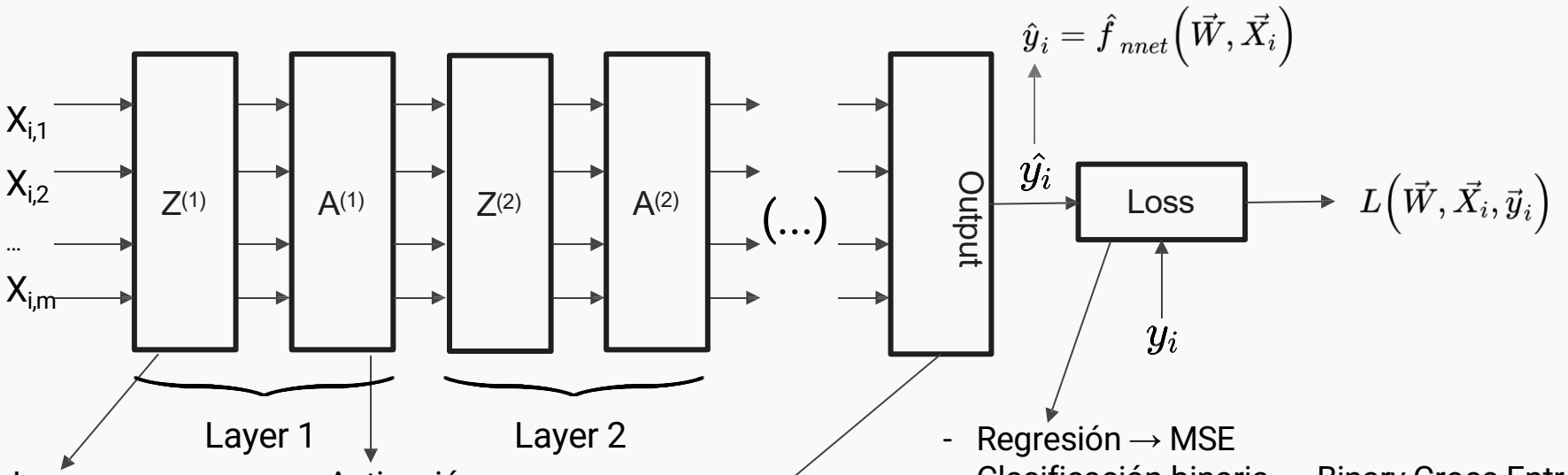
Aprendizaje Profundo

Facultad de Ingeniería
Universidad de Buenos Aires

Profesores:

Marcos Maillot
Gerardo Vilcamiza

Red neuronal feedforward con p layers



Layer:
- Lineal
- Recurrente
- Convolucional
- Attention

Activación:
- Sigmoid
- ReLU
- Tanh

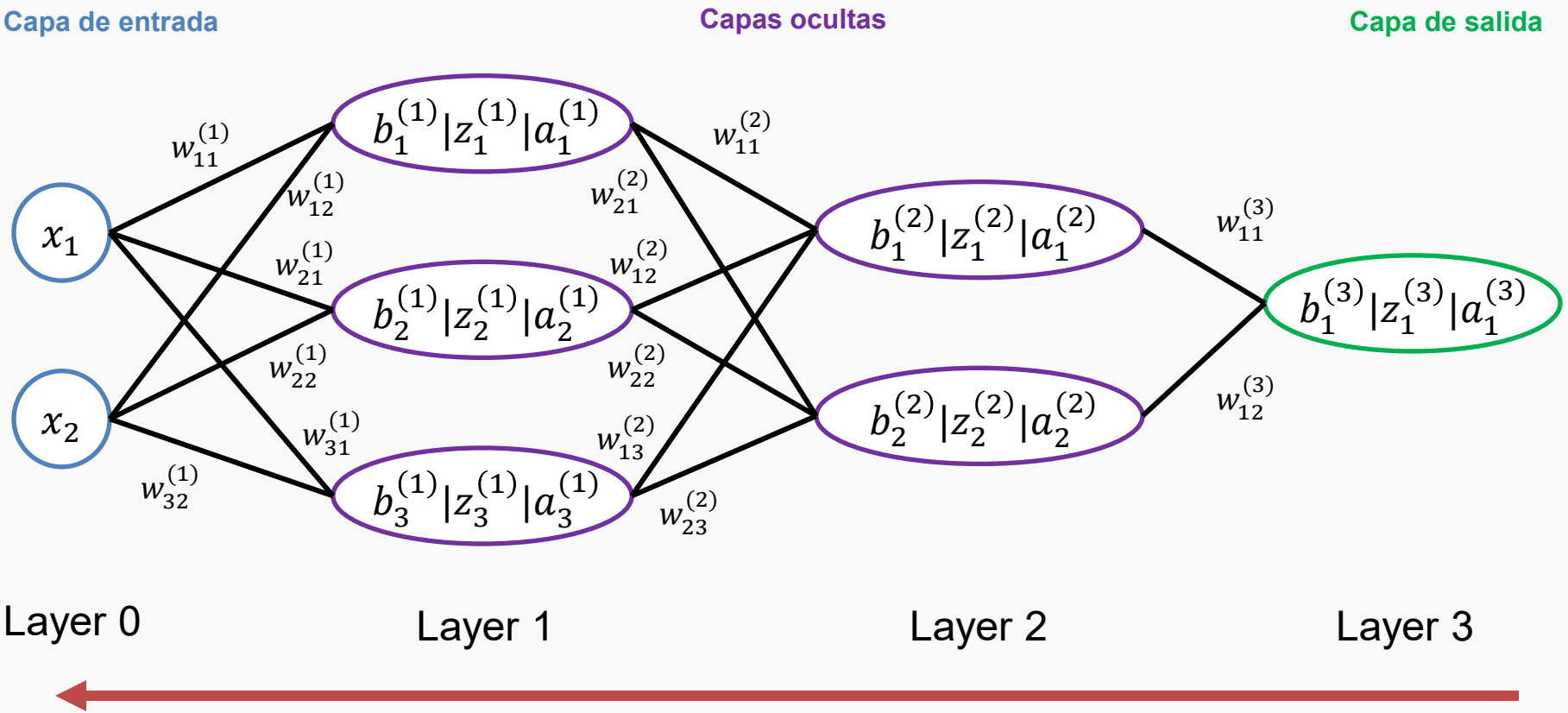
Optimización:
- GD, SGD, Mini-Batch
- AdaGrad, RMSprop, Adam (2014)

