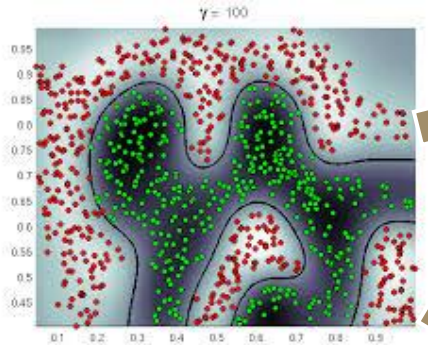
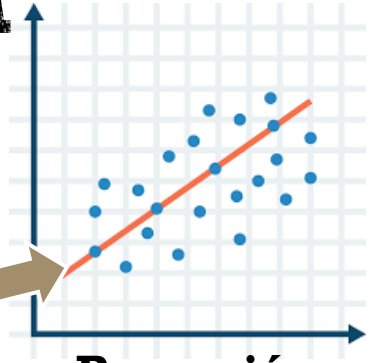
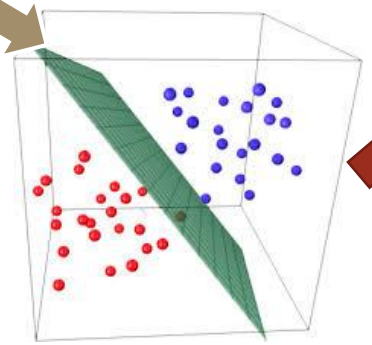
AGENDA



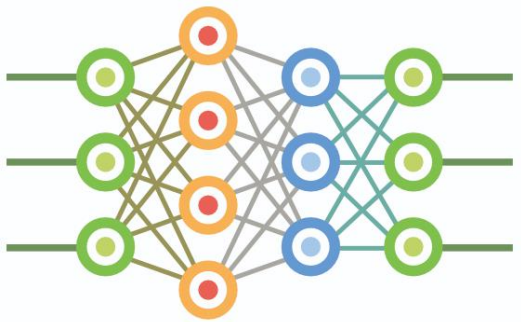
Aprendizaje supervisado



Regresión (OLS)



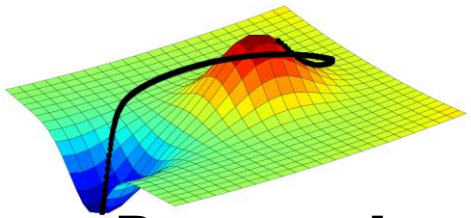
Clasificación (Reg. Logística)



Redes Neuronales Artificial (ANN)

$$\frac{\partial L}{\partial W^{[2]}} = \frac{\partial L}{\partial A^{[2]}} \cdot \frac{\partial A^{[2]}}{\partial Z^{[2]}} \cdot \frac{\partial Z^{[2]}}{\partial W^{[2]}}$$

Back-Propagation

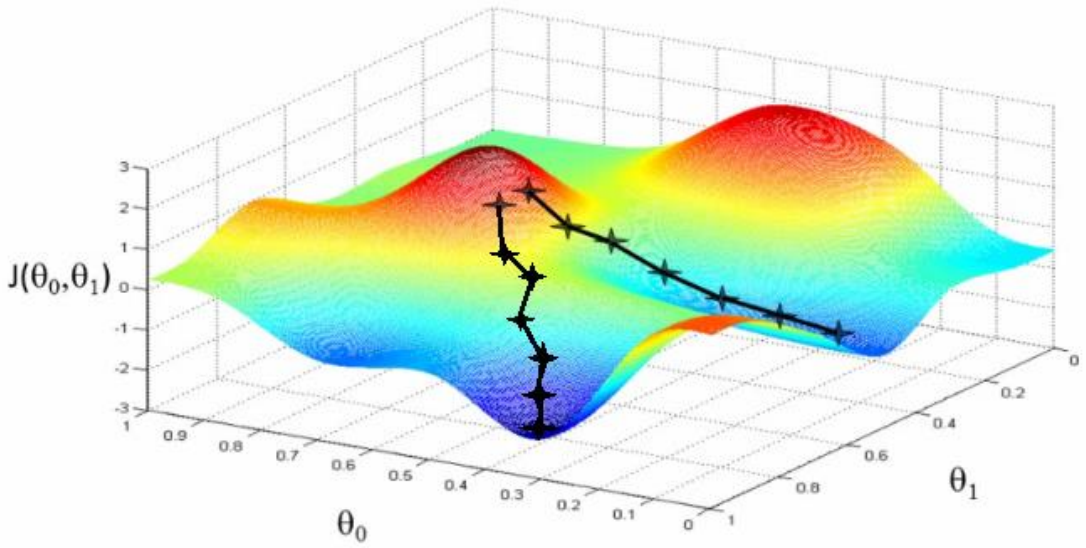


Descenso de gradiente

Javier Diaz Cely, PhD
UNIVERSIDAD ICESI

DESCENSO DE GRADIENTE

Aplicación a la regresión lineal



Javier Diaz Cely, PhD
UNIVERSIDAD ICESI

DESCENSO DE GRADIENTE

- Ilustraremos el proceso de descenso de gradiente para la **regresión lineal**.
- **Función de costo o de pérdida (loss) J**: función objetivo que se debe optimizar durante el proceso de aprendizaje, a partir del ajuste de los parámetros del modelo.
  - Varía en función de los parámetros θ_i del modelo.
  - En el caso de la regresión lineal múltiple:

$$J(\theta_0, \theta_1, \dots, \theta_n) = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^{m} (\theta_0 + \theta_1 x_1^{(i)} + \cdots + \theta_n x_n^{(i)} - y^{(i)})^2$$

