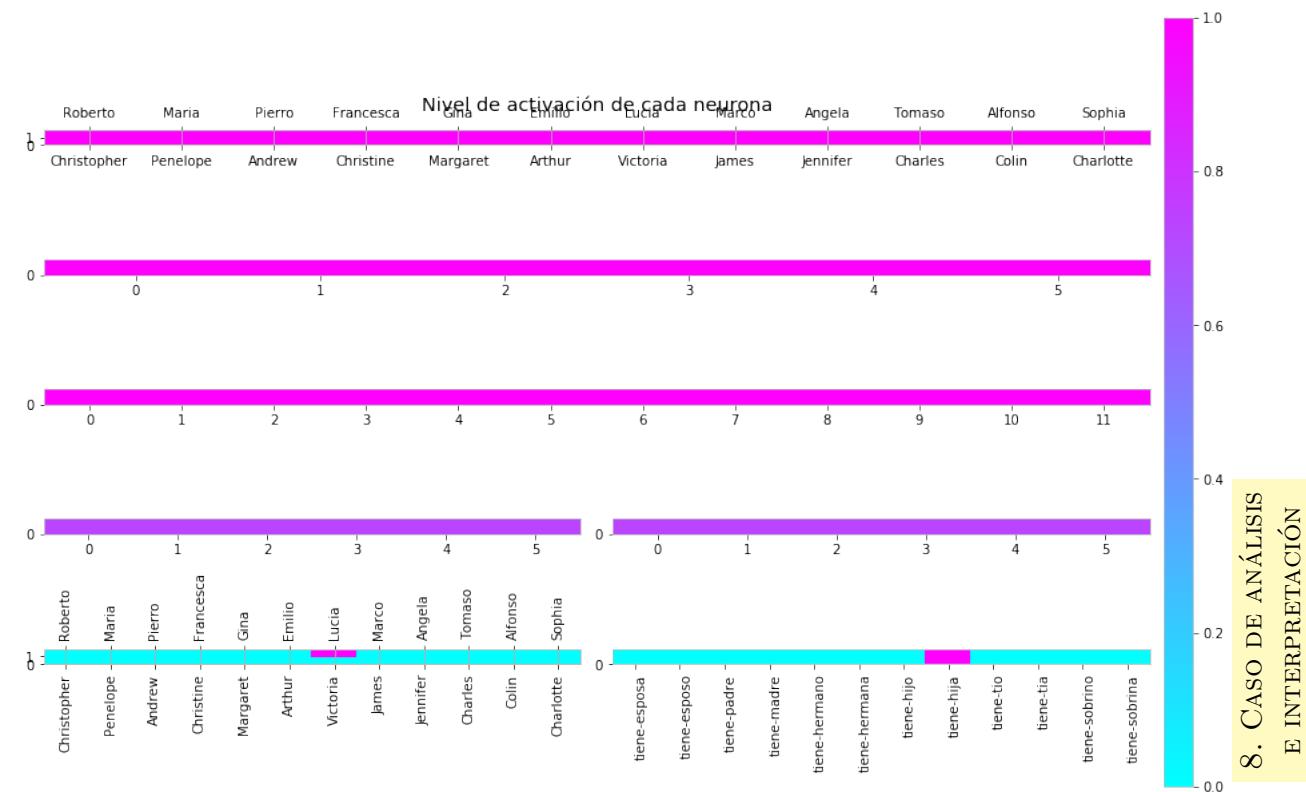


Figura 8.4 Primeras resoluciones.

8. CASO DE ANÁLISIS
E INTERPRETACIÓN

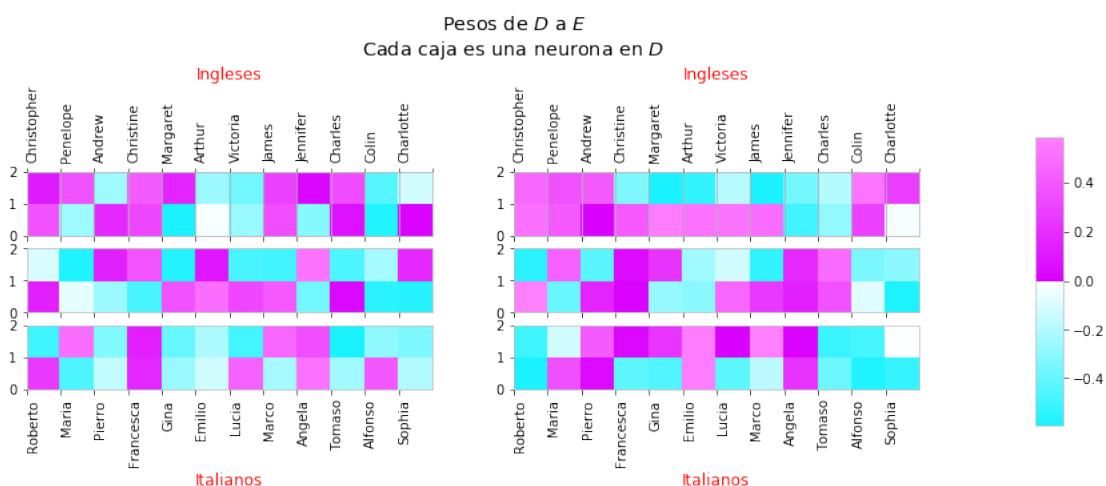


Figura 8.5 Resoluciones.

