Más allá de PyTorch: construyendo un motor de aprendizaje automático con NumPy y CuPy

Mitchell Mirano

Facultad de Ciencias Matemáticas – UNMSM
Área de Computación Científica

12 de noviembre de 2025
Semana de Computación Científica

Contenido

De las Matemáticas a Modelos de ML en Producción

- **Necesidad de Control y Explicabilidad Profunda**
  - Las arquitecturas de "caja negra" limitan la trazabilidad y el **control total sobre el flujo computacional**.
  - La transparencia es esencial para una **explicabilidad rigurosa** de las predicciones y los gradientes.
- **Ineficiencia y Costos Operacionales**
  - Los *frameworks* monolíticos (TensorFlow, PyTorch) suelen ser sobredimensionados para problemas específicos.
  - Producen **sobreconsumo de memoria y recursos**, elevando los costos en despliegues de producción.
- **Necesidad de Flexibilidad e Innovación**
  - Los sistemas existentes restringen la **experimentación con nuevas funciones de activación, gradientes o arquitecturas**.
  - Un **framework propio** permite adaptar la estructura matemática y computacional al objetivo de investigación o producción.

Definición de Machine Learning

Aprendizaje Automático (ML)

El Machine Learning es una rama de la Inteligencia Artificial que permite a los sistemas **aprender de datos**, identificar patrones y tomar decisiones con **mínima o nula intervención humana explícita**.

- Se basa en modelos matemáticos capaces de ajustar sus parámetros internos a medida que se exponen a nueva información.
- El objetivo es la **generalización**: obtener un rendimiento útil en datos no vistos previamente.
- Los algoritmos de aprendizaje automático se duviden en los siguiente paradigmas: **aprendizaje supervisado**, **aprendizaje no supervisado** y **aprendizaje por refuerzo**.

Aprendizaje Supervisado: Regresión

Definición

Objetivo: Predecir una **variable continua**, es decir, un número real dentro de un rango.

Aplicaciones Comunes

- **Finanzas:** Estimación de precios de vivienda o acciones.
- **Medio Ambiente:** Predicción de la temperatura o niveles de polución.
- **Comercio:** Proyecciones detalladas de ventas futuras.

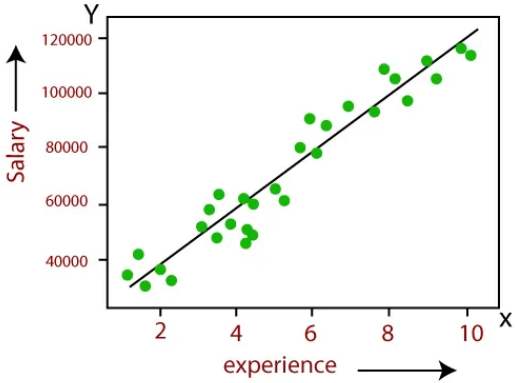


Figure: Modelo prediciendo valores continuos.

Aprendizaje Supervisado: Clasificación

Definición

Objetivo: Asignar una instancia a una **categoría o clase discreta** predefinida.

Aplicaciones Comunes

- **Seguridad:** Detección de *spam* (Clase A) vs. *No-spam* (Clase B).
- **Medicina:** Diagnóstico binario (enfermo/sano).
- **Visión:** Reconocimiento de dígitos o de objetos en imágenes.

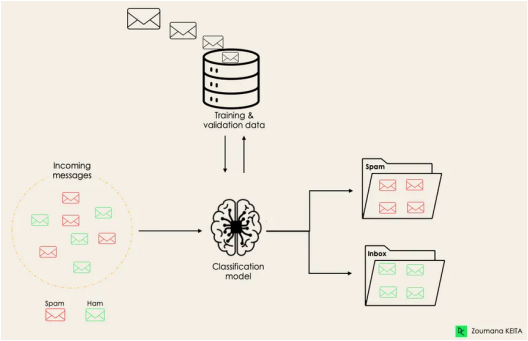


Figure: Separación de datos en clases discretas.

Aprendizaje No Supervisado: Clustering (Agrupamiento)

Definición

Objetivo: Identificar **grupos o estructuras naturales** en los datos. Es un problema de Aprendizaje **No Supervisado**.

Aplicaciones Comunes

- **Marketing:** Segmentación de clientes basada en comportamiento de compra.
- **Investigación:** Agrupamiento automático de documentos o artículos científicos.
- **Análisis de Datos:** Detección de anomalías o *outliers*.