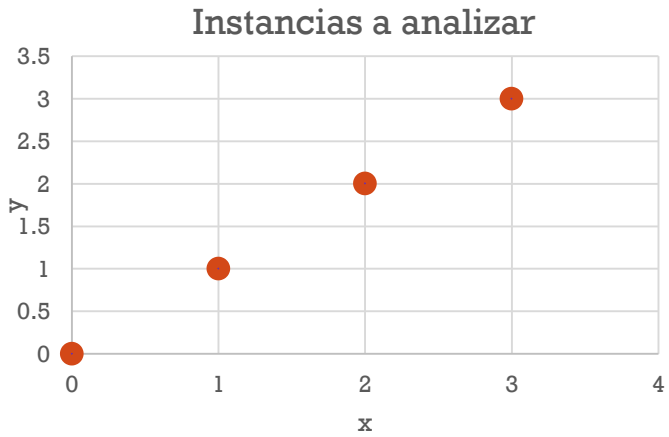
→ Cada combinación de parámetros $\theta_0, \theta_1, \dots, \theta_n$ corresponde a un modelo lineal diferente

Javier Diaz Cely, PhD
UNIVERSIDAD ICESI

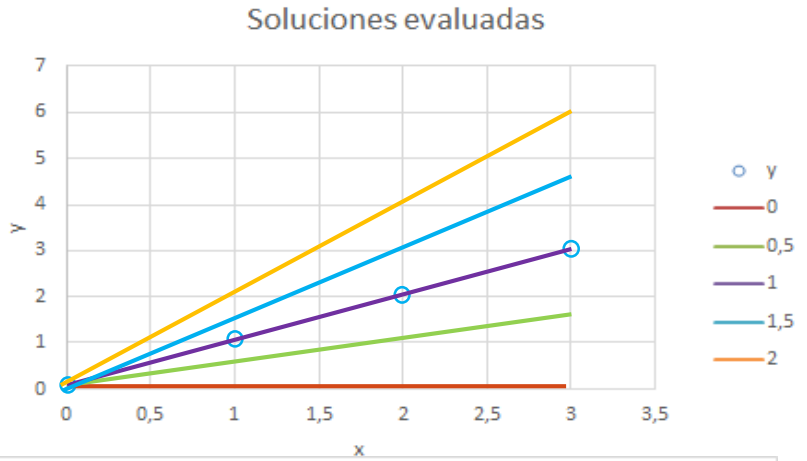
DESCENSO DE GRADIENTE

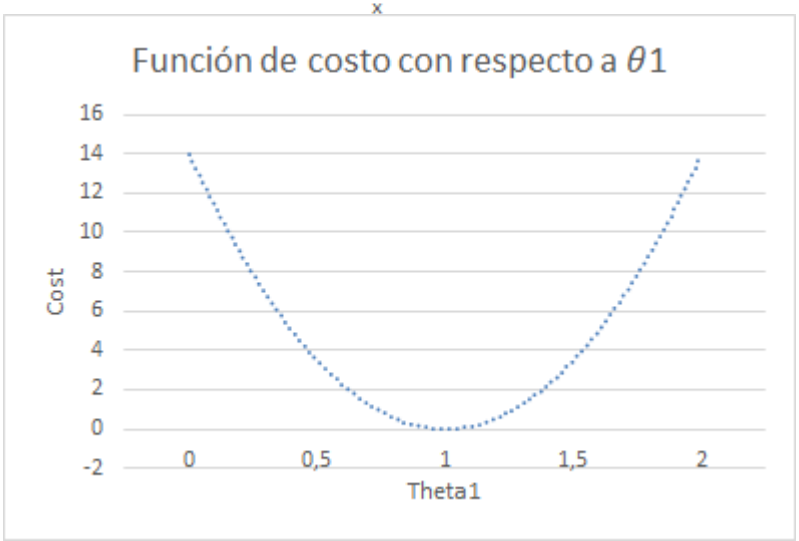
		Valores de θ1									
		0	0,5	1	1,5	2	0	0,5	1	1,5	2
x	y	y est. = θ1*x					residuo=(θ1*x-y est.)^2				
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	1	0	0,5	1	1,5	2	1	0,25	0	0,25	1
2	2	0	1	2	3	4	4	1	0	1	4
3	3	0	1,5	3	4,5	6	9	2,25	0	2,25	9
						J	14	3,5	0	3,5	14

- **Ejemplo**: tenemos los datos siguientes.
  - ¿Cuáles son los valores de θ_0 y θ_1?



  - $\theta_0 = 0$ y $\theta_1 = 1$
  - Partiendo del hecho de que sabemos que $\theta_0 = 0$, evaluemos la función de costo para θ_1, haciendo variar su valor entre $\{0, 0.5, 1, 1.5, 2\}$