- Regresión → ∅
- Clasificación binaria → Sigmoid
- Clasificación multiclase → Softmax

- Regresión → MSE
- Clasificación binaria → Binary Cross Entropy
- Clasificación multiclase → Cross Entropy

Backpropagation

Backpropagation



Backpropagation

Regla de la cadena

$$\frac{\partial C}{\partial W^{(L)}} = \frac{\partial C}{\partial a^{(L)}} \cdot \frac{\partial a^{(L)}}{\partial z^{(L)}} \cdot \frac{\partial z^{(L)}}{\partial w^{(L)}} = (a_j^{(L)} - y_j) \cdot a^{(L)}(z^{(L)}) \cdot (1 - a^{(L)}(z^{(L)})) \cdot a_i^{(L-1)}$$

$$\frac{\partial C}{\partial b^{(L)}} = \frac{\partial C}{\partial a^{(L)}} \cdot \frac{\partial a^{(L)}}{\partial z^{(L)}} \cdot \frac{\partial z^{(L)}}{\partial b^{(L)}} = (a_j^{(L)} - y_j) \cdot a^{(L)}(z^{(L)}) \cdot (1 - a^{(L)}(z^{(L)})) \cdot 1$$

Error imputado a la neurona

$$\delta^{(L)} = \frac{\partial C}{\partial z^{(L)}} = \frac{\partial C}{\partial a^{(L)}} \cdot \frac{\partial a^{(L)}}{\partial z^{(L)}} = (a_j^{(L)} - y_j) \cdot a^{(L)}(z^{(L)}) \cdot (1 - a^{(L)}(z^{(L)}))$$

Backpropagation

Propagación del error hacia capas anteriores

$$\delta^{(L-1)} = \frac{\partial C}{\partial z^{(L-1)}} = \frac{\partial C}{\partial z_j^{(L)}} \cdot \frac{\partial z_j^{(L)}}{\partial a^{(L-1)}} \cdot \frac{\partial a^{(L-1)}}{\partial z^{(L-1)}}$$

$$\frac{\partial z_j^{(L)}}{\partial a_i^{(L-1)}} = w_{ji}^{(L)} = W^{(L)}$$

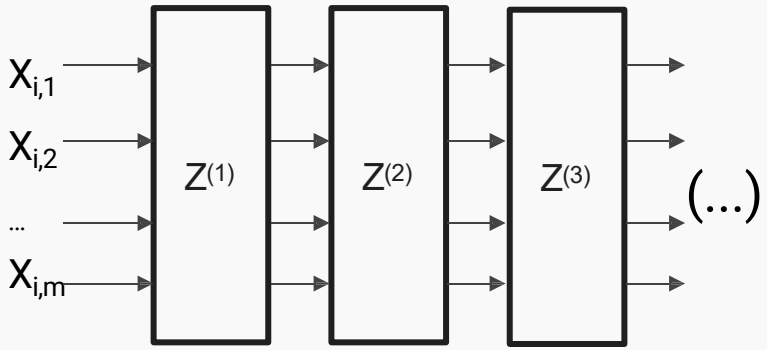
$$\frac{\partial C}{\partial z_j^{(L)}} = \delta_j^{(L)}$$

$$\delta_i^{(L-1)} = \delta_j^{(L)} \cdot W^{(L)} \cdot \frac{\partial a^{(L-1)}}{\partial z^{(L-1)}}$$

Funciones de activación

Funciones de activación

- **No usar función de activación**



$$\vec{Z}_i^{(1)} = \vec{W}^{(1)} \cdot \vec{X}_i + \vec{b}^{(1)}$$

$$\vec{Z}_i^{(2)} = \vec{W}^{(2)} \cdot \vec{Z}_i^{(1)} + \vec{b}^{(2)} = \vec{W}^{(2)} \cdot \left(\vec{W}^{(1)} \cdot \vec{X}_i + \vec{b}^{(1)} \right) + \vec{b}^{(2)}$$

$$= \left(\vec{W}^{(2)} \cdot \vec{W}^{(1)} \right) \cdot \vec{X}_i + \left(\vec{W}^{(2)} \cdot \vec{b}^{(1)} + \vec{b}^{(2)} \right)$$

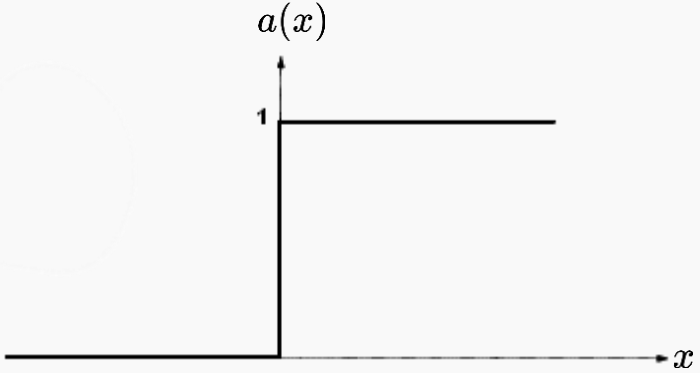
$$\vec{W}' \qquad \vec{b}'$$

$$\hat{y}_i = \vec{W}' \cdot \vec{X}_i + \vec{b}'$$ **Regresión Lineal**

¡Debo utilizar una función de activación no lineal!