8. Caso de análisis e interpretación

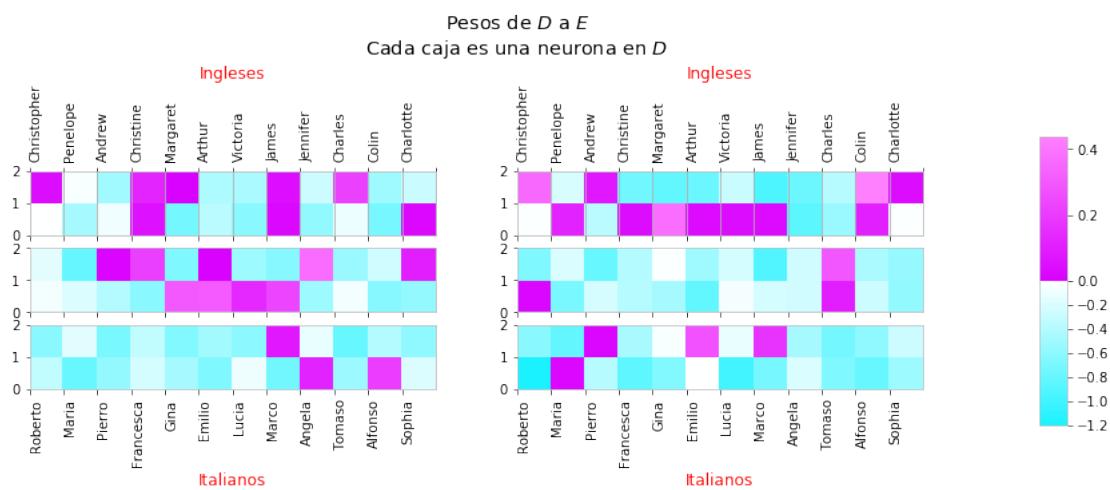


Figura 8.6 Resoluciones.

9 | Entrenamiento con genéticos

Algoritmos genéticos

Un algoritmo genético, conciste en “evolucionar” una población de individuos, cada uno de los cuales representa una posible solución. Esa población se somete a la evolución biológica es decir mutaciones y recombinaciones genéticas. De generación en generación, los individuos se seleccionan de acuerdo con una función de adaptación o *fitness*, en función de la cual se decide qué individuos sobreviven los más aptos y son descartados los menos aptos.

La selección se realiza siempre de forma probabilística. Un individuo es más probable que se seleccione si tiene un mejor valor de fitness, aunque cualquier individuo, por malo que sea, tiene una probabilidad de selección estrictamente mayor que cero. En ocasiones, si no queremos que una muy buena solución encontrada en una generación intermedia de la evolución se pierda por el camino, podemos introducir cierto grado de elitismo en la selección. Podemos hacer que el mejor individuo de la población (o los k mejores) siempre sobrevivan, algo que aleja a los algoritmos genéticos del mundo real, donde una generación termina siempre reemplazando por completo a las anteriores.

Neuroevolución

Vacio.

Antecedentes: Aprendizaje por refuerzo en videojuegos

Vacio.

Arquitectura para estimar la función de recompensa

Vacio.

Entrenamiento

Vacio.

10 | Mapeos autoorganizados

Introducción

Vacio.

Aprendizaje no supervisado

Vacio.

Mapeos auto-organizados

Vacio.

Kohonen

Vacio.

11 | Redes Neuronales Convolucionales

Convolución

Redes Convolucionales

Softmax

MNIST

Parte III

Redes con ciclos

12 | Redes Neuronales Recurrentes

Derivadas ordenadas

Retropropagación en el tiempo

Sistemas dinámicos y despliegue del grafo

Arquitectura recurrente universal

Función de error

Forzamiento del profesor

13 | Atención

14 | LSTM

15 | GRU

16 | Casos de análisis: etiquetado de palabras y conjugación de verbos

16. CASOS DE
ANÁLISIS: ETIQUETADO
DE PALABRAS Y
CONJUGACIÓN DE
VERBOS

Parte IV

Redes no dirigidas

17 | Redes de hopfield

Entrenamiento

18 | Máquinas de Boltzman

Entrenamiento

Partículas y partículas de fantasía

Máquinas de Boltzman Restringidas

19 | Redes adversarias

GANs

A | Ecuaciones diferenciales

Bibliografía

Mesulam, M. Marsel (1998). «From Sensation to Cognition». En: *Brain* 121, págs. 1013-1052.