# Tema 2: Fundamentos de las redes neuronales profundas

**Aprendizaje Profundo**

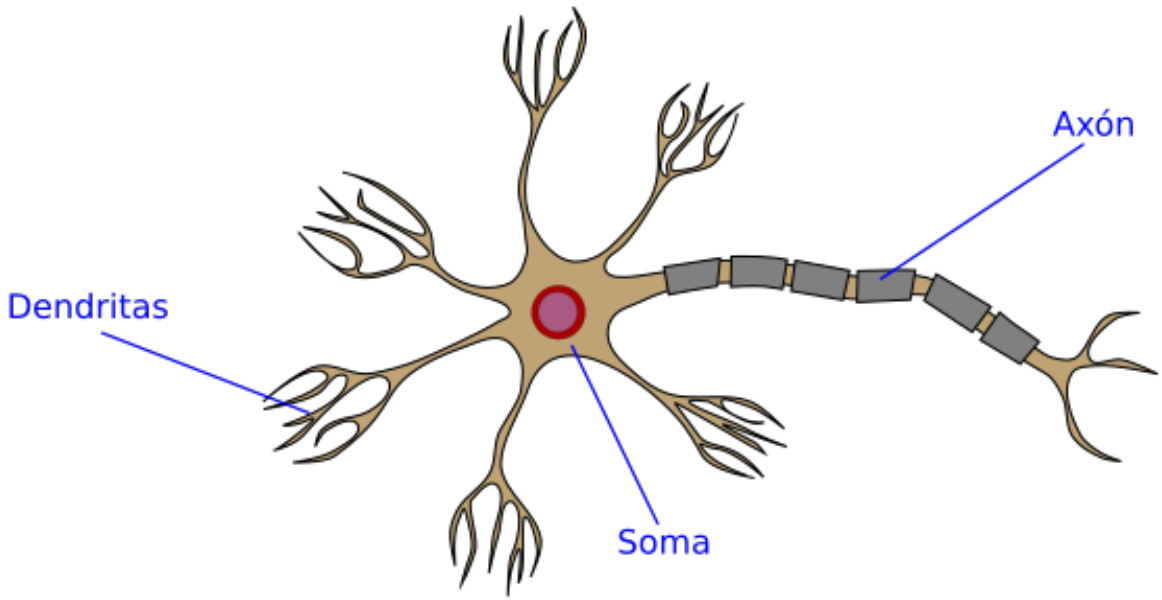
Grado en Ingeniería y Ciencia de datos (Universidad de Oviedo)

Pablo González, Pablo Pérez
{gonzalezgpablo, pabloperez}@uniovi.es
Centro de Inteligencia Artificial, Gijón

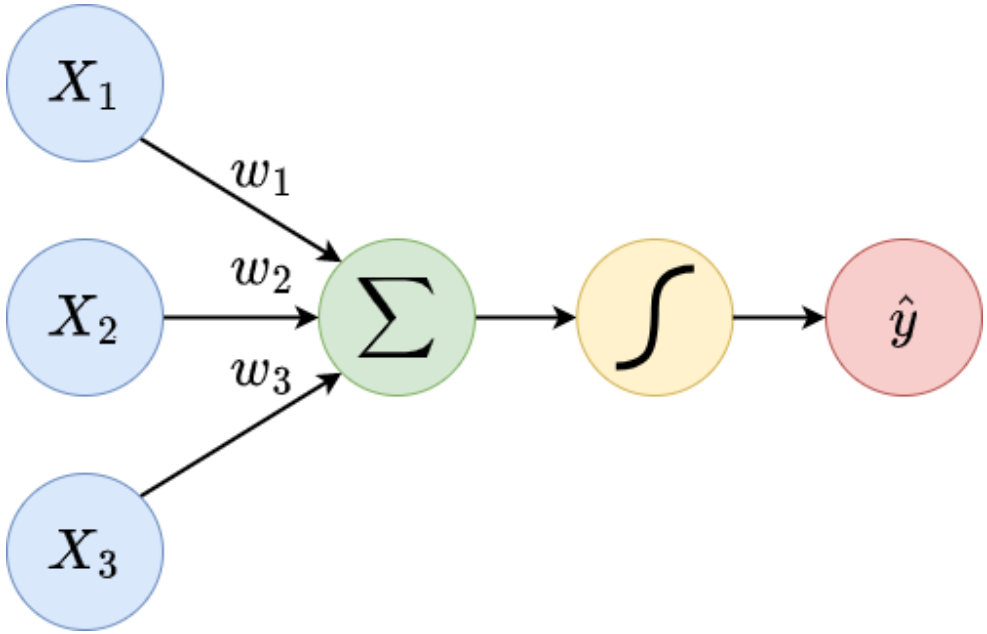
# El perceptrón

# El perceptrón: la pieza clave de una red neuronal

- El perceptrón es la pieza clave de cualquier red neuronal y por supuesto del aprendizaje profundo.
- Fue introducido en 1957 por Frank Rosenblatt.
- Es un modelo motivado por la biología



# El perceptrón: la pieza clave de una red neuronal

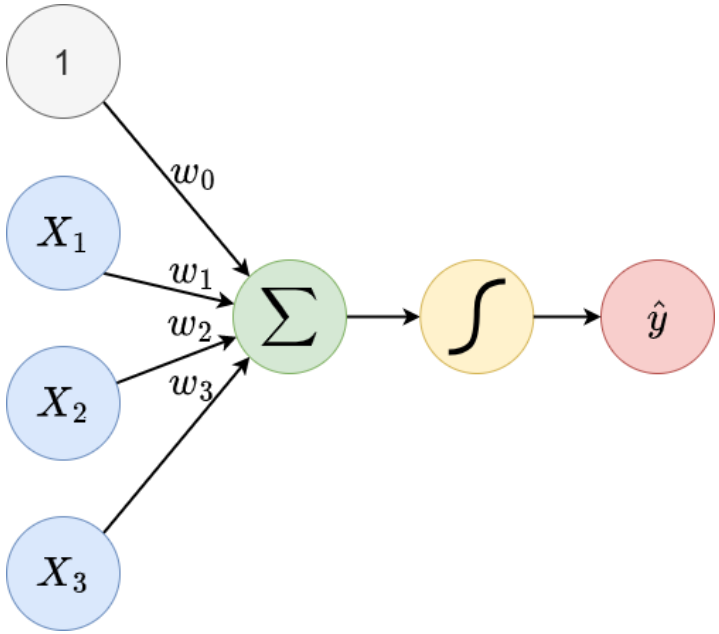



## Salida de una perceptrón

Para evaluar la salida $\hat{y}$ de un perceptrón, multiplicamos las entradas $X$ por los pesos $w$ y aplicamos la función de activación $g$.

$$\hat{y} = g\left(\sum_{i=1}^{n} x_i w_i\right)$$

# El perceptrón: la pieza clave de una red neuronal

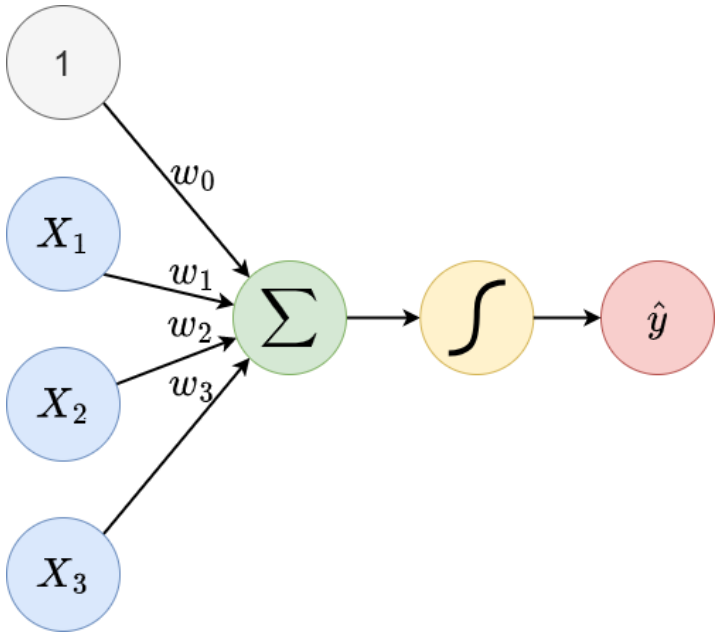



## Bias

Un perceptrón incluye además un peso extra $w_0$, correspondiente al **bias**, que permite ajustar el umbral de activación del perceptrón.

$$\hat{y} = g\left(w_0 + \sum_{i=1}^{n} x_i w_i\right)$$

# El perceptrón: la pieza clave de una red neuronal




## Vista con operaciones matriciales

La evaluación de un perceptrón puede reescribirse utilizando vectores en lugar del sumatorio.

$$\hat{y} = g(w_0 + X^T W)$$

donde $W$ es el vector con pesos y $X$ es un vector con las entradas.