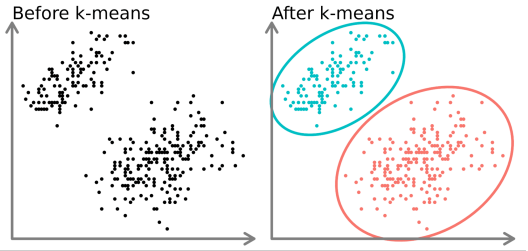


Figure: Identificación de estructuras sin etiquetas previas.

Aprendizaje por Refuerzo (RL)

Definición

Objetivo: Entrenar un **agente** para tomar decisiones secuenciales en un entorno, maximizando una **recompensa** acumulada.

Aplicaciones Comunes

- **Robótica:** Control y navegación autónoma.
- **Finanzas:** Optimización de carteras de inversión.
- **Juegos:** Desarrollo de IA que supera a humanos (e.g., AlphaGo).

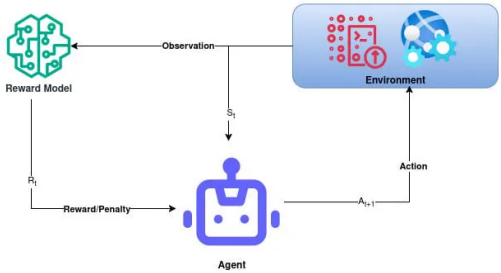


Figure: Diagrama del ciclo de interacción en RL.

Definición de Red Neuronal

Un modelo computacional que imita la estructura del cerebro, compuesto por capas de unidades simples (**neuronas artificiales**) interconectadas para aprender patrones complejos.

Componentes Clave

- → **Entradas**: Datos iniciales (*features*).
- → **Capas Ocultas**: Donde ocurre la transformación de los datos y la extracción de características.
- → **Salida**: La predicción o resultado final del modelo.

Arquitectura y Flujo de Datos

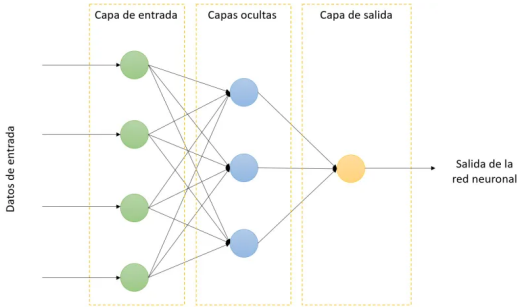


Figure: Estructura de una Red Neuronal básica.

Ubicación de las Redes Neuronales en el Campo de la IA

La Jerarquía de la Inteligencia Artificial

1. **Inteligencia Artificial (IA)**
   - Es el campo más amplio. Su meta es crear sistemas que imiten la inteligencia humana para realizar tareas.
   - Ejemplos: Planificación, resolución de problemas, y razonamiento.
2. **Machine Learning (ML)**
   - Se centra en el desarrollo de algoritmos que permiten a las computadoras **aprender de los datos** sin programación explícita.
3. **Redes Neuronales(NN)/Deep Learning(DL)**
   - Utiliza modelos complejos basados en capas (**Deep Learning**) para tareas de abstracción y predicción de alto nivel.

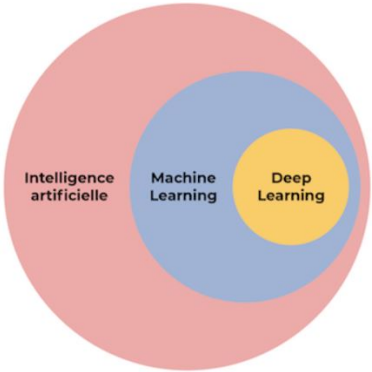


Figure: Relación jerárquica entre IA, ML y DL.

Neurona Artificial: Definición e Inspiración

Definición

Es la unidad fundamental de las Redes Neuronales, diseñada para simular el proceso de **activación e inhibición** de las neuronas biológicas. Su función principal es recibir señales y producir una única salida.

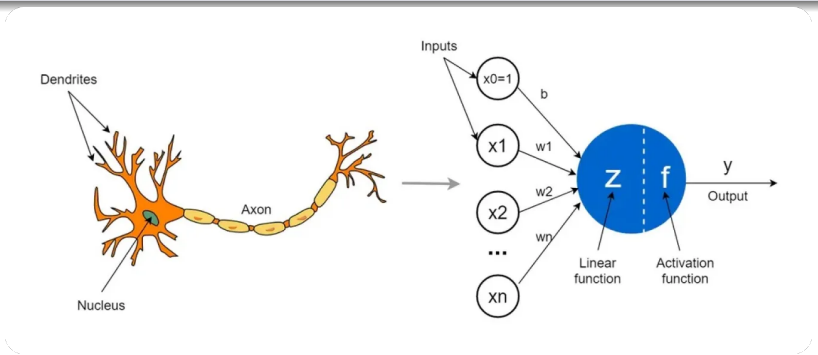


Figure: Paralelo entre neurona biológica y unidad artificial.