Funciones de activación

Escalón



$$a(x) = \begin{cases} 1, & x > 0 \\ 0, & x \leq 0 \end{cases} \longrightarrow a'(x) = \begin{cases} 0, & x > 0 \\ 0, & x < 0 \\ ? & x = 0 \end{cases}$$

$$\partial L/\partial W_{1,1}^{(1)} = \partial L/\partial \hat{y}_i \cdot \partial \hat{y}_i/\partial a_{i,1}^{(1)} \cdot \partial a_{i,1}^{(1)}/\partial Z_{i,1}^{(1)} \cdot \partial Z_{i,1}^{(1)}/\partial W_{1,1}^{(1)}$$

$$\partial L/\partial W_{1,1}^{(1)} = 0$$

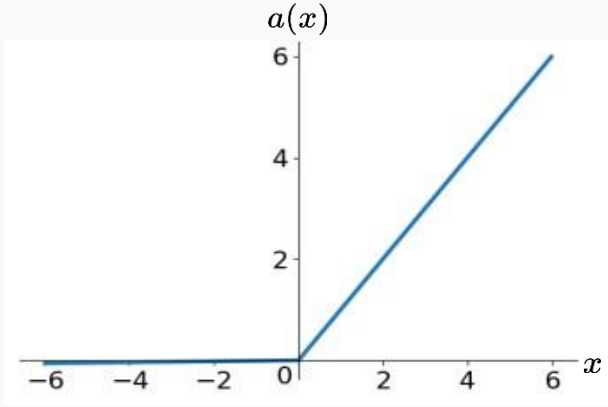
$$W_{1,1}^{(1)} \leftarrow W_{1,1}^{(1)} - \alpha \cdot \cancel{\partial L/\partial W_{1,1}^{(1)}}$$

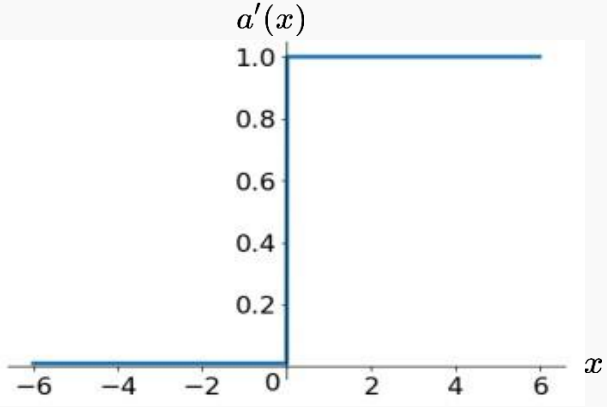
Me cancela el Backpropagation y el modelo deja de aprender

Funciones de activación

ReLU

- **Paso Forward y Backward extremadamente simples de calcular (entrenamiento muy rápido)**
- **Los gradientes negativos se anulan (problema de las neuronas muertas)**





$$a(x) = \begin{cases} x, & x > 0 \\ 0, & x \leq 0 \end{cases}$$

$$a(x) = \max(0, x)$$

$$a'(x) = \begin{cases} 1, & x > 0 \\ 0, & x \leq 0 \end{cases}$$

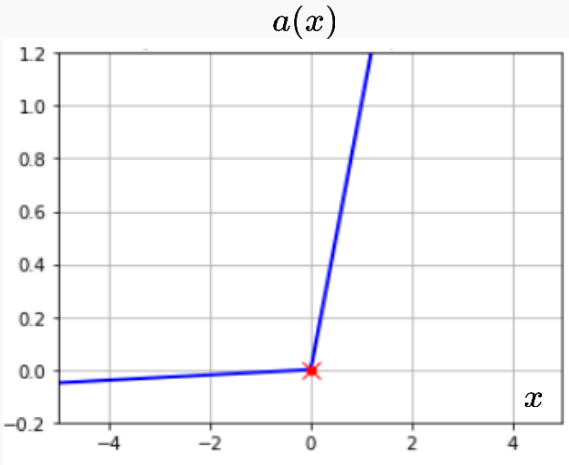
¿Cuándo usarla?