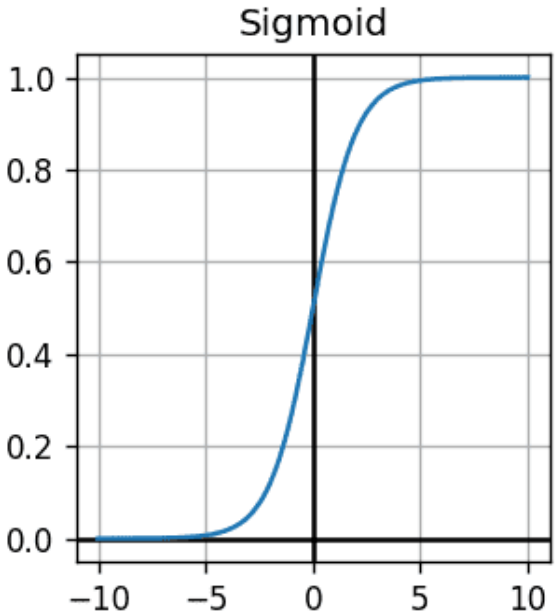
# El perceptrón: Función de activación

La función de activación $g$ juega un papel clave en el perceptrón

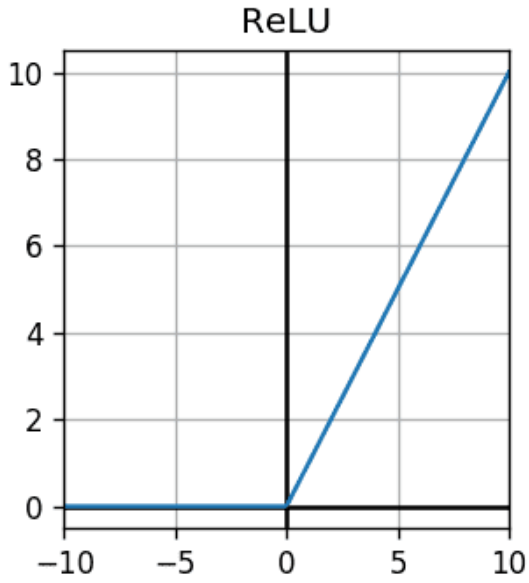
- La función de activación es una función matemática que se utiliza en un perceptrón para determinar si una neurona debe activarse o no.
- La función de activación toma la suma ponderada de las entradas y las pasa a través de una función **no lineal** para producir la salida de la neurona.
- La función de activación introduce **no linealidad** en el modelo, lo que permite al perceptrón aprender **patrones más complejos** en los datos de entrada.
- Hay varias funciones de activación comunes utilizadas en los perceptrones, como la función escalón, la función sigmoide y la función ReLU.

# El perceptrón: Función de activación

Algunos ejemplos de funciones de activación



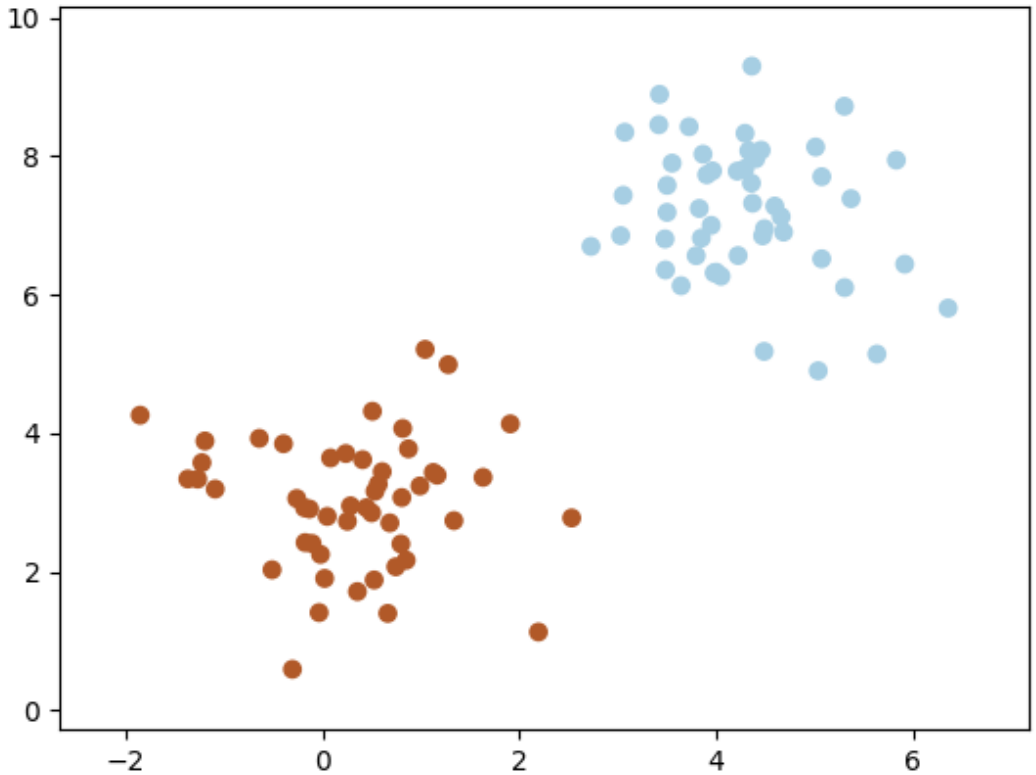

$$g(z) = \frac{1}{1+e^{-z}}$$




$$g(z) = max(0, z)$$

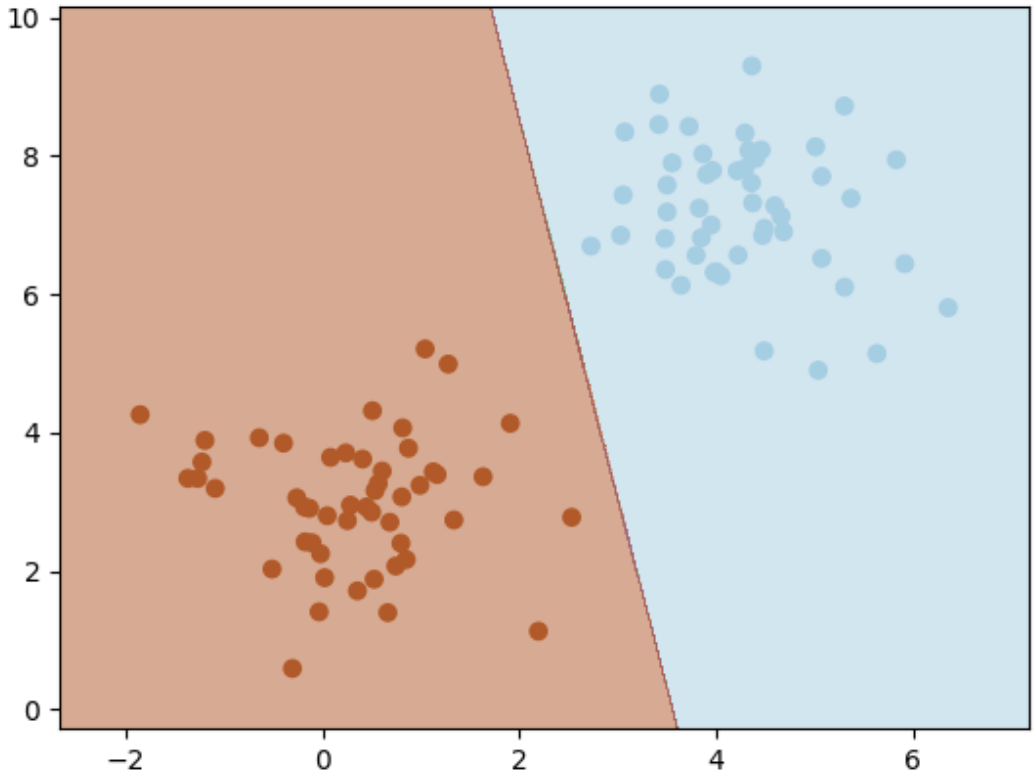
# ¿Cuál es la utilidad de la función de activación?

Qué sucede si no incluimos una función de activación. El perceptrón sería capaz de resolver problemas **linealmente separables**.



# ¿Cuál es la utilidad de la función de activación?

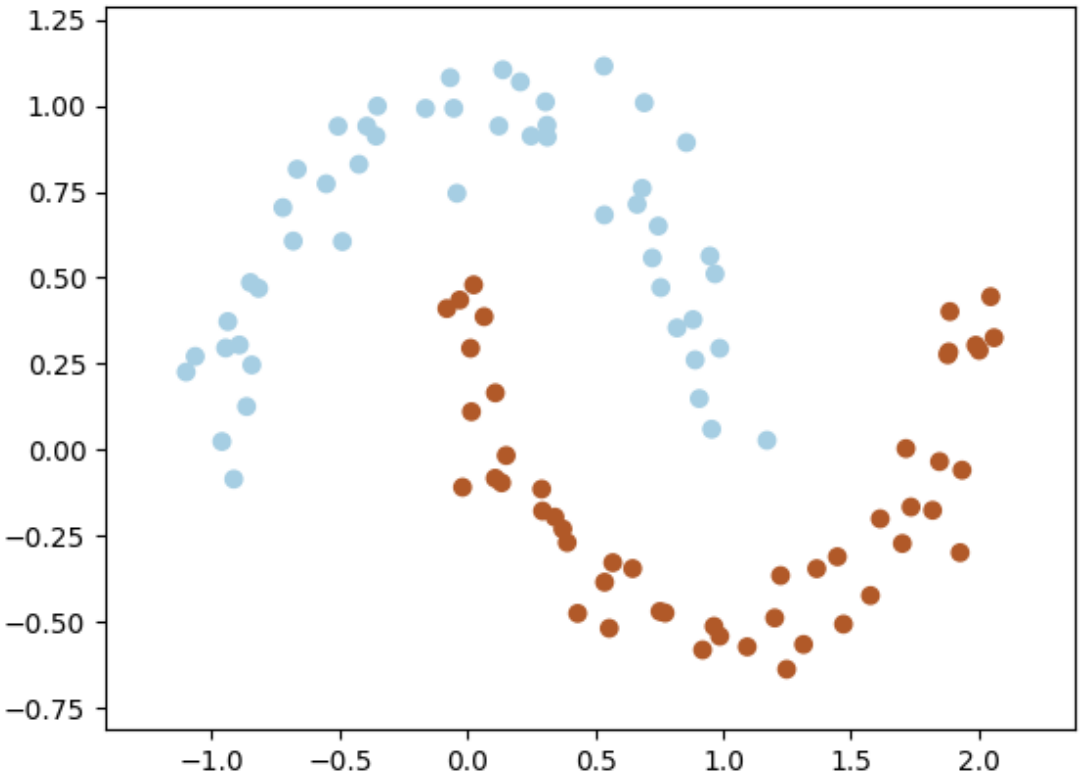
Qué sucede si no incluimos una función de activación. El perceptrón sería capaz de resolver problemas **linealmente separables**.