Neurona Artificial: Combinación Lineal (I)

Suma Ponderada (z): Fundamento de la Neurona

Definición Vectorial

La activación interna o señal integrada (z) se calcula como el **producto escalar** entre el vector de pesos $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^n$ y el vector de entrada $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, más un término escalar de sesgo ($b \in \mathbb{R}$):

$$\hat{y} = z = \mathbf{w}^\top \mathbf{x} + b$$

Interpretación Matemática:

- z representa una **combinación lineal** de las entradas ponderadas por sus pesos.
- El sesgo b introduce un desplazamiento adicional que evita la restricción de pasar por el origen.
- Este modelo constituye la base de toda red neuronal feed-forward.

Neurona Artificial: Expansión Escalar y Rol del Bias (II)

Expansión Escalar:

$$z = \sum_{i=1}^{n} w_i x_i + b$$

Interpretación Geométrica:

- La ecuación define un **hiperplano** en $\mathbb{R}^n$:

$$\mathbf{w}^\top \mathbf{x} + b = 0$$

- El vector $\mathbf{w}$ es **normal** al hiperplano.
- El término b determina su desplazamiento respecto al origen:

$$\text{distancia} = -\frac{b}{\|\mathbf{w}\|}$$

Regresión Lineal: Aplicación de la Neurona Artificial (I)

Regresión Lineal Simple:

- Se modela una variable de salida $y \in \mathbb{R}$ a partir de una única variable de entrada $x \in \mathbb{R}$.
- La relación se expresa como:

$$\hat{y} = w_1 x + b$$

donde w_1 representa la pendiente y b el intercepto.

Regresión Lineal Múltiple:

- Se extiende el modelo a n variables de entrada:

$$\hat{y} = \sum_{i=1}^{n} w_i x_i + b = \mathbf{w}^\top \mathbf{x} + b$$

- Cada w_i representa la contribución lineal de la característica x_i a la variable objetivo y.

Regresión Lineal: Formulación Matricial (II)

El modelo lineal para n observaciones y m características se expresa como:

$$\hat{\mathbf{y}} = X\mathbf{w} + \mathbf{b}$$

donde:

- $X \in \mathbb{R}^{n \times m}$: matriz de diseño o entradas.
- $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^{m}$: vector de parámetros o pesos.
- $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^{n}$: vector de sesgos o bias.
- $\hat{\mathbf{y}} \in \mathbb{R}^{n}$: vector de valores predichos.

$$\begin{bmatrix} \hat{y}_1 \\ \hat{y}_2 \\ \vdots \\ \hat{y}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1m} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_m \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} b \\ b \\ \vdots \\ b \end{bmatrix}$$

Regresión Lineal: Función de Costo (III-A)

Definición del Error Cuadrático Medio (MSE):
El objetivo es estimar los parámetros $\mathbf{w}$ y b que minimicen la discrepancia entre los valores observados $\mathbf{y}$ y los predichos $\hat{\mathbf{y}}$:

$$\mathcal{L}(\mathbf{w}, b) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (\hat{y}_i - y_i)^2$$

Sustituyendo el modelo lineal:

$$\mathcal{L}(\mathbf{w}, b) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + b - y_i \right)^2$$

Interpretación:

- Mide el **error promedio cuadrático** entre la salida real y la predicha.
- Penaliza más fuertemente los errores grandes.

Regresión Lineal: Función de Costo (III-B)

Forma Matricial:

$$\mathcal{L}(\mathbf{w}, b) = \frac{1}{n}\|X\mathbf{w} + b\mathbf{1}_n - \mathbf{y}\|_2^2$$

Donde:

- $X \in \mathbb{R}^{n \times m}$ es la matriz de diseño.
- $\mathbf{1}_n$ es un vector columna de unos $(n \times 1)$.
- $\mathbf{y}$ es el vector de salidas reales.