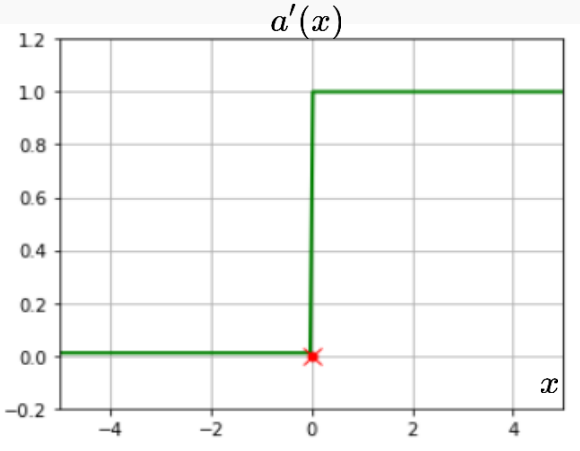
- **Para capas ocultas de redes profundas en la mayoría de tareas (buen punto de partida).**
- **Default seguro cuando no hay razón específica para otra.**

Funciones de activación

Leaky ReLU

- Permite gradientes pequeños en la zona negativa (evita neuronas muertas).
- Introduce un hiperparámetro (α) más que se debe configurar.





$$a(x) = \begin{cases} x, & x > 0 \\ \beta \cdot x, & x \leq 0 \end{cases}$$

$$a'(x) = \begin{cases} 1, & x > 0 \\ \beta, & x \leq 0 \end{cases}$$

$$a(x) = \max(\beta \cdot x, x)$$

$$\text{Valor típico } \beta = 0.01$$

¿Cuándo usarla?

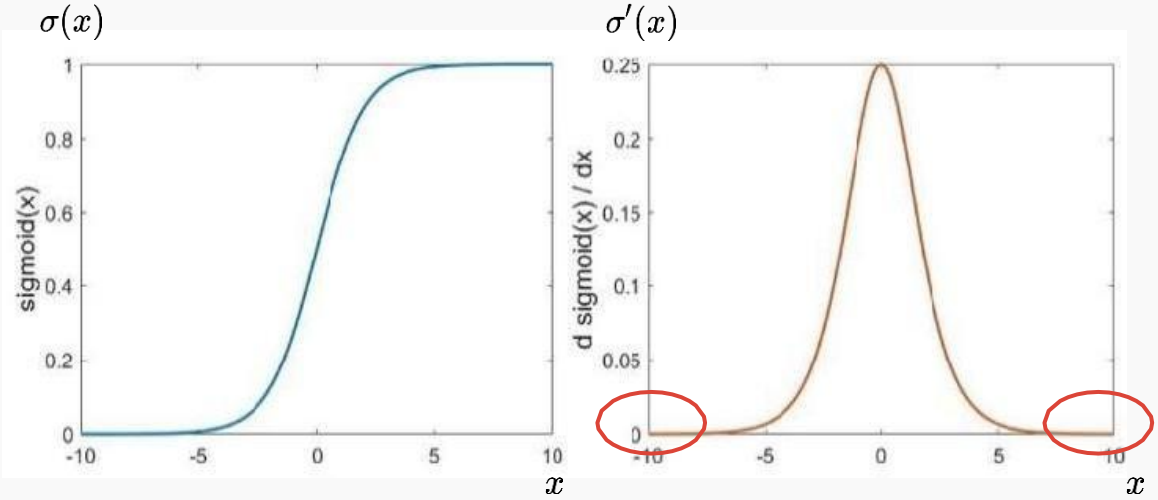
- En redes donde observas que muchas neuronas quedan inactivas con ReLU.
- En tareas donde los datos pueden tener un rango más amplio o valores negativos significativos (por ejemplo, series temporales o audio).

Funciones de activación

Sigmoid

- Interpretable como probabilidad.
- Normaliza la salida entre 0 y 1.
- Gradiente suave y efecto gradual

- Saturación: gradientes muy pequeños en extremos (vanishing gradient)
- Lento entrenamiento cuando se usa en capas ocultas.



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

¿Cuándo usarla?

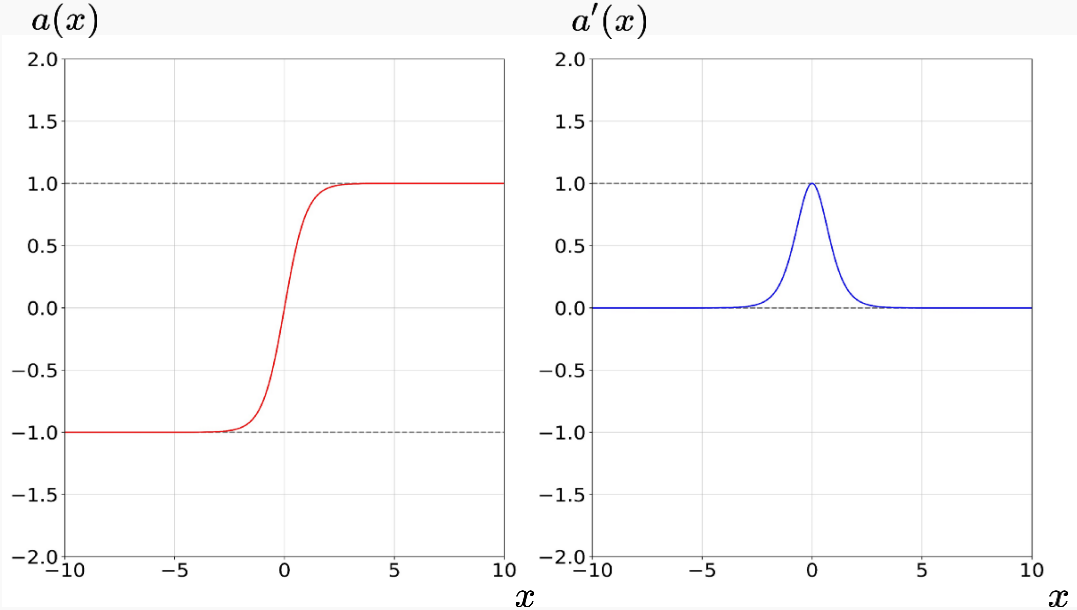
- En la capa de salida para modelos de clasificación binaria (solo dos clases).
- En redes pequeñas donde la estabilidad del gradiente no sea crítica.