$$-1.15x_1 - 0.21x_2 + 4.1 = 0$$

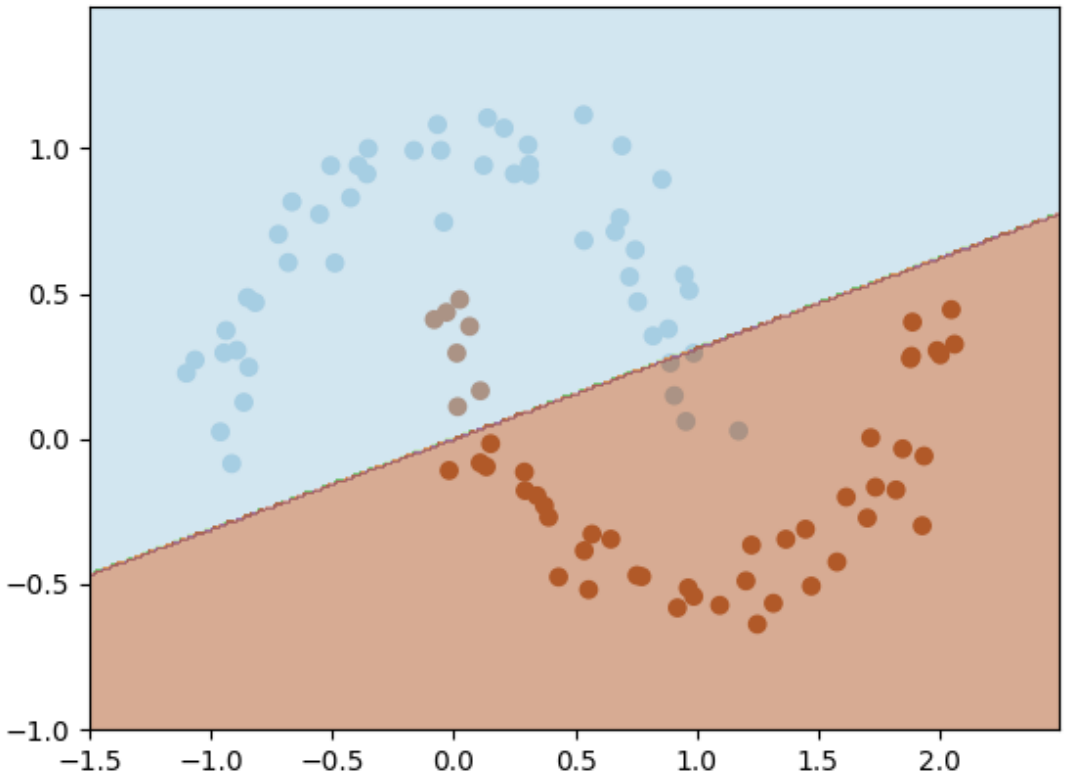
# ¿Cuál es la utilidad de la función de activación?

¿Qué sucede si el problema **no es linearmente separable**?



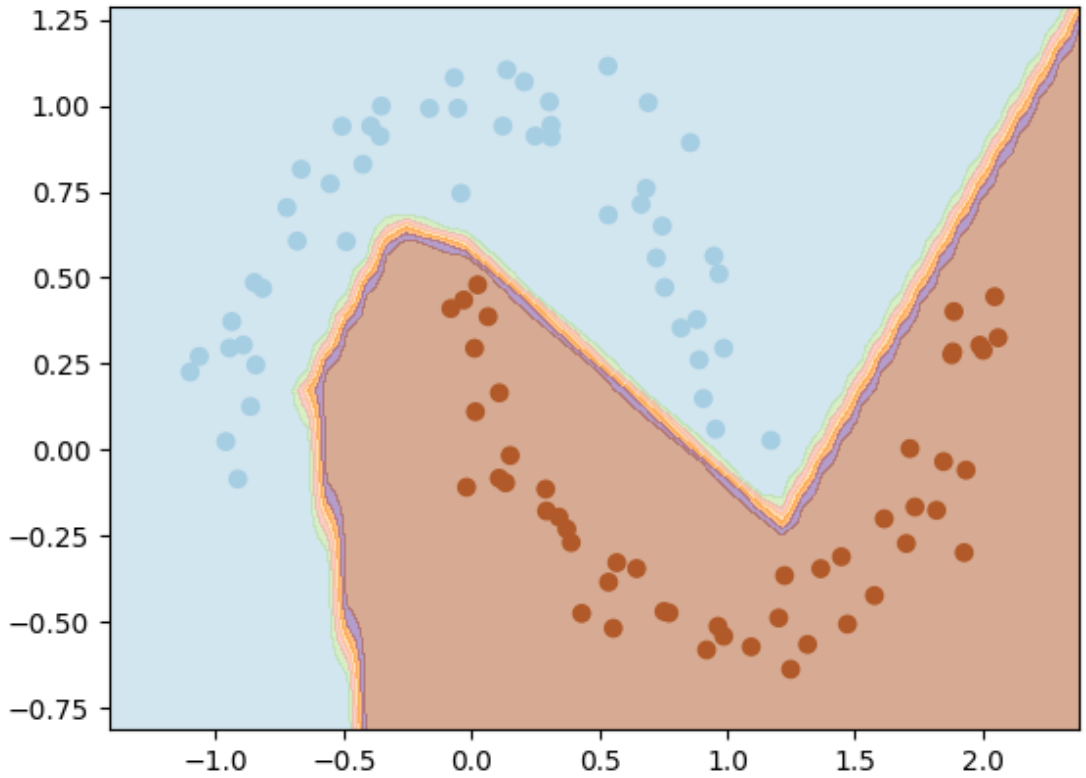
# ¿Cuál es la utilidad de la función de activación?

No es posible encontrar un plano que sea capaz de separar las dos clases de manera adecuada.



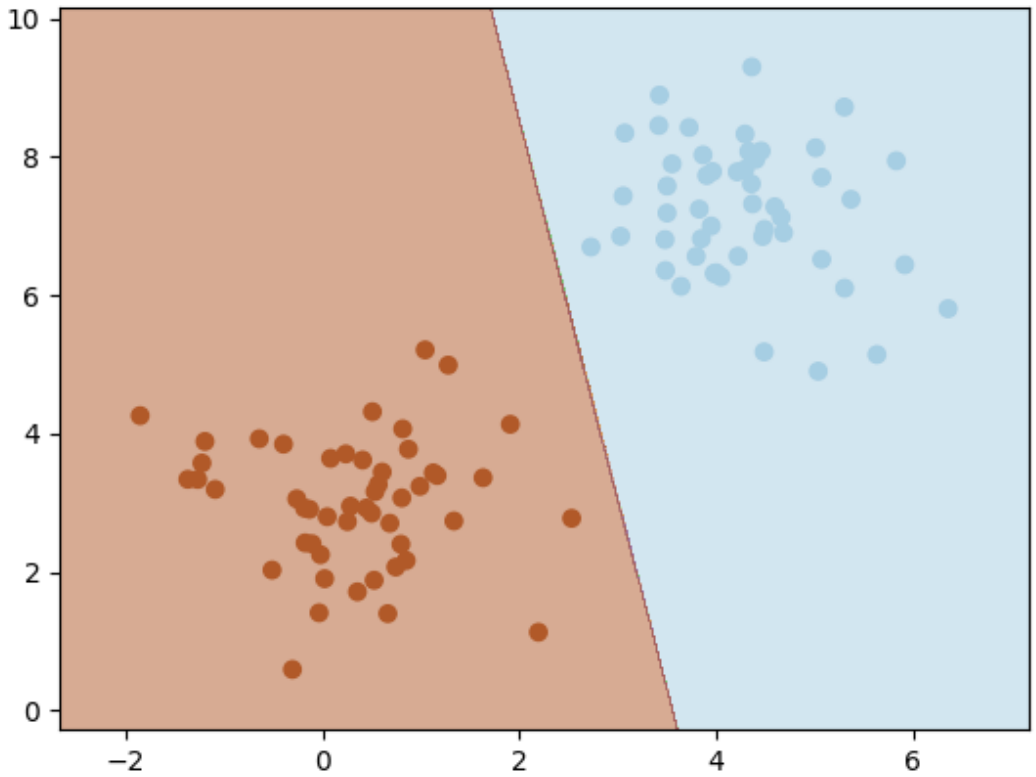
# ¿Cuál es la utilidad de la función de activación?

Gracias a las **funciones de activación no lineales** y la unión de **varias capas de perceptrones** es posible aproximar funciones de este tipo.



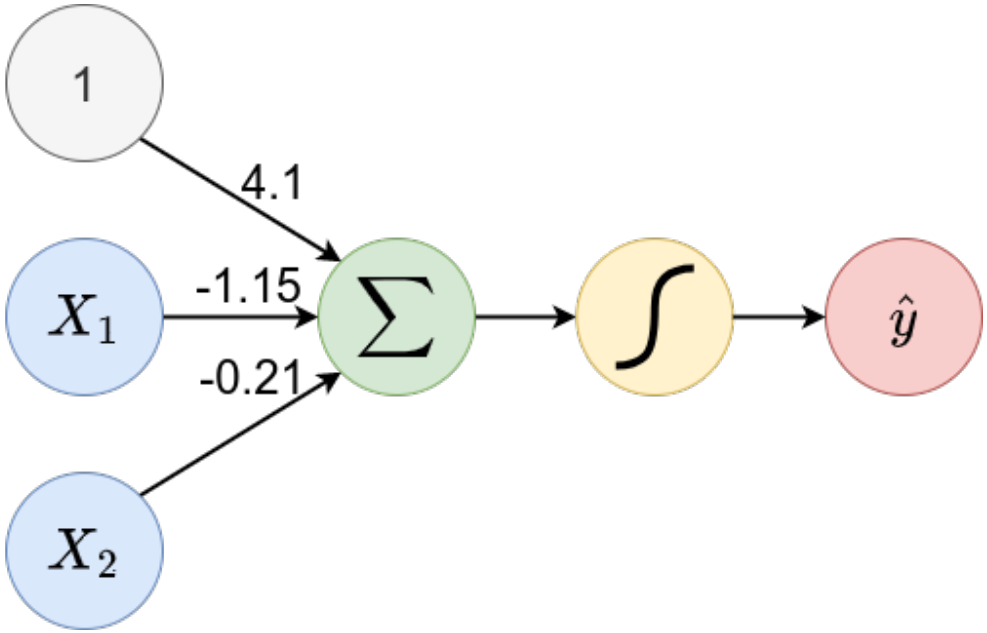
# Ejemplo con un perceptrón

Dado el ejemplo anterior, con los datos separables, el modelo obtenido sería el siguiente: $\hat{y} = g(-1.15x_1 - 0.21x_2 + 4.1)$