Regresión Lineal: Derivadas del MSE (IV-A)

Función de costo:

$$\mathcal{L}(\mathbf{w}, b) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + b - y_i \right)^2$$

Sea el error para el ejemplo i-ésimo:

$$e_i = \hat{y}_i - y_i = \mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + b - y_i$$

Entonces:

$$\mathcal{L}(\mathbf{w}, b) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} e_i^2$$

Derivadas parciales:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_j} = \frac{2}{n} \sum_{i=1}^{n} e_i \, x_{ij} \qquad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial b} = \frac{2}{n} \sum_{i=1}^{n} e_i$$

Regresión Lineal: Derivadas del MSE (IV-B)

Recordando la forma matricial:

$$\mathcal{L}(\mathbf{w}, b) = \frac{1}{n}\|X\mathbf{w} + b\mathbf{1}_n - \mathbf{y}\|_2^2$$

Gradientes vectoriales:

$$\nabla_{\mathbf{w}}\mathcal{L} = \frac{2}{n}X^\top(X\mathbf{w} + b\mathbf{1}_n - \mathbf{y})$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial b} = \frac{2}{n}\mathbf{1}_n^\top(X\mathbf{w} + b\mathbf{1}_n - \mathbf{y})$$

Regresión Lineal: Condiciones del Mínimo Analítico (V-A)

Condición de óptimo (mínimo global):

$$\nabla_{\mathbf{w}} \mathcal{L} = 0, \qquad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial b} = 0$$

Sustituyendo y simplificando:

$$X^\top (X\mathbf{w} + b\mathbf{1}_n - \mathbf{y}) = 0$$

$$\mathbf{1}_n^\top (X\mathbf{w} + b\mathbf{1}_n - \mathbf{y}) = 0$$

Estas dos ecuaciones conforman el **sistema normal de mínimos cuadrados**.

Regresión Lineal: Sistema Normal y Despeje de b (V-B1)

Expandiendo el sistema:

$$\begin{cases} X^\top X\mathbf{w} + bX^\top \mathbf{1}_n = X^\top \mathbf{y} \\ \mathbf{1}_n^\top X\mathbf{w} + b\mathbf{1}_n^\top \mathbf{1}_n = \mathbf{1}_n^\top \mathbf{y} \end{cases}$$

Solución cerrada para los parámetros:

$$\boxed{\mathbf{w}^* = (X^\top HX)^{-1} X^\top H\mathbf{y}}$$

$$\boxed{b^* = \bar{y} - (\mathbf{w}^*)^\top \bar{\mathbf{x}}}$$

Regresión Lineal: Solución Analítica del MSE (V-B2)

Donde:

$$H = I_n - \frac{1}{n}\mathbf{1}_n\mathbf{1}_n^\top, \qquad \bar{\mathbf{x}} = \frac{1}{n}X^\top\mathbf{1}_n \in \mathbb{R}^m, \qquad \bar{y} = \frac{1}{n}\mathbf{1}_n^\top\mathbf{y} \in \mathbb{R}$$

Interpretación:

- $\mathbf{w}^*$ es la solución de **mínimos cuadrados ordinarios (OLS)**.
- b^* compensa el desplazamiento medio de los datos.
- Esta solución coincide con el mínimo global del error cuadrático.

Descenso del Gradiente: Principio General (VI-A)

Objetivo: minimizar una función de costo diferenciable $J(\mathbf{w}, b)$ ajustando iterativamente los parámetros.

$$\mathbf{w}^{(t+1)} = \mathbf{w}^{(t)} - \eta \, \nabla_{\mathbf{w}} \mathcal{L}(\mathbf{w}^{(t)}, b^{(t)})$$

$$b^{(t+1)} = b^{(t)} - \eta \, \frac{\partial \mathcal{L}(\mathbf{w}^{(t)}, b^{(t)})}{\partial b}$$

donde:

- $\eta > 0$ es la **tasa de aprendizaje** usualmente $\eta = 0.01$.
- $\nabla_{\mathbf{w}} \mathcal{L}$ y $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial b}$ indican la dirección de máximo incremento de J.
- Restarlas implementa el **descenso** hacia el mínimo.