Funciones de activación

Tanh

- Mantiene una salida acotada entre (-1, 1).
- Centrada en cero (más rápida que la sigmoide para capas ocultas).

- Saturación: gradientes muy pequeños en extremos (vanishing gradient)



$$\tanh(x) = 2 \cdot \sigma(x) - 1$$

$$1 - (\tanh(x))^2$$

¿Cuándo usarla?

- En capas ocultas de redes más pequeñas o RNNs cuando los datos tienen valores tanto positivos como negativos.
- En la capa de salida de modelos de regresión, cuando se desea valores entre -1 y 1 (rango simétrico).

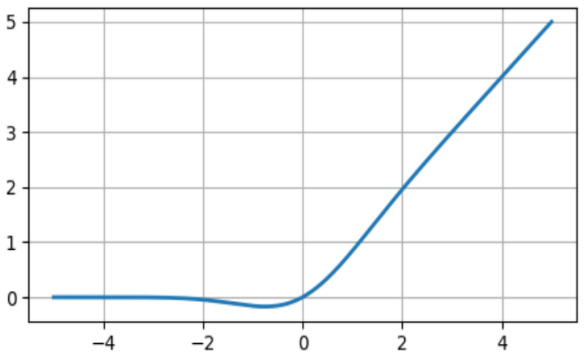
Funciones de activación

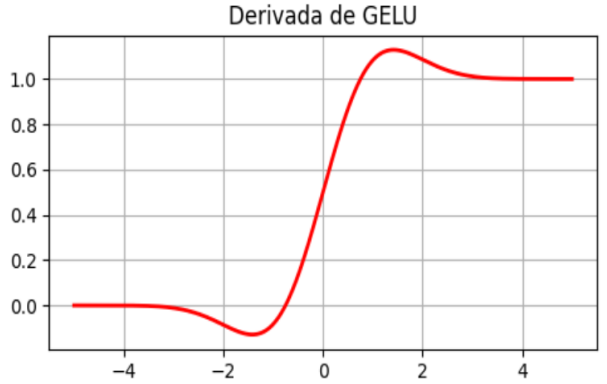
GELU

- Mezcla lo mejor de ReLU y funciones suaves.
- Más “probabilística”: permite pequeñas activaciones negativas con peso proporcional a su valor.
- Mejora la estabilidad en Transformers y modelos modernos.

- Computacionalmente más costosa y lenta.

$$GELU(x) = x \cdot \Phi(x)$$





$$GELU(x) = \frac{x}{2}\left[1 + \text{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{2}}\right)\right]$$

$$GELU'(x) = \Phi(x) + x \cdot \phi(x)$$

$$\text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2}\, dt$$

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2}$$

$$GELU(x) \approx 0.5x\left[1 + \tanh\left(\sqrt{\frac{2}{\pi}}(x + 0.044715x^3)\right)\right]$$

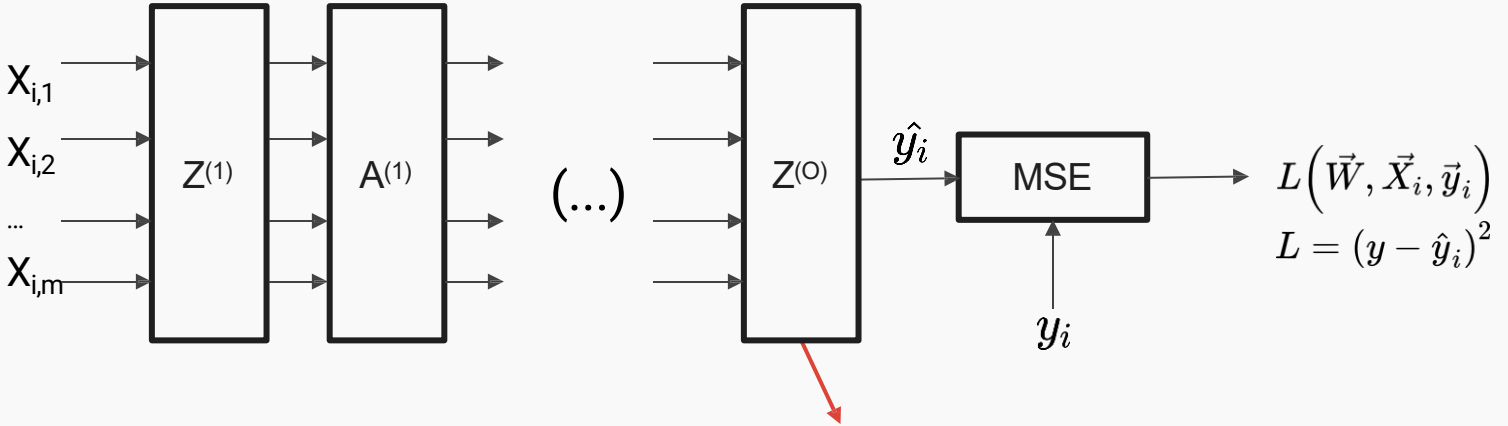
¿Cuándo usarla?

- En modelos modernos tipo Transformer, Vision Transformers, BERT, T5, etc.
- Cuando deseas suavidad y robustez numérica sin perder no linealidad.