# Ejemplo con un perceptrón

El perceptrón tendría los siguientes pesos:




$$w_0 = 4.1 \text{ y } W = \begin{bmatrix} -1.15 \\ -0.21 \end{bmatrix}$$

$$\hat{y} = g(z) = g(w_0 + X^T W) = g\left(4.1 + \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} -1.15 \\ -0.21 \end{bmatrix}\right)$$

# Ejemplo con un perceptrón

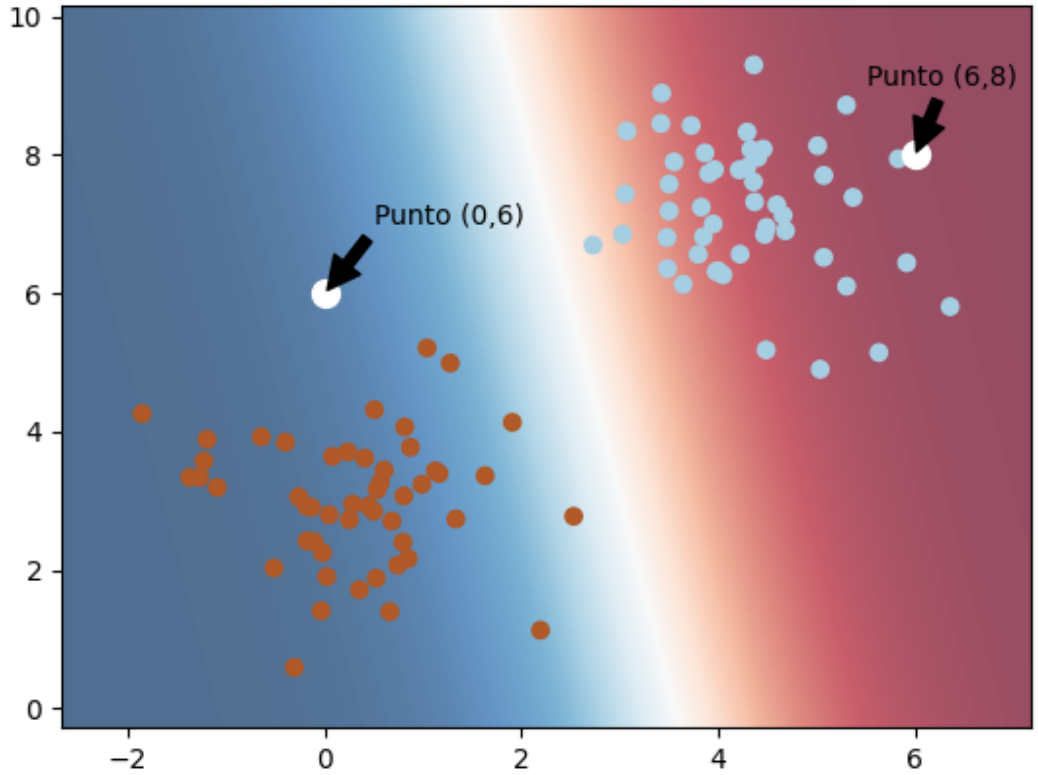
Asumiendo que $g$ es la función sigmoide y que el punto que queremos evaluar es el (0,6):

$$\hat{y} = g\left(4.1 + \begin{bmatrix}0\\6\end{bmatrix}^T \begin{bmatrix}-1.15\\-0.21\end{bmatrix}\right) = g(4.1 + 6 * (-0.21)) = g(2.84) = 0.94$$

Con la función **sigmoide**, y cuando esta está en la capa de salida de la red, podemos convertir a una probabilidad la salida del perceptrón. Si $z < 0$, entonces $\hat{y} < 0.5$; si $z > 0$, entonces $\hat{y} > 0.5$

# Ejemplo con un perceptrón

Valores de las probabilidades para todo el espacio de entrada:



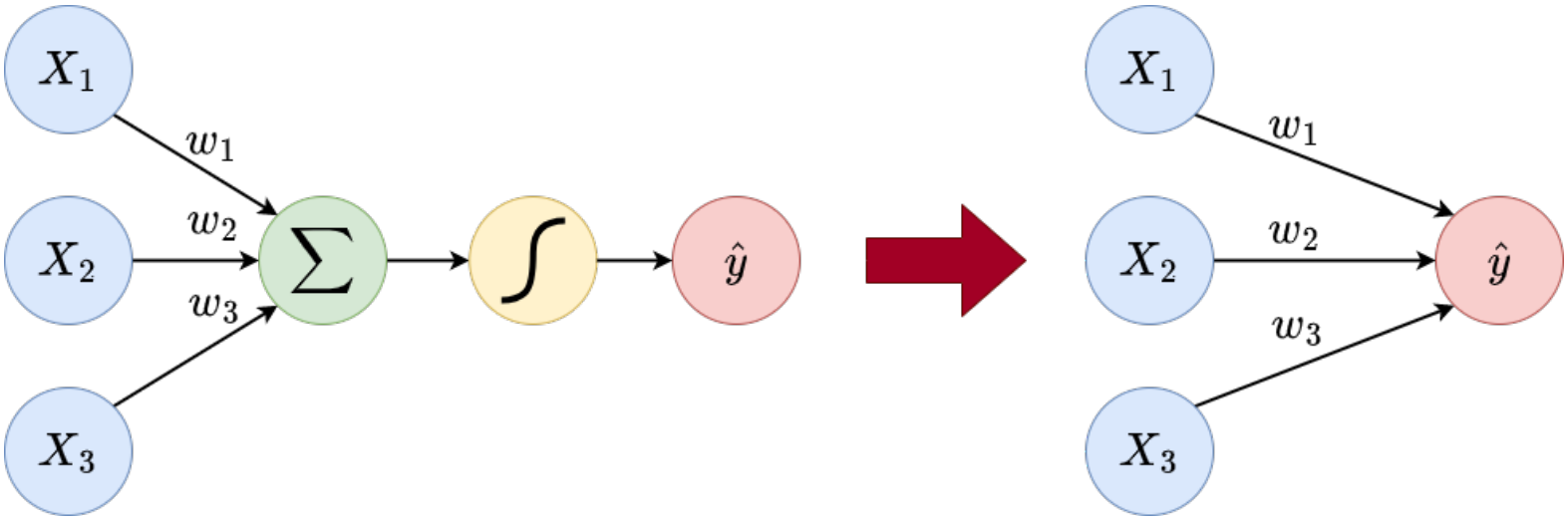

- Punto (0,6), $\hat{y} = 0.94$
- Punto (6,8), $\hat{y} = 0.01$ (realiza tú mismo el cálculo)

# Redes totalmente conectadas

# Uniendo varios perceptrones

Un solo perceptrón **está muy limitado** a funciones simples y lineales. La verdadera potencia de las redes neuronales viene al **unir varios perceptrones** en una misma red.

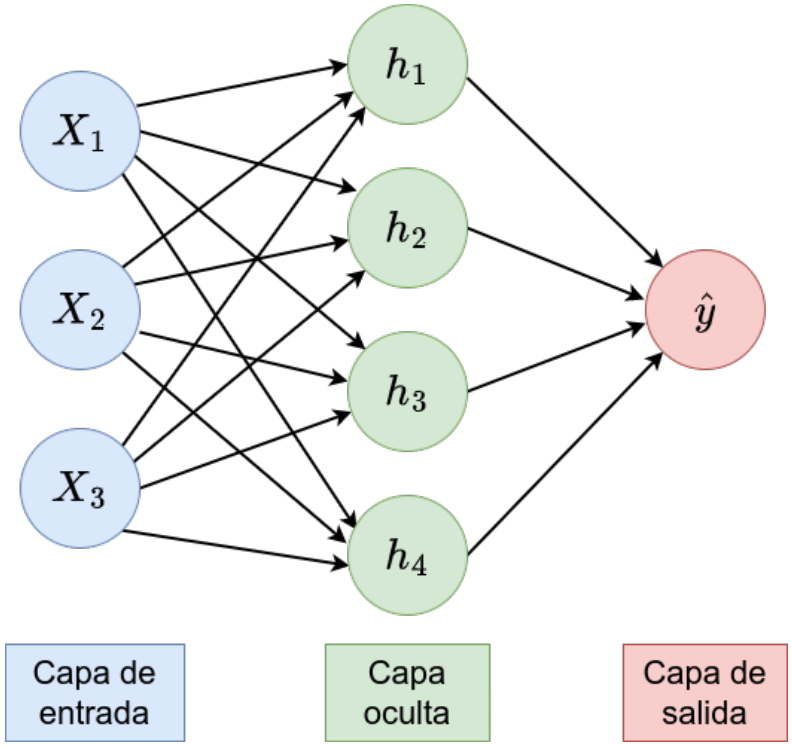
Antes de unir varios perceptrones vamos a **simplificar** su representación, para que los diagramas sean legibles:



# Uniendo con varios perceptrones

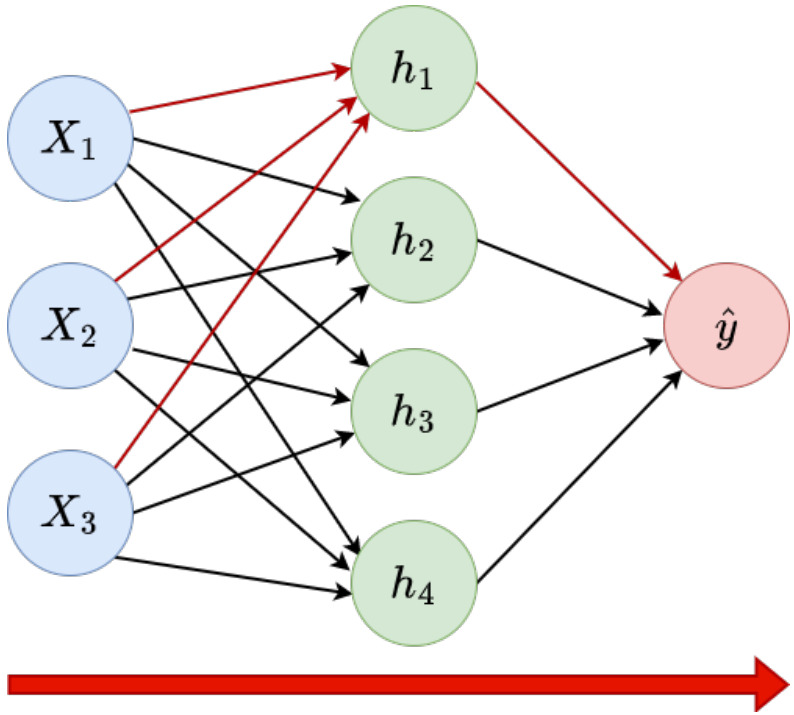
Las manera más común de unir varios perceptrones son con **capas totalmente conectadas**.

- Cada capa puede tener varias neuronas.
- Podemos utilizar varias capas, conectando unas con otras.



# Uniendo con varios perceptrones (1 capa oculta)

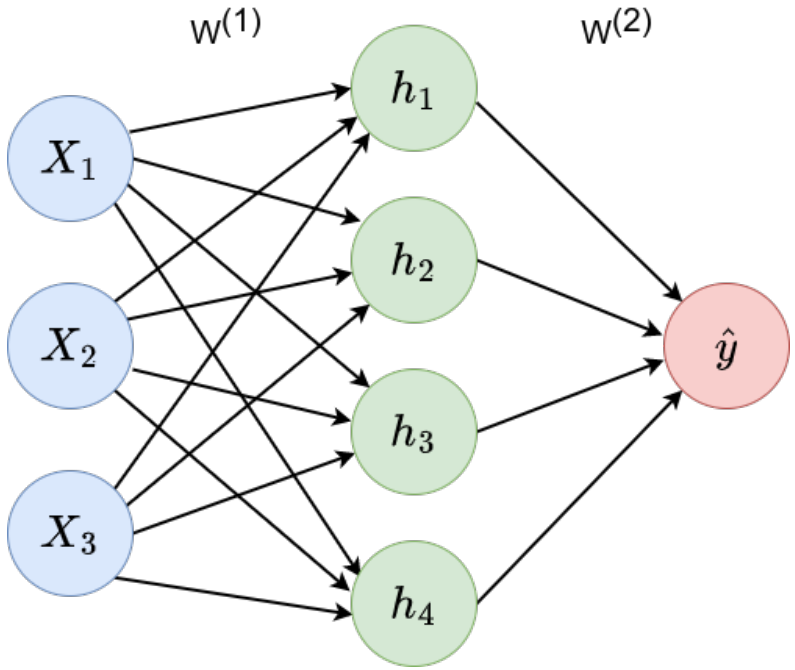
La idea es que la salida de cada perceptrón (neurona), sirva como entrada a las de la capa siguiente. De esta manera podríamos calcular la salida de la red (**pasada hacia delante**), de izquierda a derecha utilizando las reglas explicadas anteriormente.



# Salida en una red totalmente conectada

Para evaluar la salida $\hat{y}$ a partir de las entradas $X$ en una red totalmente conectada se procede de la siguiente manera:

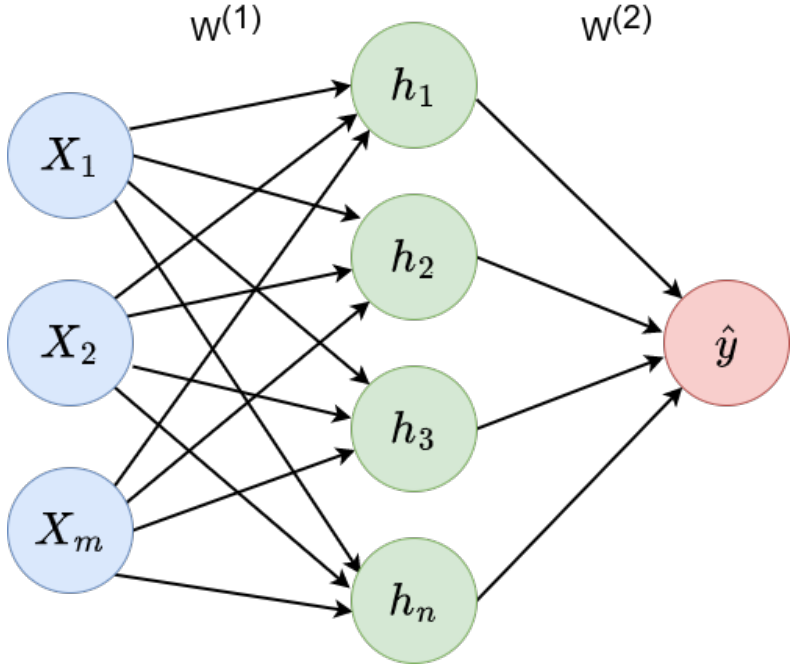
- Capa oculta: $h_i = b_i^{(1)} + \sum_{j=1}^{3} x_j w_{j,i}^{(1)}$
- Cada de salida: $\hat{y} = g(b^{(2)} + \sum_{j=1}^{4} h_j w_j^{(2)})$



# Salida en una red totalmente conectada (1 capa oculta)

En general, para cualquier tamaño de red, tendríamos lo siguiente:

- Capa oculta: $h_i = b_i^{(1)} + \sum_{j=1}^{m} x_j w_{j,i}^{(1)}$
- Cada de salida: $\hat{y} = g(b^{(2)} + \sum_{j=1}^{n} h_j w_j^{(2)})$



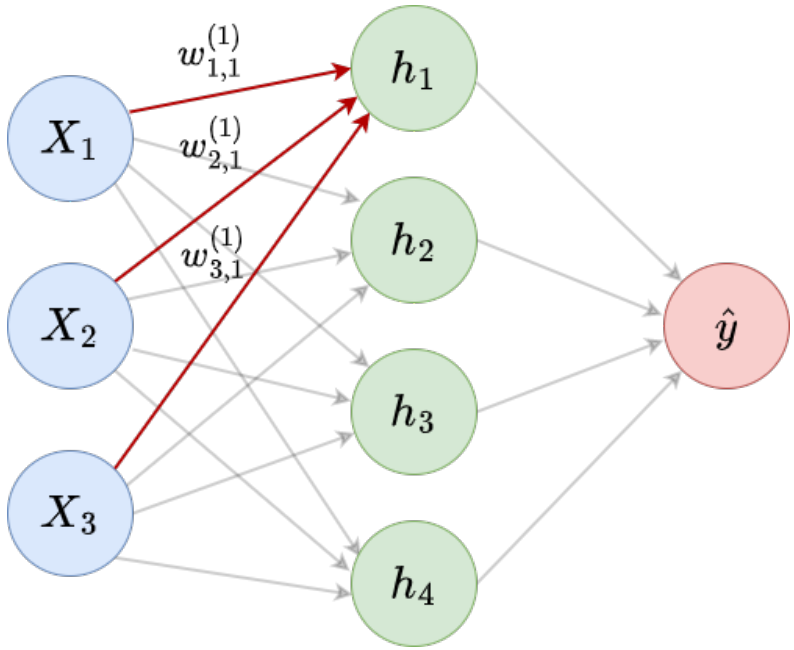

## Nota

En el caso de querer aplicar una función de activación en la primera capa podríamos escribir: $h_i = g(b_i^{(1)} + \sum_{j=1}^{m} x_j w_{j,i}^{(1)})$

# Salida en una red totalmente conectada (1 capa oculta)

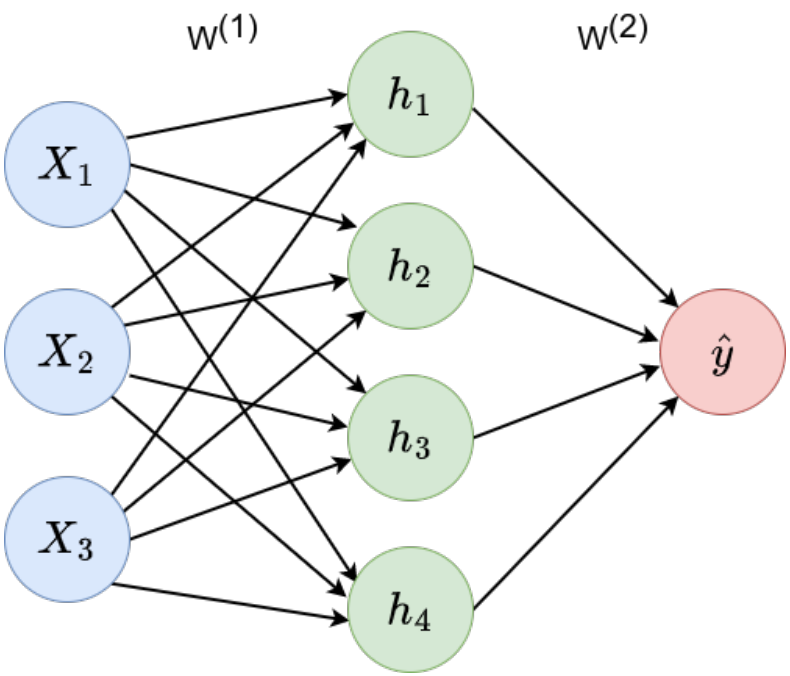
Un ejemplo para la neurona $h_1$ sería el siguiente:

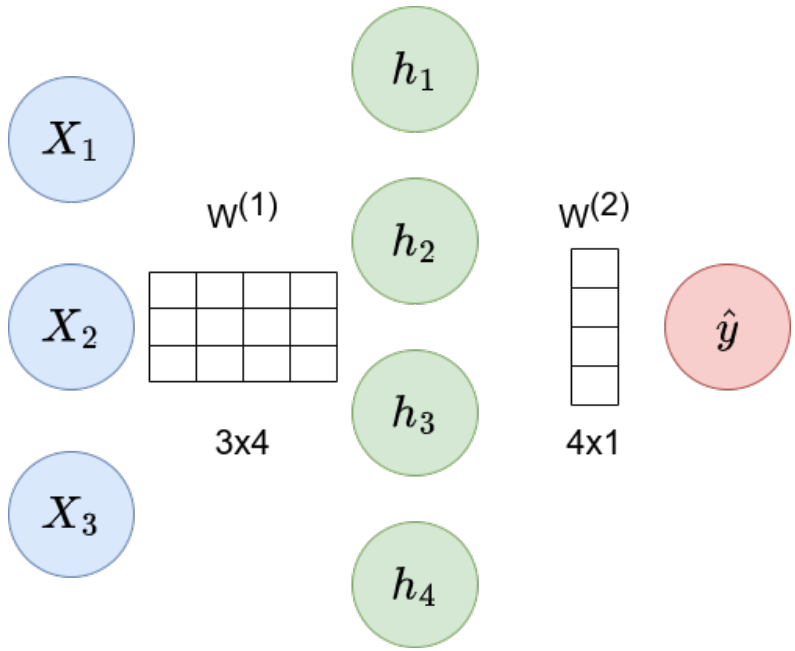
$$h_1 = b_1^{(1)} + \sum_{j=1}^{3} x_j w_{j,1}^{(1)} = b_1^{(1)} + x_1 w_{1,1}^{(1)} + x_2 w_{2,1}^{(1)} + x_3 w_{3,1}^{(1)}$$



# Salida en una red totalmente conectada (1 capa oculta)

La clave de la evaluación de una red es la **multiplicación de matrices**:

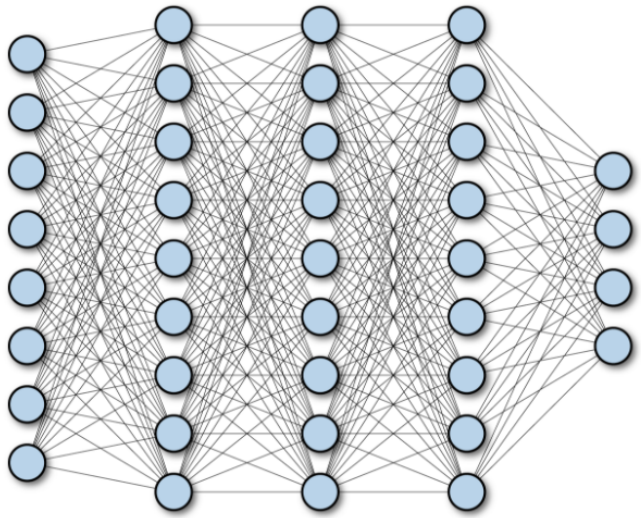


# Múltiples capas totalmente conectadas

Podemos seguir añadiendo capas totalmente conectadas para hacer nuestra red más grande.

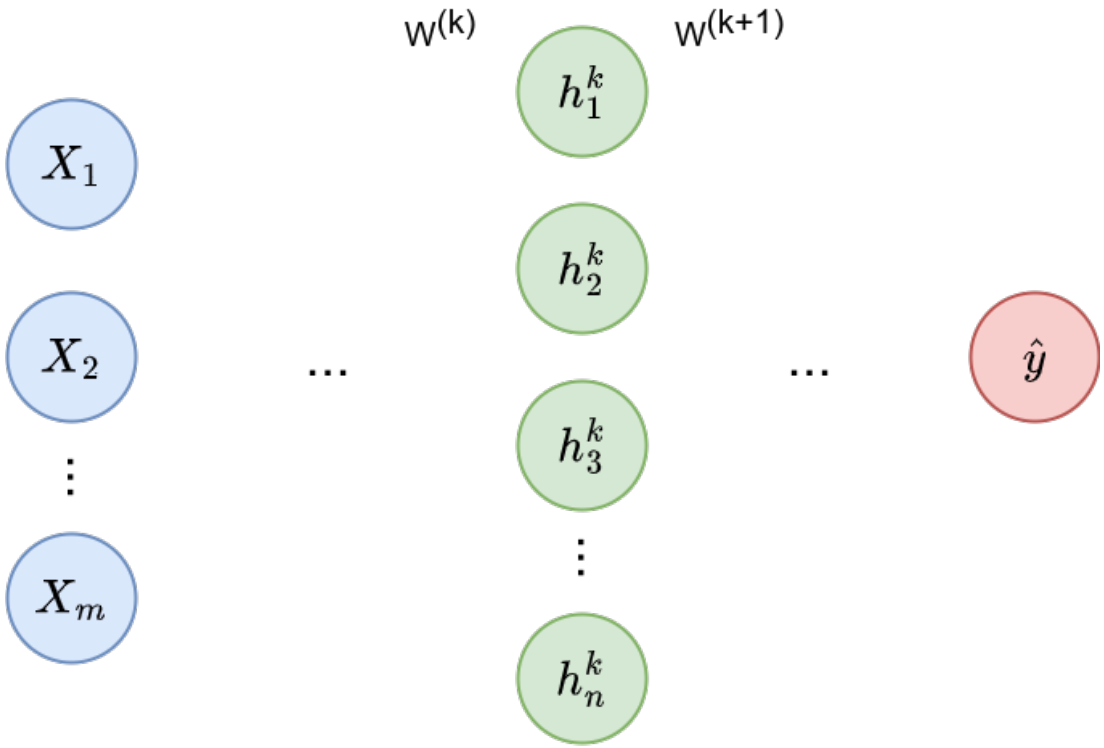
- El número de pesos crecerá muy rápido.
- La **dimensión** de las matrices a multiplicar será **mayor**.
- Pero el proceso explicado será exactamente el mismo independientemente de la dimensión de la red.



# Evaluación de una red con varias capas

En general, para totalmente conectada con $k$ capas ocultas, la podríamos evaluar de la siguiente manera:

$$h_i^{(k)} = g(b_i^{(k)} + \sum_{j=1}^{n_{k-1}} h_j^{(k-1)} w_{j,i}^{(k)})$$



# Entrenamiento de una red: Función de pérdida

# ¿Cómo entrenar la red?

Hasta el momento hemos aprendido como evaluar la salida de una **red neuronal totalmente conectada**, a partir de los datos de entrada.

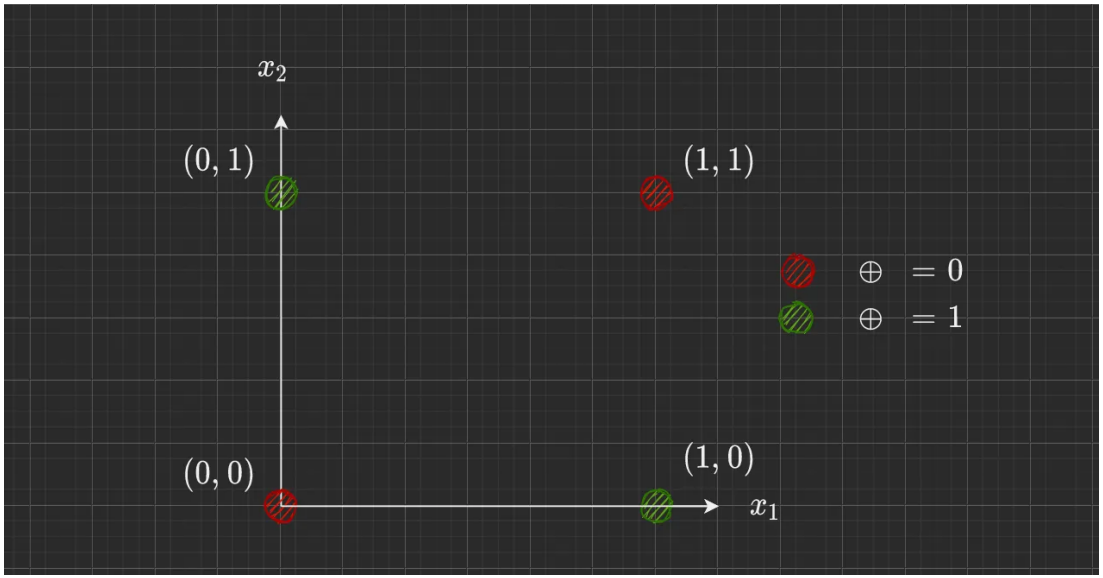
¿Cómo ser capaces de aprender los pesos de la red ($W$ y $b$) para que representen los datos entrenamiento y para predecir nuevos ejemplos?

# Ejemplo práctico: XOR

Supongamos que tenemos un conjunto de datos de entrada para el cual queremos entrenar un modelo con una red neuronal.