Criterio de parada:

$$\|\nabla \mathcal{L}(\mathbf{w}^{(t)}, b^{(t)})\|_2 < \varepsilon \quad \text{o} \quad t \geq t_{\text{max}}$$

Descenso del Gradiente: Minimización del Error Cuadrático Medio (VI-B)

Función de costo:

$$\mathcal{L}(\mathbf{w}, b) = \frac{1}{n}\|X\mathbf{w} + b\mathbf{1}_n - \mathbf{y}\|_2^2$$

Gradientes:

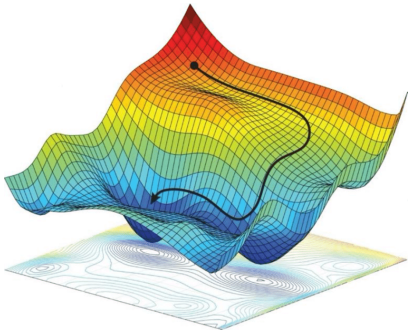
$$\nabla_{\mathbf{w}}\mathcal{L} = \frac{2}{n}X^\top(X\mathbf{w} + b\mathbf{1}_n - \mathbf{y})$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial b} = \frac{2}{n}\mathbf{1}_n^\top(X\mathbf{w} + b\mathbf{1}_n - \mathbf{y})$$

Actualización iterativa:

$$\mathbf{w}^{(t+1)} = \mathbf{w}^{(t)} - \frac{2\eta}{n}X^\top(X\mathbf{w}^{(t)} + b^{(t)}\mathbf{1}_n - \mathbf{y})$$

$$b^{(t+1)} = b^{(t)} - \frac{2\eta}{n}\mathbf{1}_n^\top(X\mathbf{w}^{(t)} + b^{(t)}\mathbf{1}_n - \mathbf{y})$$



Evaluación del Modelo: Métricas en Regresión (VIII)

Error Absoluto Medio (MAE)

$$MAE = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}|\hat{y}_i - y_i|$$

Error Cuadrático Medio (MSE)

$$MSE = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\hat{y}_i - y_i)^2$$

Error Porcentual Absoluto Medio (MAPE)

$$MAPE = \frac{100}{n}\sum_{i=1}^{n}\left|\frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i}\right|$$

Coeficiente de Determinación (R^2)

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2}$$

Función de Activación: Sigmoide (IX-A)

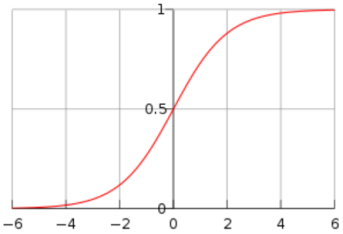
Definición: Función no lineal que comprime la entrada en el rango $(0, 1)$, comúnmente usada en modelos probabilísticos y neuronas binarias.

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

Aplicaciones:

- Clasificación binaria $p(y = 1|x)$.
- Capa de salida en regresión logística.
- Modelos donde se requiere una interpretación probabilística.

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



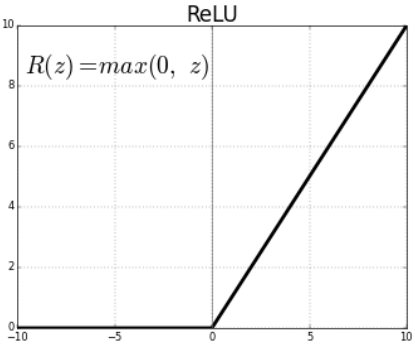
Función de Activación: ReLU (IX-B)

Definición: Activa solo valores positivos de la entrada, anulando los negativos. Introduce no linealidad con bajo costo computacional.

$$\text{ReLU}(x) = \max(0, x)$$

Aplicaciones:

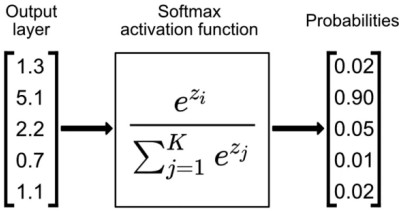
- Capas ocultas en redes neuronales profundas (DNN, CNN).
- Mejora la convergencia del entrenamiento.
- Evita el problema de saturación del gradiente.



Función de Activación: Softmax (IX-D)

Definición: Convierte un vector de valores reales en una distribución de probabilidad sobre K clases.

$$\text{softmax}(x_i) = \frac{e^{x_i}}{\sum_{j=1}^{K} e^{x_j}}$$



Aplicaciones:

- Capa de salida en clasificación multiclase.
- Modelos probabilísticos como redes neuronales bayesianas.
- Permite interpretar la salida como $p(y = k|x)$.

Capas de una Red Neuronal: Formulación Matricial (I)

En una neurona individual, la operación lineal se define como:

$$\hat{\mathbf{y}} = X\mathbf{w} + \mathbf{b}$$

$$\begin{bmatrix} \hat{y}_1 \\ \hat{y}_2 \\ \vdots \\ \hat{y}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1m} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_m \end{bmatrix} + b \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}$$

Capas de una Red Neuronal: Formulación Matricial (II)

Consideremos una capa completamente conectada que recibe como entrada una matriz de datos:

$$\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times m},$$

donde:

- n: número de observaciones (filas),
- m: número de características (columnas).