Funciones de salida
Loss function

Funciones de salida + Loss function

- **Regresión**

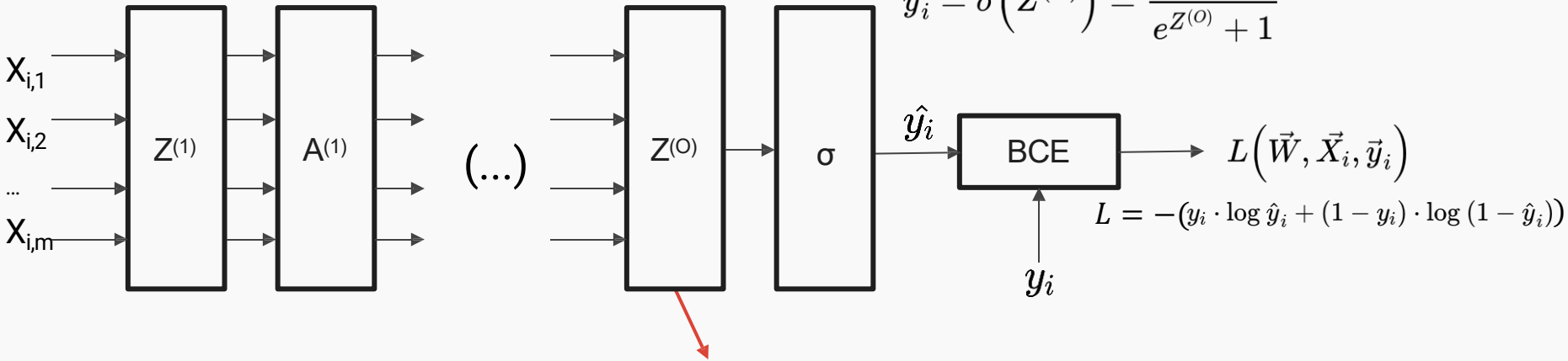


1 sola salida = 1 sola neurona

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

Funciones de salida + Loss function

- **Clasificación binaria**



$$\hat{y}_i = \sigma\left(Z^{(O)}\right) = \frac{e^{Z^{(O)}}}{e^{Z^{(O)}} + 1}$$

$$L = -(y_i \cdot \log \hat{y}_i + (1 - y_i) \cdot \log (1 - \hat{y}_i))$$

1 sola salida = 1 sola neurona

$$Z_i^{(o)} \in R$$

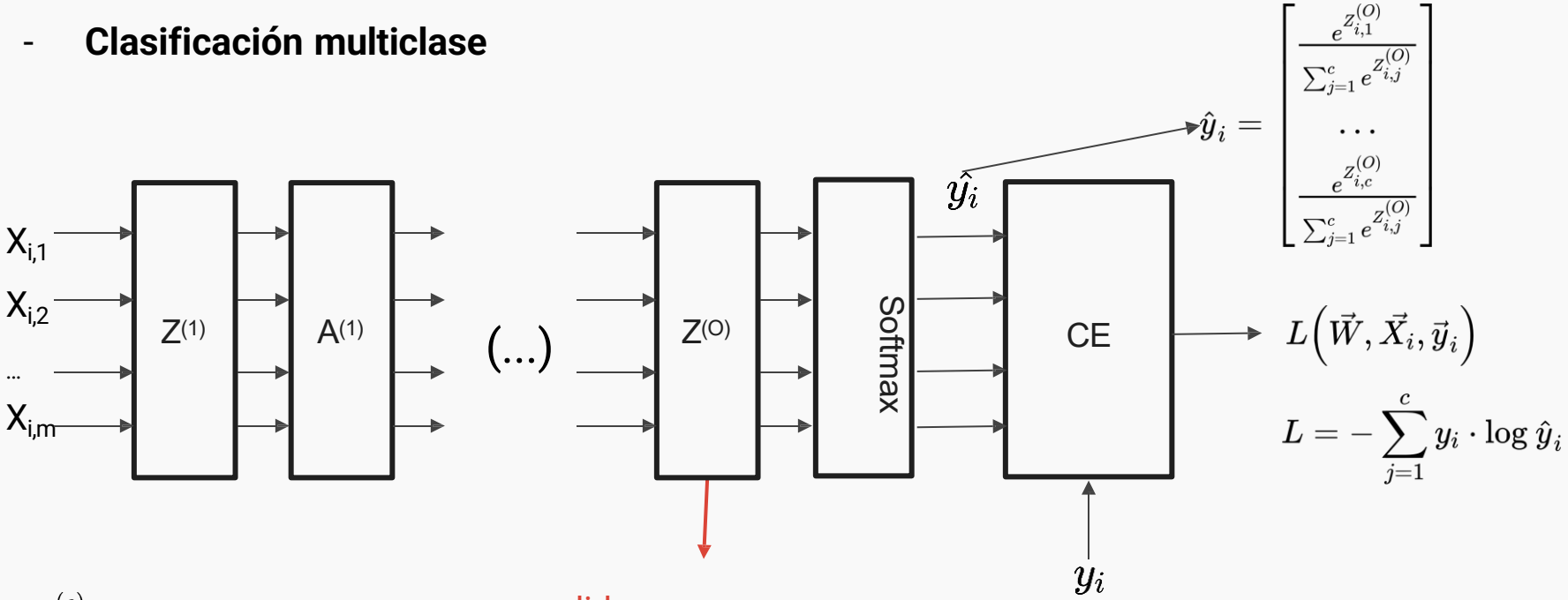
$$\hat{y}_i \in (0, 1) \rightarrow \text{probabilidad de clasificar } y_i = 1$$