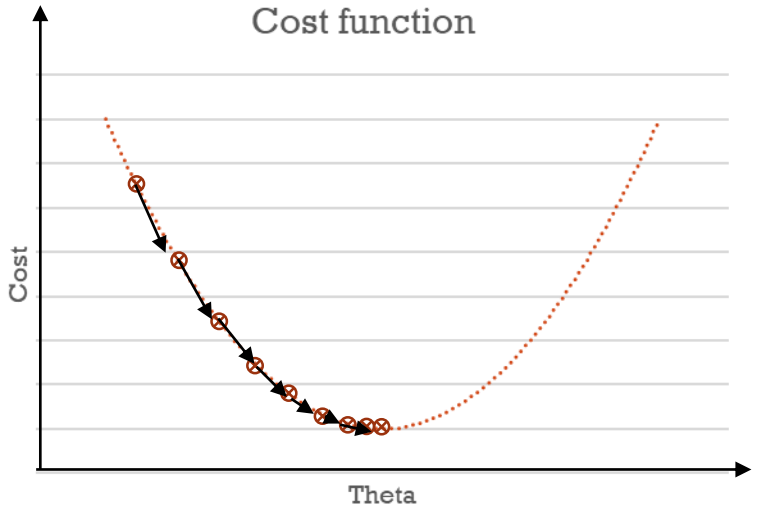


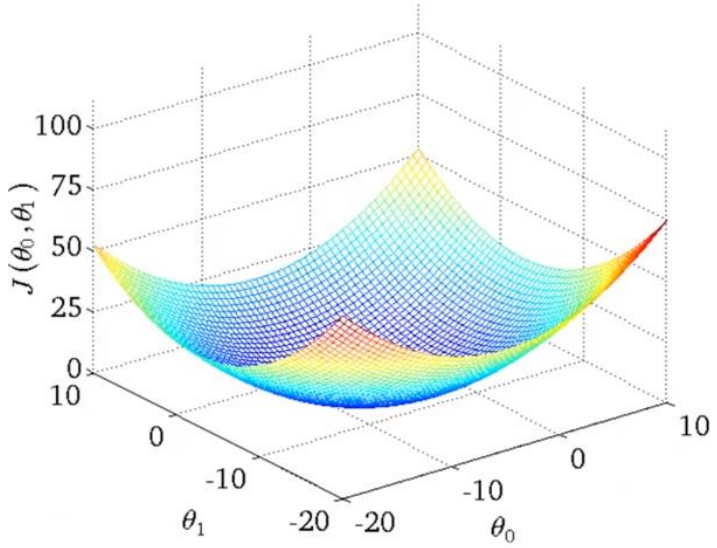


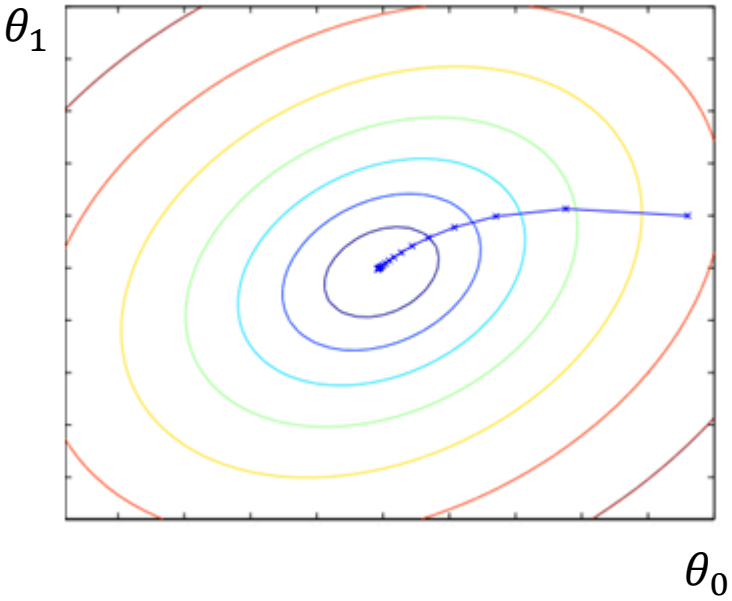
Javier Diaz Cely, PhD
UNIVERSIDAD ICESI

DESCENSO DE GRADIENTE

Descenso de gradiente







Javier Diaz Cely, PhD
UNIVERSIDAD ICESI

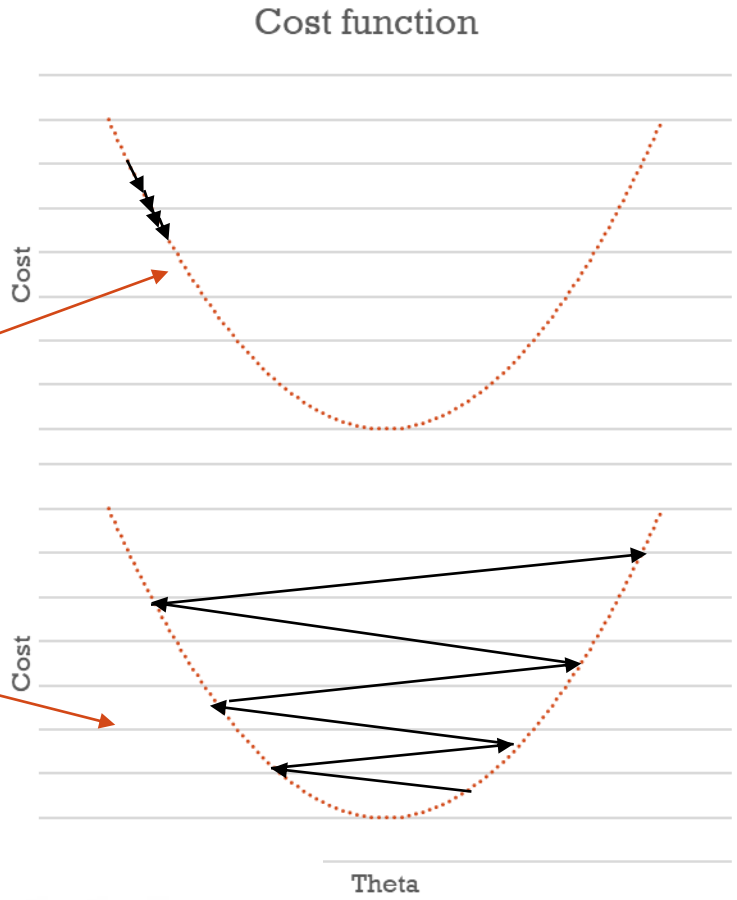
DESCENSO DE GRADIENTE

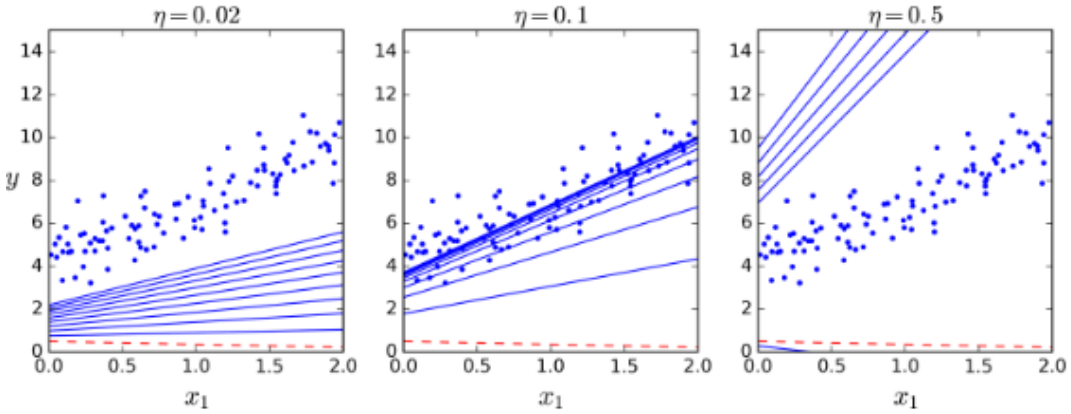
- Algoritmo:
  1. Escoger aleatoriamente valores para cada parámetro θ_i.
  2. Actualizar todos los θ_i **simultáneamente**: $\theta_i := \theta_i - \alpha \frac{\partial}{\partial \theta_i} J(\Theta)$. Donde $J(\Theta)$ es la **función de costo** que deseamos minimzar. Nos basamos en las derivadas parciales para encontrar la dirección que se debe seguir para actualizar los parámetros de tal manera que se minimice la función de costo.