La capa posee k neuronas, cada una con un conjunto de m pesos y un sesgo. Por tanto, los parámetros de la capa se representan como:

$$\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{m \times k}, \qquad \mathbf{b} \in \mathbb{R}^{k}.$$

El modelo lineal de la capa se expresa matricialmente como:

$$\mathbf{Z} = \mathbf{X}\mathbf{W} + \mathbf{b},$$

donde $\mathbf{Z} \in \mathbb{R}^{n \times k}$ contiene las salidas (pre-activaciones) de las k neuronas para las n observaciones.

Capas de una Red Neuronal: Formulación Matricial (III)

$$\begin{bmatrix} \hat{y}_{11} & \hat{y}_{12} & \dots & \hat{y}_{1k} \\ \hat{y}_{21} & \hat{y}_{22} & \dots & \hat{y}_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{y}_{n1} & \hat{y}_{n2} & \dots & \hat{y}_{nk} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1m} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_{11} & w_{12} & \dots & w_{1k} \\ w_{21} & w_{22} & \dots & w_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{m1} & w_{m2} & \dots & w_{mk} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} b_1 & b_2 & \dots & b_k \\ b_1 & b_2 & \dots & b_k \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_1 & b_2 & \dots & b_k \end{bmatrix}$$

Ahora pasamos $\mathbf{Z}$ por una función de activación $a(\mathbf{Z})$ para obtener la salida final de la capa.

$$\hat{\mathbf{Y}} = a(\mathbf{Z})$$

Red Neuronal como Composición de Funciones (I)

Una red neuronal puede interpretarse matemáticamente como una **composición de funciones**. Cada capa transforma su entrada mediante una combinación lineal seguida de una función de activación no lineal.
Para una red con L capas, cada una definida por:

$$\mathbf{X}^{(l)} = a^{(l)}\left(\mathbf{Z}^{(l)}\right), \qquad \mathbf{Z}^{(l)} = \mathbf{X}^{(l-1)}\mathbf{W}^{(l)} + \mathbf{b}^{(l)}$$

donde:

- $\mathbf{W}^{(l)} \in \mathbb{R}^{m_{l-1} \times m_l}$: pesos de la capa l,
- $\mathbf{b}^{(l)} \in \mathbb{R}^{m_l}$: sesgos,
- $a^{(l)}(\cdot)$: función de activación de la capa l.
- $\mathbf{X}^{(l)} \in \mathbb{R}^{n \times m_l}$: salida de la capa l.

Red Neuronal como Composición de Funciones (II)

En forma más explícita, la salida de la red para una entrada $\mathbf{X}$ se obtiene aplicando sucesivamente las transformaciones de cada capa:

$$\begin{aligned}
\mathbf{X}^{(1)} &= a^{(1)}\left(\mathbf{Z}^{(1)}\right) = a^{(1)}\left(\mathbf{X}\mathbf{W}^{(1)} + \mathbf{b}^{(1)}\right), \\
&\vdots \\
\mathbf{X}^{(L-1)} &= a^{(L-1)}\left(\mathbf{Z}^{(L-2)}\right) = a^{(L-1)}\left(\mathbf{X}^{(L-2)}\mathbf{W}^{(L-2)} + \mathbf{b}^{(L-2)}\right), \\
\hat{\mathbf{Y}} &= a^{(L)}\left(\mathbf{Z}^{(L)}\right) = a^{(L)}\left(\mathbf{X}^{(L-1)}\mathbf{W}^{(L)} + \mathbf{b}^{(L)}\right).
\end{aligned}$$

De esta forma, una red neuronal profunda implementa una función compuesta:

$$\hat{\mathbf{Y}} = f(\mathbf{X}; \Theta) = (a^{(L)} \circ \mathbf{Z}^{(L)} \circ \cdots \circ a^{(1)} \circ \mathbf{Z}^{(1)})(\mathbf{X}),$$

donde $\Theta = \{\mathbf{W}^{(l)}, \mathbf{b}^{(l)}\}_{l=1}^{L}$ representa el conjunto total de parámetros del modelo.