$$y_i \in \{0, 1\}$$

$$L \in R$$

Funciones de salida + Loss function

- **Clasificación multiclase**



c salidas = c neuronas

$\vec{Z}_i^{(o)} \in R^{c\,x\,1}$,

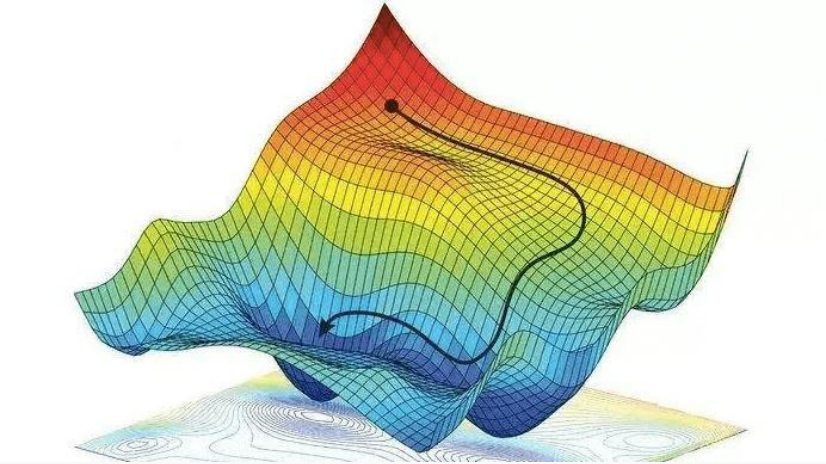
$\vec{\hat{y}}_i \in R^{c\,x\,1} / \hat{y}_{i,j} \in [0,1] \forall\, j \in \{1,..,c\} \rightarrow$ probabilidad de clasificar y_i en cada clase