  3. Parar cuando se llegue a convergencia (mínimo del costo)
- α es el **learning rate** (**taza de aprendizaje)** y controla el nivel de actualización de los parámetros. Es importante no escoger un α ni muy pequeño, ni muy grande (como veremos más adelante)
- No hay garantía de llegar a un mínimo **global**, puede que se alcance un mínimo **local**

DESCENSO DE GRADIENTE

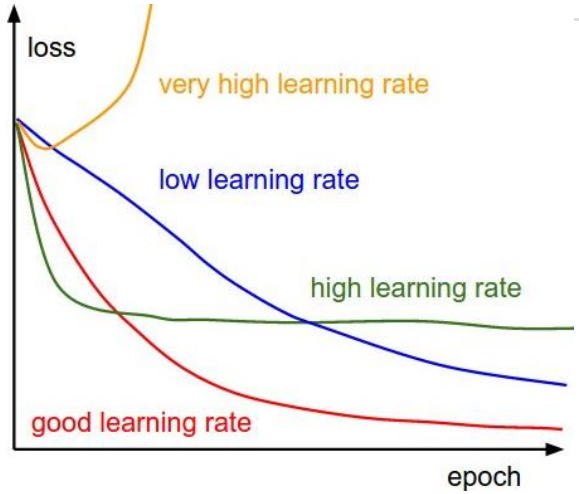
Escogencia de la taza de aprendizaje α:

- Si α muy pequeño: demorado llegar a convergencia
- Si α muy grande: demorado llegar a convergencia, peligro de divergencia
- El costo debe decrecer siempre en cada iteración; en caso contrario, se debe reducir el valor de α
- Se debe intentar de manera empírica con varios valores de α: 0.001, 0.01, 0.1, 1.