Retropropagación: Cálculo de Gradientes (I)

El objetivo del entrenamiento es minimizar una función de pérdida $\mathcal{L}(\hat{\mathbf{Y}}, \mathbf{Y})$ respecto a los parámetros $\Theta = \{\mathbf{W}^{(l)}, \mathbf{b}^{(l)}\}_{l=1}^{L}$.
Dado que la red es una composición de funciones,

$$\hat{\mathbf{Y}} = f(\mathbf{X}; \Theta) = a^{(L)}(\mathbf{Z}^{(L)}) = a^{(L)}(\mathbf{X}^{(L-1)}\mathbf{W}^{(L)} + \mathbf{b}^{(L)}),$$

aplicamos la **regla de la cadena** para propagar los gradientes desde la salida hacia las capas anteriores.
Para la capa L:

$$\delta^{(L)} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{Z}^{(L)}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{\mathbf{Y}}} \odot a'^{(L)}(\mathbf{Z}^{(L)}),$$

donde $\odot$ denota el producto elemento a elemento.

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{W}^{(L)}} = (\mathbf{X}^{(L-1)})^{\top} \delta^{(L)}, \qquad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{b}^{(L)}} = \sum_{i} \delta_i^{(L)}.$$

Retropropagación: Cálculo de Gradientes (II)

Para las capas ocultas $l = L-1, L-2, \ldots, 1$, los gradientes se propagan hacia atrás utilizando:

$$\delta^{(l)} = \left(\delta^{(l+1)}(\mathbf{W}^{(l+1)})^\top\right) \odot a'^{(l)}(\mathbf{Z}^{(l)}),$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{W}^{(l)}} = (\mathbf{X}^{(l-1)})^\top \delta^{(l)}, \qquad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{b}^{(l)}} = \sum_i \delta_i^{(l)}.$$

Este procedimiento se repite recursivamente desde la capa de salida hasta la capa de entrada, actualizando los parámetros según descenso del gradiente:

$$\mathbf{W}^{(l)} \leftarrow \mathbf{W}^{(l)} - \eta \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{W}^{(l)}}, \qquad \mathbf{b}^{(l)} \leftarrow \mathbf{b}^{(l)} - \eta \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{b}^{(l)}},$$

donde η es la tasa de aprendizaje.

Retos para construir un Framework Minimalista

Principales retos identificados:

- **Vincular matemáticas y programación:** llevar la formulación teórica de la composición de funciones y la retropropagación a código ejecutable.
- **Eficiencia numérica:** garantizar operaciones vectorizadas y cálculo de gradientes sin pérdida de rendimiento.
- **Portabilidad y escalabilidad:** permitir la ejecución del mismo código tanto en CPU como en GPU.
- **Modularidad:** diseñar una arquitectura flexible que permita incorporar nuevas funciones y capas sin modificar el núcleo.
- **Usabilidad y claridad:** ofrecer una interfaz de programación simple, cercana a los paradigmas de bibliotecas modernas de ML.

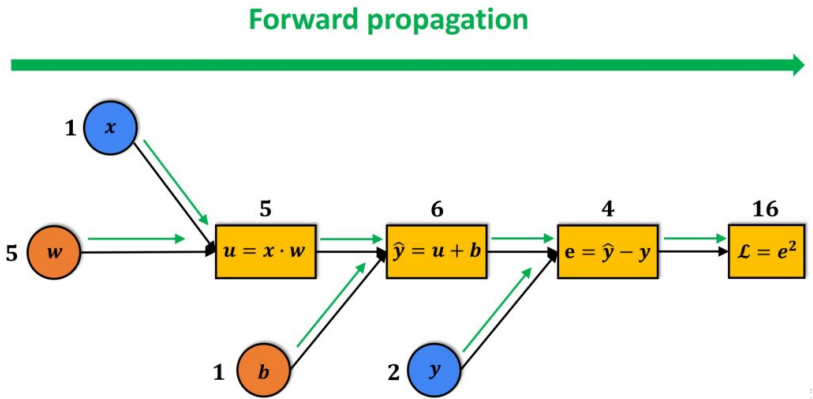
Solución: Sorix, Un Motor de ML Minimalista

- **Sorix: Biblioteca de Aprendizaje Automático desde Cero**
  - Diseñada para ofrecer **control de bajo nivel** y máxima eficiencia.
  - Disponible públicamente a través de **PyPI**(pip install sorix).
- **Arquitectura de Alto Rendimiento**
  - **Core**: Implementación propia y limpia de **Autograd** (Diferenciación Automática).
  - **Backend CPU**: Construido sobre **NumPy**.
  - **Backend GPU**: Soporte nativo mediante **CuPy** para aceleración masiva.
- **Usabilidad**
  - Proporciona una **API similar a PyTorch**, lo que facilita el prototipado rápido y la migración de código existente.