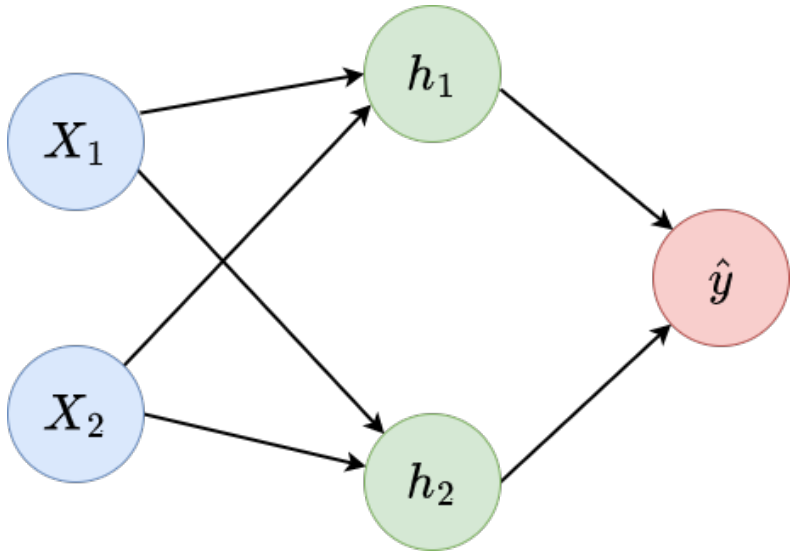
Ten en cuenta que este conjunto de datos **no es linearmente separable**.

| $x_1$ | $x_2$ | $y$ |
|---|---|---|
| 0 | 0 | 0 |
| 0 | 1 | 1 |
| 1 | 0 | 1 |
| 1 | 1 | 0 |



# Ejemplo práctico: XOR

Vamos a definir una red neuronal muy sencilla, con dos neuronas en la **capa de entrada**, dos neuronas en la **capa oculta**, y una neurona en la **capa de salida**.




La función de activación $g$ en la capa oculta y en la salida será la **sigmoide**.

# Ejemplo práctico: XOR

Inicializaremos las matrices de pesos $w^{(1)}$ y $w^{(2)}$ a valores aleatorios. Por simplicidad en este ejemplo, no consideraremos el bias.

$$w^{(1)} = \begin{bmatrix} 0.96 & 0.89 \\ 0.28 & 0.73 \end{bmatrix} \; w^{(2)} = \begin{bmatrix} 0.60 \\ 0.22 \end{bmatrix}$$

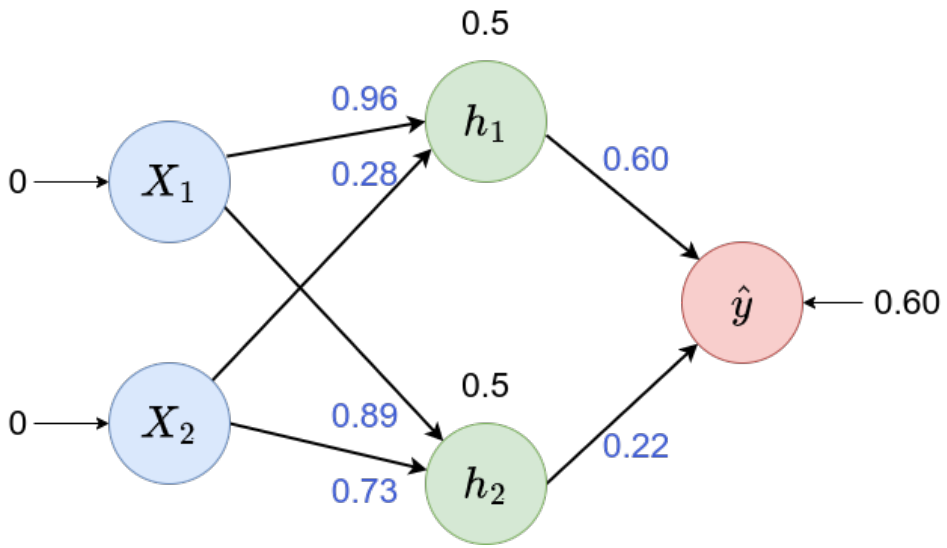
Veamos que sucede si evaluamos uno de los puntos del conjunto de datos, por ejemplo el punto (0,0).

# Ejemplo práctico: XOR

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

$$h = g(X^T w^{(1)}) = g\left( \begin{bmatrix} 0 & 0 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} 0.96 & 0.89 \\ 0.28 & 0.73 \end{bmatrix} \right) = g(\begin{bmatrix} 0 & 0 \end{bmatrix}) = \begin{bmatrix} 0.5 & 0.5 \end{bmatrix}$$

$$\hat{y} = g(hw^{(2)}) = g\left( \begin{bmatrix} 0.5 & 0.5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.60 \\ 0.22 \end{bmatrix} \right) = g(0.41) = 0.60$$



# Ejemplo práctico: XOR

Si observamos el valor real para el punto $(0, 0)$ vemos que $y = 0$, pero nuestra red está devolviendo $\hat{y} = 0.6$ (al ser un valor $> 0.5$ lo evaluaríamos como 1).

Estamos **cometiendo un error**, evidentemente porque nuestra red no está entrenada (sus pesos son aleatorios).

Podemos ver la salida $\hat{y}$ para el resto de puntos del dataset:

| $x_1$ | $x_2$ | $y$ | $\hat{y}$ | Acierto |
|---|---|---|---|---|
| 0 | 0 | 0 | 0.60 | X |
| 0 | 1 | 1 | 0.62 | ✓ |
| 1 | 0 | 1 | 0.64 | ✓ |
| 1 | 1 | 0 | 0.66 | X |

# Ejemplo práctico: XOR

Llegados a este punto podríamos calcular el error cometido con una **función de pérdida**. Por ejemplo para problemas de clasificación una de las más utilizadas es la **cross entropy loss**:

$$\mathcal{L}(y, \hat{y}) = -\sum_{i=1}^{C} y_i \log \hat{y}_i$$

Donde $C$ es el número de clases de nuestro problema. Si estamos en un problema binario:

$$\mathcal{L}(y, \hat{y}) = -(y \log \hat{y} + (1 - y) \log(1 - \hat{y}))$$

**Funciones de pérdida**

Trataremos las funciones de pérdida más adelante en el curso.

# Ejemplo práctico: XOR

Calculo del error para cada ejemplo:

| $x_1$ | $x_2$ | $y$ | $\hat{y}$ | Correcto | $L(y, \hat{y})$ |
|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 0 | 0 | 0.60 | X | 0.92 |
| 0 | 1 | 1 | 0.62 | ✓ | 0.48 |
| 1 | 0 | 1 | 0.64 | ✓ | 0.44 |
| 1 | 1 | 0 | 0.66 | X | 1.07 |

**¿Cómo ajustar los pesos de nuestra red para ser capaces de minimizar el error cometido?**

# Entrenamiento de una red: descenso del gradiente

# ¿Cómo entrenar una red neuronal?

El objetivo del entrenamiento es **minimizar la función de pérdida** alterando para ello los pesos de la red. En general, trataremos de minimizar la función de pérdida sobre los datos de entrenamiento.

Formalmente: $W^* = argmin \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \mathcal{L}(y_i, f(x_i, W))$

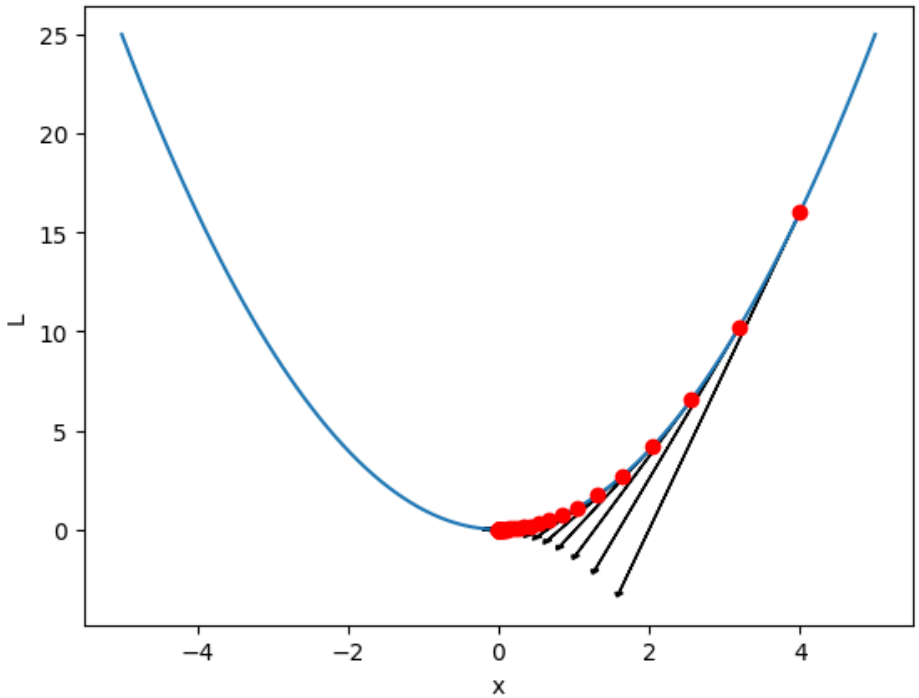
Este problema no se puede resolver de manera analítica ya que la función a minimizar es demasiado compleja. Para ello se utiliza una técnica de minimización conocida como **descenso de gradiente**.

## Evaluación de la red

Es importante recordar la evaluación de la red se representa como $f(X, W)$, es decir, una función de los parámetros de la red y la entrada.

# Descenso del gradiente

El descenso del gradiente es un algorítmo que nos permite encontrar el mínimo de una función basándonos en el concepto de **gradiente**.
Imaginemos la función $f(x) = x^2$. Como sabemos su mínimo está en cero.
Dado un $x$ aleatorio, utilizaremos el descenso de gradiente para encontrar su mínimo.