Géron, 2017

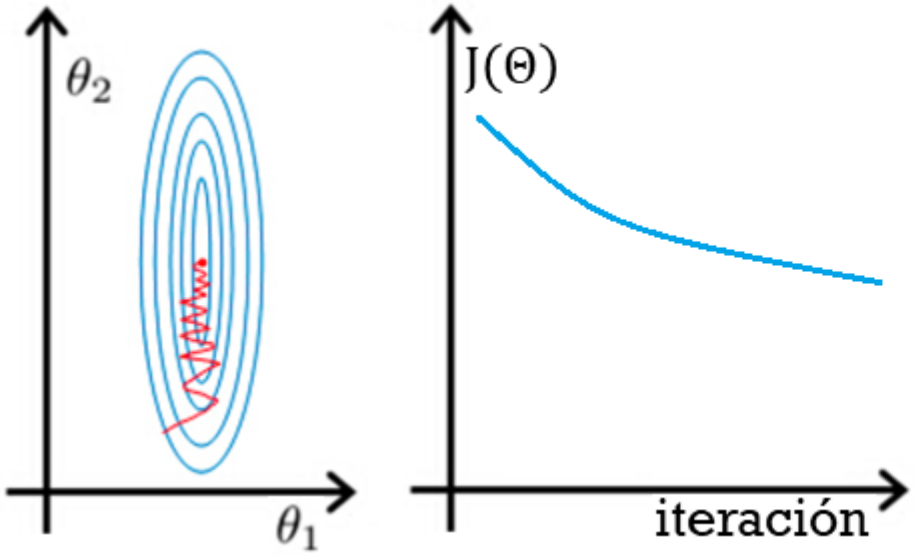


http://cs231n.github.io/neural-networks-3/

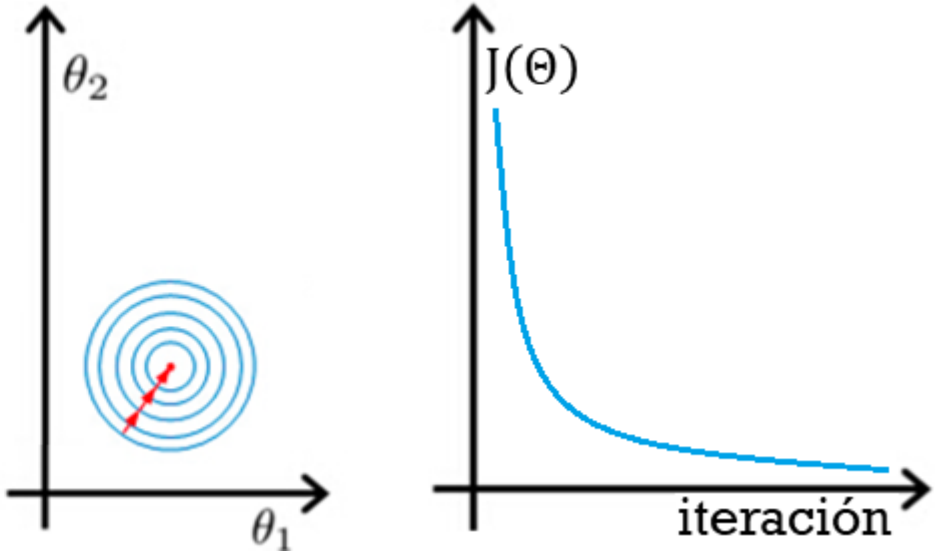
DESCENSO DE GRADIENTE

Feature Scaling

- Si escalas muy diferentes: demorado llegar a convergencia, sobre influencia de las derivadas parciales de las variables de mayor escala iteración →**Normalización**



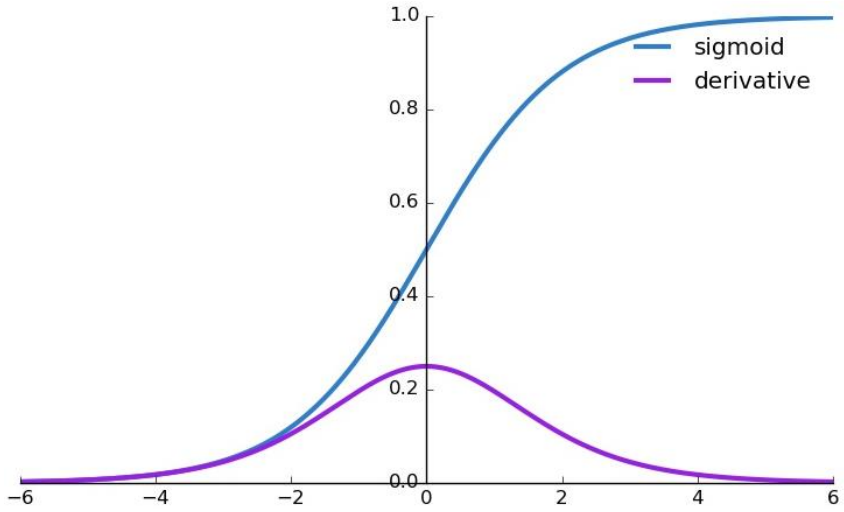
- Si misma escala: influencia igual de las derivadas parciales de todos los parámetros
- También ayuda que los datos estén centrados en 0



DESCENSO DE GRADIENTE

Gradiente explosivo o desvaneciente

- Si se usan funciones de activación como la sigmoide o la tangente hiperbólica, los valores muy pequeños o muy grandes tienen una pendiente muy baja, por lo que la optimización puede ser extremadamente lenta → Uso de ReLU
- **Batch normalization**: estandarizar los datos de entrada a cada capa para evitar valores extremos, teniendo en cuenta un subconjunto de instancias de entrenamiento (batch).



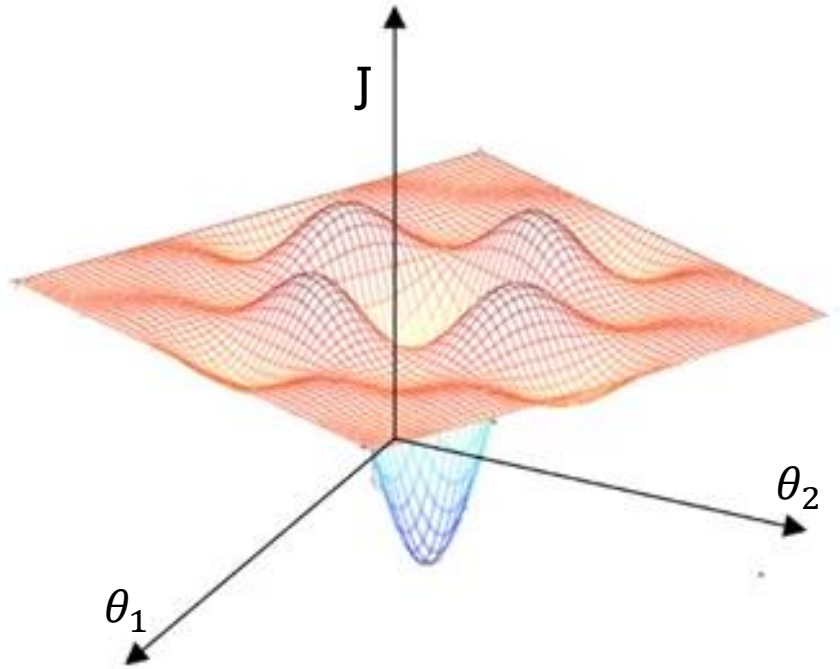
Javier Diaz Cely, PhD
UNIVERSIDAD ICESI

DESCENSO DE GRADIENTE

¿Problema de óptimos locales?