$y_i \in R^{c\,x\,1} \rightarrow$ one hot encoding

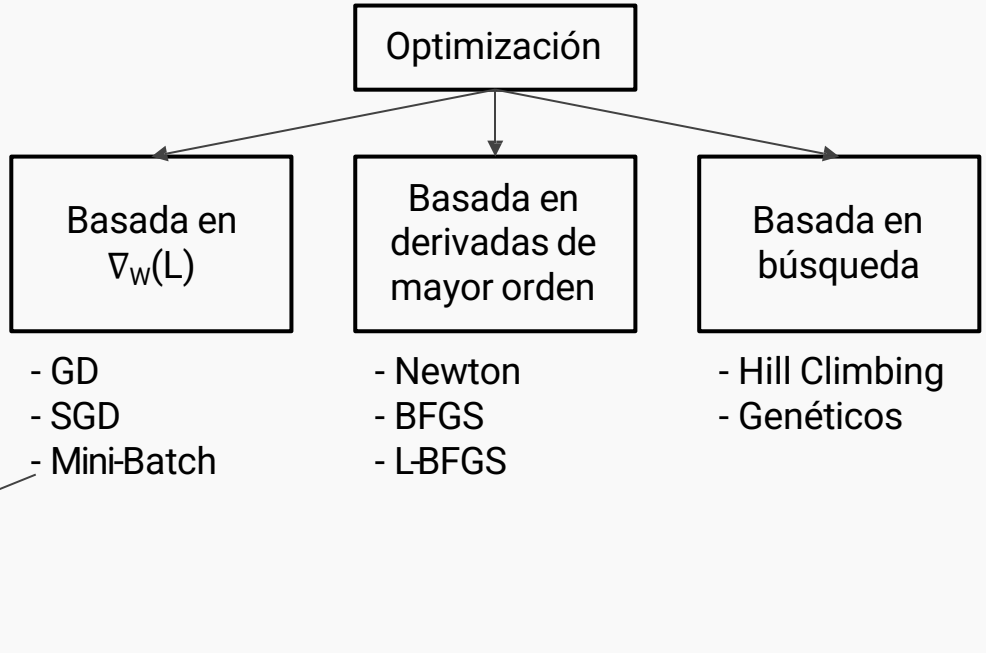
$L \in R$

Optimización

Optimización



Objetivo: encontrar el mínimo

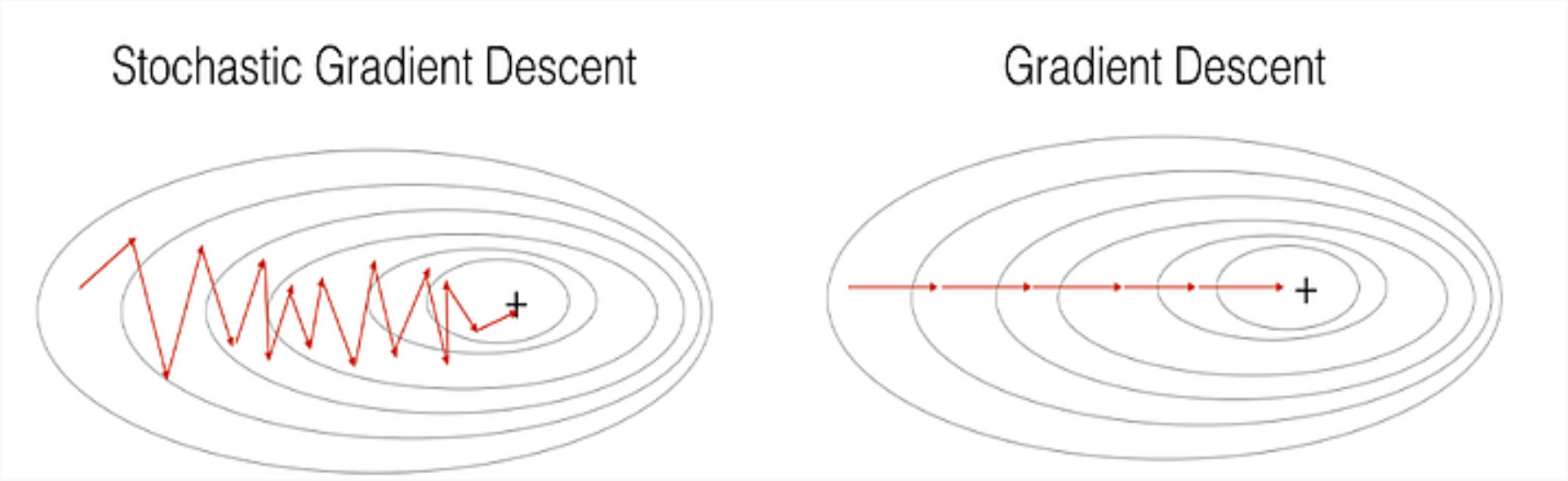


Optimización

$$\text{MSE} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y - \hat{y}_i)^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} l_i\left(\vec{W}, \vec{X}_i, y_i\right)$$

	GD	SGD	Mini-Batch
Cálculo del gradiente	$\nabla_{\vec{W}} = \vec{\nabla}\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} l_i\left(\vec{W}, \vec{X}_i, y_i\right)\right)$	$\nabla_{\vec{W}} = \vec{\nabla}\left(l_i\left(\vec{W}, \vec{X}_i, y_i\right)\right)$	$\nabla_{\vec{W}} = \vec{\nabla}\left(\frac{1}{b}\sum_{i=1}^{b} l_i\left(\vec{W}, \vec{X}_i, y_i\right)\right)$
# actualizaciones de W	n_epoch	n_epoch x n	n_epoch x (n / b)
Cantidad de memoria	Mucha memoria O(n)	Muy poca memoria O(1)	Intermedio O(b)
Velocidad cálculos	Muy rápido O(n_epoch)	Muy lento O(n_epoch x n)	Intermedio O(n_epoch x (n / b))

Optimizadores



Optimización

- **Mini-Batch**

for epoch in n_epoch:

  for b in batches: → # batches: n/b

  * Forward: $\vec{\hat{y}}_b = \hat{f}_{nnet}\left(\vec{X}_b\right)$ → $\vec{X}_b \in R^{b\,x\,m}$

  * Error $\rightarrow L\left(\vec{y}_b, \vec{\hat{y}}_b\right)$

  * Backward $\rightarrow \vec{\nabla}_{\vec{W}} = \frac{1}{b}\sum_{i=1}^{b} l_i(y_i, \hat{y}_i)$

  * $\vec{W} \leftarrow \vec{W} - \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{W}}$

- ¿Cufintas veces actualizo W por epoch? n/b veces

- ¿Cufintas veces actualizo W en total? n_epoch*n/b

- ¿Hiperparfimetros?
  n_epoch, b, α

Optimización

- **Mini-Batch + Momento de primer orden**

for epoch in n_epoch:
  for b in batches:

* Forward: $\vec{\hat{y}}_b = \hat{f}_{nnet}\left(\vec{X}_b\right)$
* Error $\rightarrow L\left(\vec{y}_b, \vec{\hat{y}}_b\right)$
* Backward $\rightarrow \vec{\nabla}_{\vec{W}} = \frac{1}{b}\sum_{i=1}^{b} l_i(y_i, \hat{y}_i)$
* $\vec{v} \leftarrow \xi \cdot \vec{v} + \alpha \cdot \vec{\nabla}_{\vec{W}}$ $\longrightarrow \begin{cases} \xi = 0 & \Longrightarrow \vec{V} = \alpha \cdot \vec{\nabla}_{\vec{W}} \rightarrow \text{Mini-Batch} \\ \xi > 0 & \rightarrow \text{Mini-Batch con momento de } 1^{\text{er}} \text{ orden} \end{cases}$
* $\vec{W} \leftarrow \vec{W} - \vec{v}$

- ¿Hiperparfimetros? n_epoch, b, ξ, α

Optimización

- **Adam (2014)**

for epoch in n_epoch:

for b in batches:

* Forward: $\vec{\hat{y}}_b = \hat{f}_{nnet}\left(\vec{X}_b\right)$
* Error $\rightarrow L\left(\vec{y}_b, \vec{\hat{y}}_b\right)$
* Backward $\rightarrow \vec{\nabla}_{\vec{W}} = \frac{1}{b}\sum_{i=1}^{b} l_i(y_i, \hat{y}_i)$
* $\vec{v} \leftarrow p_1 \cdot \vec{v} + (1 - p_1) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{W}}$ → Momento 1er orden
* $\vec{r} \leftarrow p_2 \cdot \vec{r} + (1 - p_2) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{W}} \odot \vec{\nabla}_{\vec{W}}$ → Momento 2do orden
* $\vec{\triangle} \leftarrow -\frac{\alpha}{\sqrt{\vec{r}}} \cdot \vec{v}$
* $\vec{W} \leftarrow \vec{W} + \vec{\triangle}$

Hadamard product
(element-wise product)

- ¿Hiperparfimetros? n_epoch, b, p_1, p_2, α