Concepto de Autodiferenciación

Definición

La autodiferenciación calcula derivadas exactas mediante la aplicación sistemática de la **regla de la cadena** sobre un grafo computacional dinámico.



Implementación del Autograd en Sorix

Estructura de la clase `tensor`

Cada instancia de `tensor` constituye un nodo en el grafo computacional y contiene:

- **data**: arreglo numérico definido sobre $\mathbb{R}$, $\mathbb{R}^N$ o $\mathbb{R}^{M\times N}$.
- **requires_grad**: Determina si el tensor participa en el cálculo de gradientes.
- **grad**: tensor del mismo orden que `data`, donde se acumulan los gradientes durante la retropropagación.
- **operaciones**: conjunto de transformaciones matemáticas definidas sobre el tensor (suma, producto, activaciones, etc.).
- **_op**: La operación que se utilizo para generarlo.
- **_prev**: referencias a los tensores padres utilizados para generar el nodo actual.
- **backward**: función local que define la regla de derivación asociada a la operación realizada.

clase tensor en Sorix

```python
class tensor:

    Windsurf: Refactor | Explain | Generate Docstring | ×
    def __init__(self, data, _children=[], _op='',device='cpu',requires_grad=False):


        if device == 'gpu' and not _cupy_available:

            raise Exception('Cupy is not available')

        xp = cp if (device == 'gpu' and _cupy_available) else np

        if isinstance(data, (list, tuple,np.ndarray,pd.DataFrame, pd.Series)):

            data = xp.array(data)

        self.data = data

        self.device = device
        self.requires_grad = requires_grad
        self.grad = xp.zeros_like(self.data) if requires_grad else None
        self._backward = _noop
        global _autograd_enabled
        self._prev = _children if (_autograd_enabled and requires_grad) else []
        self._op = _op if _autograd_enabled else ''
```

Operaciones con Autograd en Sorix(foward)

```python
def __add__(self, other):
    other = other if isinstance(other, tensor) else tensor(other)

    global _autograd_enabled

    if not _autograd_enabled:
        return tensor(self.data + other.data, device=self.device)

    requires_grad = self.requires_grad or other.requires_grad

    out = tensor(self.data + other.data, [self, other], '+',device=self.device,requires_grad=requires_grad)

    Windsurf: Refactor | Explain | Generate Docstring | ×
    def _backward():
        if self.requires_grad:
            grad_self = tensor._match_shape(out.grad, self.data.shape)
            self.grad += grad_self
        if other.requires_grad:
            grad_other = tensor._match_shape(out.grad, other.data.shape)
            other.grad += grad_other

    out._backward = _backward
    return out
```

Retropropagación Automática en Sorix(backward)

```python
def backward(self):
    topo = []
    visited = set()

    Windsurf: Refactor | Explain | Generate Docstring | ×
    def build_topo(t):
        if id(t) not in visited:
            visited.add(id(t))
            for child in t._prev:
                build_topo(child)
            topo.append(t)

    build_topo(self)
    self.grad = cp.ones_like(self.data) if self.device == 'gpu' else np.ones_like(self.data)

    for node in reversed(topo):
        node._backward()
```

Control del Grafo: sorix.no_grad()

Modo sin gradientes

Durante inferencia o validación, el grafo no se construye:

```
with sorix.no_grad():
    pred = model(x_val)
```

- **sorix.no_grad()**: controla la variable global **_autograd_enabled**.
- Ahorra memoria y acelera la ejecución.
- Equivalente a `torch.no_grad()` en PyTorch.

Usando la GPU: NumPy vs CuPy

CPU – NumPy

```
import numpy as np
x = np.random.randn(1000000)
y = np.exp(x)
```

GPU – CuPy

```
import cupy as cp
x = cp.random.randn(1000000)
y = cp.exp(x)
```

cambiando np y cp por xp

```
xp = cp if (device == 'gpu' and _cupy_available) else np
```

Entrenamiento de una Red Neuronal en Sorix

Ejemplo: Entrenamiento de una red neuronal en Sorix. Abrir en Google Colab

Repositorio de Sorix en https://github.com/Mitchell-Mirano/sorix

- Explorar más ejemplos de **Machine Learning** con `Sorix`.
- Profundizar en el uso de **Autograd** para redes neuronales.
- Contribuir activamente al desarrollo del proyecto.

Escanea el código QR para acceder al repositorio.

¡Gracias por su atención!

Preguntas o comentarios son bienvenidos.