Se creería que uno de los problemas principales del gradient descent en el contexto del DL es el de encontrarse con una función de costo con muchos óptimos locales.

Para que haya un óptimo local, todas las derivadas parciales con respecto a cada uno de los parámetros (e.g. 1 millón) tienen que ser convexas en ese punto, lo que no es tan probable.



Andrew Ng, 2017

DESCENSO DE GRADIENTE

Repaso de derivadas

- $\frac{\partial}{\partial x} c = 0,$ por ejemplo, $\frac{\partial}{\partial x} 4 = 0$
- $\frac{\partial}{\partial x1}(c1 * x1 + c2 * x2) = c1,$ por ejemplo, $\frac{\partial}{\partial x}(3 * x + 4) = 3$
- $\frac{\partial}{\partial x}(x^p) = p * x^{p-1},$ por ejemplo, $\frac{\partial}{\partial x}(x^2) = 2 * x,$ $\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{x}\right) = \frac{\partial}{\partial x}(x^{-1}) = -x^{-2} = -\frac{1}{x^2}$
- $\frac{\partial}{\partial x}(e^x) = e^x,$ $\frac{\partial}{\partial x}(\log(x)) = \frac{1}{x}$

Regla de la cadena (*chain rule*), para composiciones de funciones

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

por ejemplo, $\frac{\partial}{\partial x}(3 * x + y)^2 = \frac{\partial}{\partial (3*x+y)}(3 * x + y)^2 * \frac{\partial}{\partial x}(3 * x + y) = 2 * (3 * x + y) * 3$

Javier Diaz Cely, PhD
UNIVERSIDAD ICESI

DESCENSO DE GRADIENTE

$$J(\theta_0, \theta_1, \dots, \theta_n) = \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{m}(\theta_0 + \theta_1 x_1^{(i)} + \cdots + \theta_n x_n^{(i)} - y^{(i)})^2$$

$$\left.\begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial \theta_0} J(\Theta)?? \\ \frac{\partial}{\partial \theta_1} J(\Theta)?? \end{array}\right\} \theta_i := \theta_i - \alpha \frac{\partial}{\partial \theta_i} J(\Theta)$$

→ Desarrollar analíticamente las soluciones

- Solución para la regresión lineal múltiple:
  - Para la intercepción: $\theta_0 := \theta_0 - \alpha \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\left(\theta_0 + \theta_1 x_1^{(i)} + \cdots + \theta_n x_n^{(i)} - y^{(i)}\right)$
  - Para los coeficientes: $\theta_j := \theta_j - \alpha \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\left(\theta_0 + \theta_1 x_1^{(i)} + \cdots + \theta_n x_n^{(i)} - y^{(i)}\right) * x_j^{(i)}$

Javier Diaz Cely, PhD
UNIVERSIDAD ICESI

TALLER GRADIENT DESCENT

Desarrollar el taller de gradient descent para la regresión lineal utilizando la librería numpy

REDES NEURONALES – APRENDIZAJE

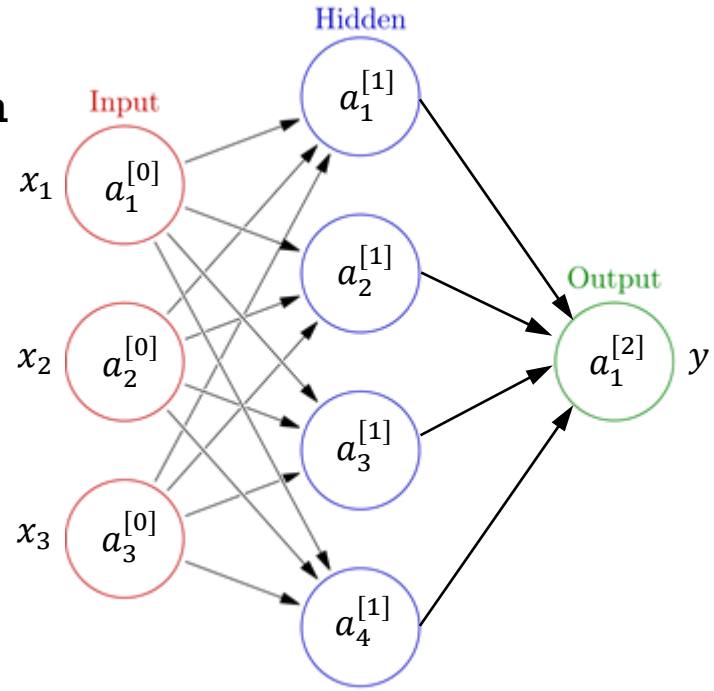
Representación vectorial de una red neuronal

- Permite remplazar ciclos costosos en los cómputos de feed-forward y back-propagation (importante en Big Data) por multiplicaciones matriciales
- GPUs diseñadas para ejecutar operaciones matriciales
- https://towardsdatascience.com/why-you-should-forget-for-loop-for-data-science-code-and-embrace-vectorization-696632622d5f
- La **inicialización** de los pesos asociados a las relaciones entre las neuronas de capas subsecuentes (los w) debe ser **aleatoria** (aunque se debe prevenir la saturación del gradiente). Si los pesos se inicializan en 0, los gradientes afectarían de la misma manera los pesos, actualizándolos de tal manera que serían siendo simétricas. Los sesgos (los b) si se pueden inicializar en 0, aunque también aleatoriamente.
- Los pesos (los w) deben ser "pequeños", para garantizar que los gradientes de las funciones de activación (e.g. sigmoide) sean significativos y el aprendizaje no sea lento. La magnitud de los pesos debe ser inversamente proporcional a la profundidad de la red.

REDES NEURONALES – APRENDIZAJE

Representación vectorial

- $a_k^{[l]}$, los resultados de la función de activación de la k-ésima neurona de la capa l, $\boldsymbol{a}^{[l]}$ es un array que agrupa las activaciones de todas las neuronas de la capa l. No se cuentan las activaciones de la primera capa, $\boldsymbol{a}^{[0]} = \boldsymbol{x}$, pues no tiene parámetros asociados.
- Análogamente a las activaciones, tenemos los pesos (matriz $\boldsymbol{W}^{[l]}$) y los sesgos de las capas (array $\boldsymbol{b}^{[l]}$, no se muestra en la imagen)
  - $\boldsymbol{W}^{[l]}$ es una matriz de tantas filas como neuronas tiene la capa L, y con tantas columnas como neuronas *de la capa L-1 (entradas capa L)*.
  - $\boldsymbol{b}^{[l]}$ es un vector de tantas filas como neuronas tiene la capa L y una columna
- Cada capa de neuronas pasa por dos fases
  - La fase de agregación: $\boldsymbol{z}^{[l]} = \boldsymbol{W}^{[l]} * \boldsymbol{a}^{[l-1]} + \boldsymbol{b}^{[l]}$, que se conoce como "**net input**"
  - La función de activación: $\boldsymbol{a}^{[l]} = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{z}^{[l]})$



(Las matrices se notan en mayúscula y los vectores en minúscula)

REDES NEURONALES – APRENDIZAJE

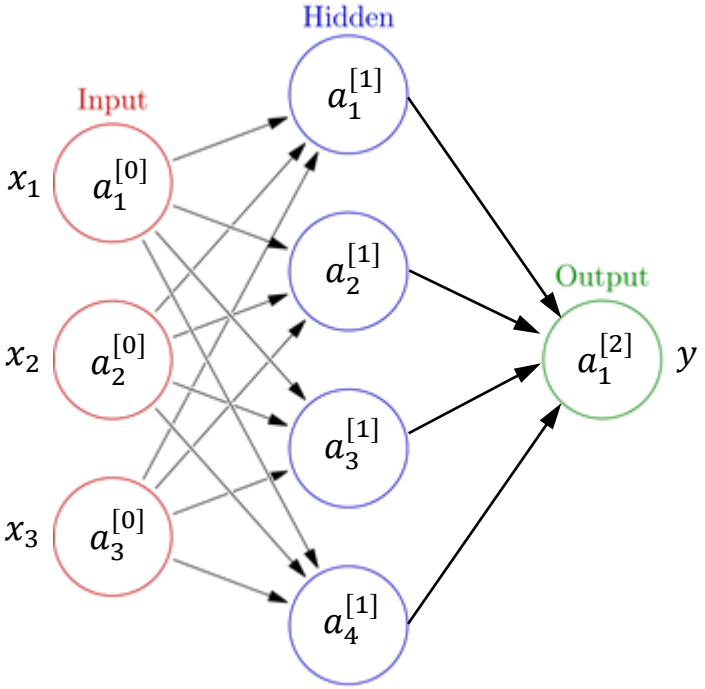
Feed Forward

- Por ejemplo, ¿cómo sería el cálculo del resultado de la aplicación de la función de activación $\boldsymbol{a}^{[1]}$ de la capa 1 y $\boldsymbol{a}^{[2]}$ de la capa 2?

$$\boldsymbol{a}^{[1]} = \begin{bmatrix} a_1^{[1]} \\ a_2^{[1]} \\ a_3^{[1]} \\ a_4^{[1]} \end{bmatrix} = g\left(\begin{bmatrix} z_1^{[1]} \\ z_2^{[1]} \\ z_3^{[1]} \\ z_4^{[1]} \end{bmatrix}\right) = g\left(\begin{bmatrix} w_{11}^{[1]} & w_{12}^{[1]} & w_{13}^{[1]} \\ w_{21}^{[1]} & w_{22}^{[1]} & w_{23}^{[1]} \\ w_{31}^{[1]} & w_{32}^{[1]} & w_{33}^{[1]} \\ w_{41}^{[1]} & w_{42}^{[1]} & w_{43}^{[1]} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1^{[0]} \\ a_2^{[0]} \\ a_3^{[0]} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} b_1^{[1]} \\ b_2^{[1]} \\ b_3^{[1]} \\ b_4^{[1]} \end{bmatrix}\right)$$

$$z_1^{[1]} = w_{11}^{[1]} * a_1^{[0]} + w_{12}^{[1]} * a_2^{[0]} + w_{13}^{[1]} * a_3^{[0]} + b_1^{[1]}$$

$$y = \boldsymbol{a}^{[2]} = \left[a_1^{[2]}\right] = g\left(\begin{bmatrix} w_{11}^{[2]} & w_{12}^{[2]} & w_{13}^{[2]} & w_{14}^{[2]} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1^{[1]} \\ a_2^{[1]} \\ a_3^{[1]} \\ a_4^{[1]} \end{bmatrix} + \left[b_1^{[2]}\right]\right)$$



Javier Diaz Cely, PhD
UNIVERSIDAD ICESI

REDES NEURONALES – APRENDIZAJE

Feed Forward para múltiples registros. El mismo proceso se generaliza:

- En vez de tener un vector $x^{(i)}$ con los valores de un registro, vamos a tener una matriz X con los vectores columnares del conjunto de instancias de aprendizaje, donde el número de columnas es m (el número de registros) y el número de filas es el número de inputs.
- La primera capa de neuronas pasa de producir un vector $z^{[1](i)}$ para cada registro i a producir una matriz $Z^{[1]} = W^{[1]}X + b^{[1]}$ para todos los registros.
- Igualmente pasamos de un vector de activación $a^{[1](i)}$ para cada registro a una matriz $A^{[1]} = g(Z^{[1]})$
- Y así sucesivamente para cada capa siguiente. Dada una capa $[l]$ con n neuronas y k de entrada:

$$A^{[l]} = \begin{bmatrix} a_1^{[l](1)} & a_1^{[l](2)} & \cdots & a_1^{[l](m)} \\ a_2^{[l](1)} & a_2^{[l](2)} & \cdots & a_2^{[l](m)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_n^{[l](1)} & a_n^{[l](2)} & \cdots & a_n^{[l](m)} \end{bmatrix} \quad \begin{matrix} \text{instancias} \rightarrow \\ \text{Neuronas de la capa L} \downarrow \end{matrix}$$

$$= g(Z^{[l]}) = g\left(\begin{bmatrix} w_{11}^{[l]} & w_{12}^{[l]} & \cdots & w_{1k}^{[l]} \\ w_{21}^{[l]} & w_{22}^{[l]} & \cdots & w_{2k}^{[l]} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ w_{n1}^{[l]} & w_{n2}^{[l]} & \cdots & w_{nk}^{[l]} \end{bmatrix} \begin{matrix} \\ \\ \\ \text{Neuronas de la capa L} \downarrow \end{matrix} \begin{bmatrix} a_1^{[l-1](1)} & a_1^{[l-1](2)} & \cdots & a_1^{[l-1](m)} \\ a_2^{[l-1](1)} & a_2^{[l-1](2)} & \cdots & a_2^{[l-1](m)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_k^{[l-1](1)} & a_k^{[l-1](2)} & \cdots & a_k^{[l-1](m)} \end{bmatrix} \begin{matrix} \text{Neuronas capa L-1} \rightarrow \\ \\ \\ \\ \end{matrix} \begin{matrix} \\ \text{instancias} \rightarrow \\ \\ \\ \\ \end{matrix} + \begin{bmatrix} b_1^{[l]} \\ b_2^{[l]} \\ \cdots \\ b_n^{[l]} \end{bmatrix} \right)$$

Javier Diaz Cely, PhD
UNIVERSIDAD ICESI

REDES NEURONALES – APRENDIZAJE

Función de costo. Una vez hemos llegado a la predicción final en la capa de salida, se calcula el error de predicción de la red (costo J), basado en los errores individuales de cada predicción (loss L, función dependiente del tipo de función de activación y del contexto), para poder propagarlo a las capas anteriores:

$$J\left(\boldsymbol{W}^{[1]}, \boldsymbol{b}^{[1]}, \dots, \boldsymbol{W}^{[nCapas]}, \boldsymbol{b}^{[nCapas]}\right) = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} L(\hat{\boldsymbol{Y}}, \boldsymbol{Y})$$

Binary cross-entropy loss: $L(\hat{\boldsymbol{y}}, \boldsymbol{y}) = -\frac{1}{N}\sum_i^N (y_i * \log(\hat{y}_i) + (1-y) * \log(1-\hat{y}_i))$

Categorical cross-entropy loss: $L(\hat{\boldsymbol{y}}, \boldsymbol{y}) = -\sum_i^N p(y_i) * \log(p(\hat{y}_i))$

Mean square loss: $L(\hat{\boldsymbol{y}}, \boldsymbol{y}) = \frac{1}{N}\sum_i^N (\hat{y}_i - y_i)^2$

Mean square logarithmic loss: $L(\hat{\boldsymbol{y}}, \boldsymbol{y}) = \frac{1}{N}\sum_i^N (\log(\hat{y}_i + 1) - \log(y_i + 1))^2$

Javier Diaz Cely, PhD
UNIVERSIDAD ICESI

TALLER ANN: FFWD DE XOR CON NUMPY

Para el problema de XOR con una sencilla red de una capa con 3 entradas, una capa escondida con 4 neuronas y una capa con 1 neurona de salida, utilizando funciones sigmoides:

- Desarrollar la función **feedForward(X, w1, w2, b1, b2)** que calcula el vector con las predicciones para el conjunto de registros de entrada. Retorna las activaciones de cada capa para cada registro de entrada para la capa escondida (a1) y para la capa de salida (a2=y_estimado)
- Desarrollar la función **costoGlobal(y_est, y)** que calcula el valor objetivo de minimización del aprendizaje, que recibe los vectores con las probabilidades calculadas por la predicción, los labels reales, y retorna el costo global

Javier Diaz Cely, PhD
UNIVERSIDAD ICESI

REFERENCIAS

- *Introduction to Statistical Learning with Applications in R (ISLR)*, G. James, D. Witten, T. Hastie & R. Tibshirani, 2014, Springer
- *Python Data Science Handbook,* Jake VanderPlas, 2017, O'Reilly
- *The Elements of Statistical Learning,* T. Hastie & R. Tibshirani, 2009, Springer
- *Python Machine Learning (2nd ed.),* Sebastian Raschka, 2017, Packt