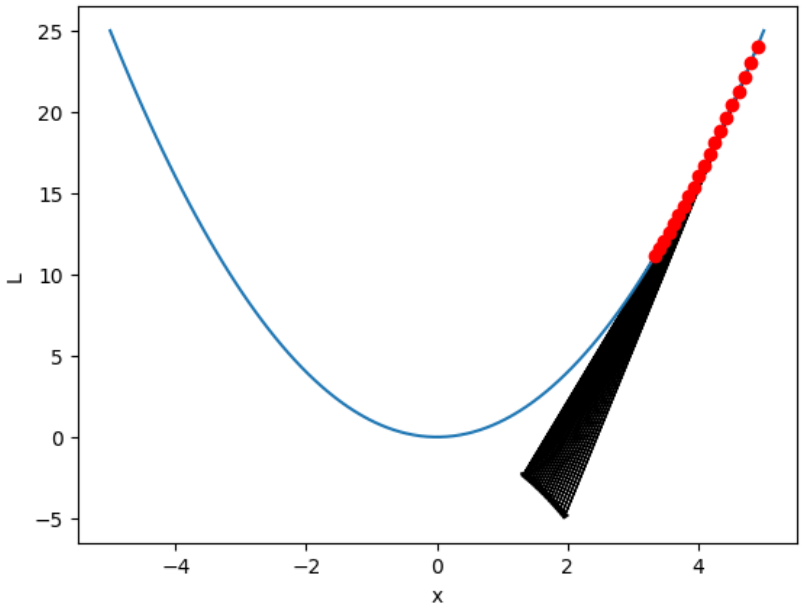
# Descenso del gradiente

El algoritmo de **descenso de gradiente** se basa en los siguientes pasos:

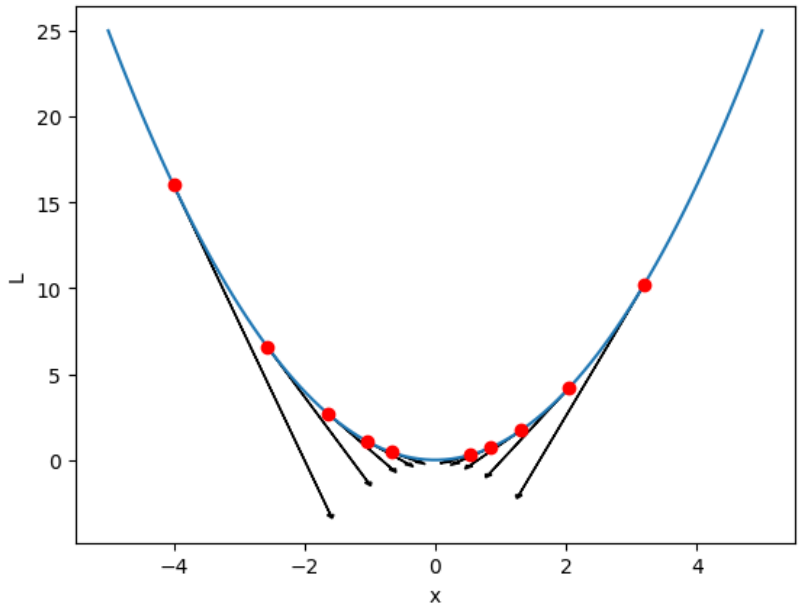
1. Partir de un valor aleatorio de $x$
2. Calcular el gradiente de la función en el punto $\frac{\partial f}{\partial x}$. Esto nos indicará hacia donde crece la función.
3. Actualizar $x = x - \eta \frac{\partial f}{\partial x}$. $\eta$ es conocido como el **learning rate**.
4. Repetir 2 y 3 hasta la convergencia.

# Descenso del gradiente

El **learning rate** es un parámetro crítico en este algoritmo.



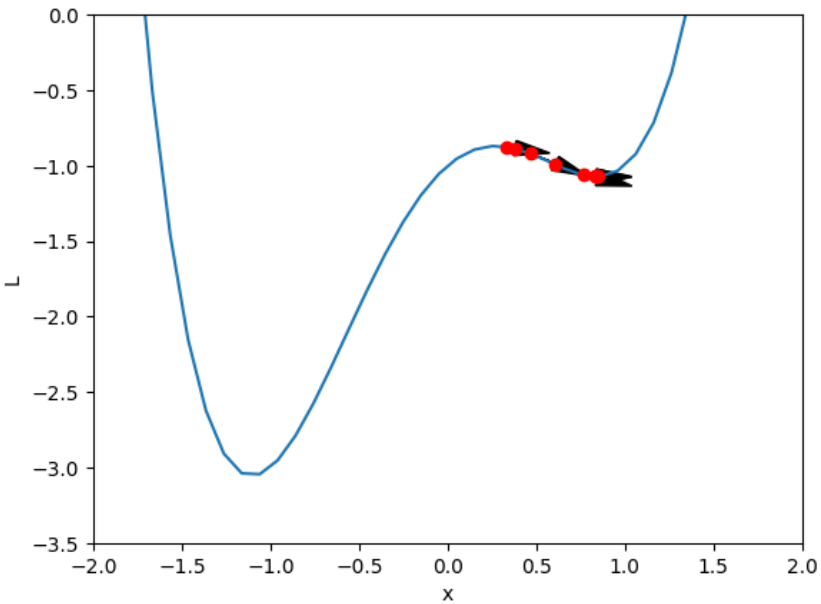

Learning rate muy pequeño



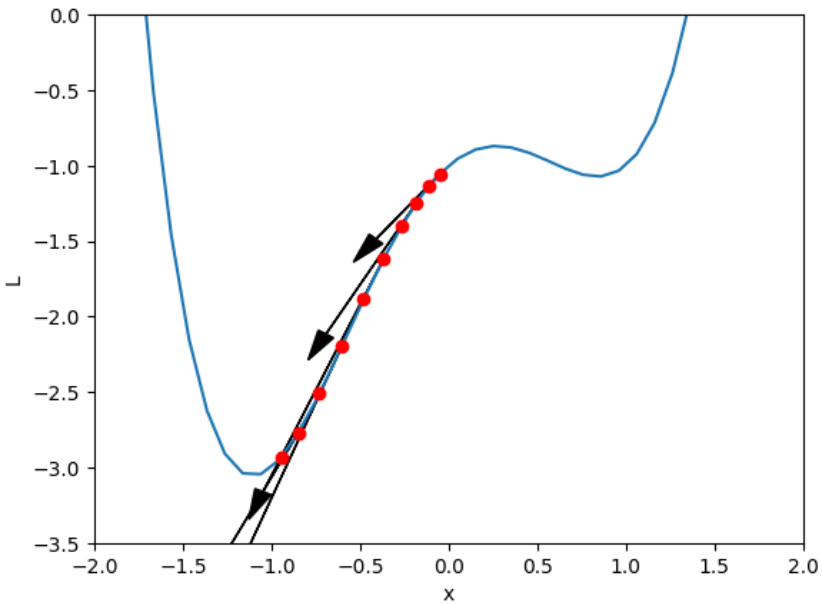

Learning rate demasiado grande

# Descenso del gradiente

Además del learning rate, la **elección de los pesos iniciales** de la red también tiene un efecto importante. Imaginemos la función $f(x) = x^4 - 2x^2 + x - 1$. Esta función tiene un **mínimo global** y un **mínimo local**.




$x_0 = 0.3$




$x_0 = 0$

# Descenso del gradiente

Una técnica para elegir los pesos iniciales suele ser **inicializarlos aleatoriamente** siguiendo una **distribución normal** $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$.

En cuanto al learning rate, se considera un **hiperparámetro** a ajustar.

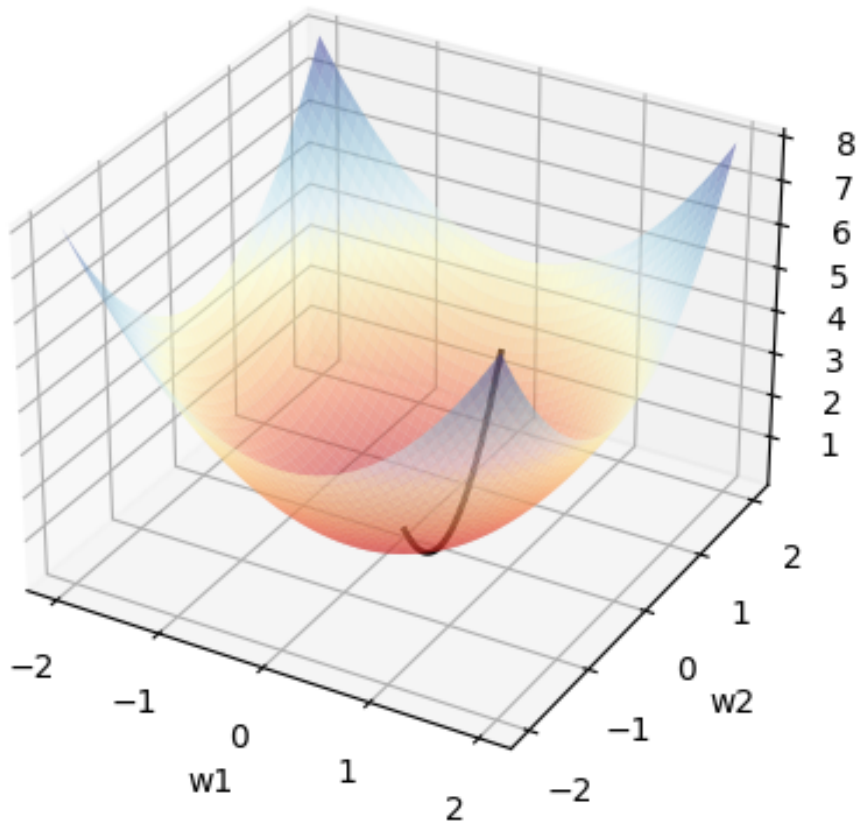
- Learning rates muy bajos pueden hacer que la red tarde mucho en converger. Por otra parte, un learning rate muy bajo puede ser más propenso a caer en mínimos locales.
- Learning rates muy altos pueden resultar en la no convergencia de la red en el mínimo global, como hemos visto anteriormente.

## Probar y ganar experiencia

No existe una receta única para establecer el learning rate. En próximas lecciones aprenderemos más sobre este tema y veremos software específico que nos ayudará a elegir el learning rate más adecuado.

# Descenso del gradiente

A continuación se muestra el mismo ejemplo pero en una función con dos variables de entrada $f(w1, w2)$. Esto podría representar a una red neuronal con dos pesos.



# Descenso del gradiente

Descenso del gradiente:

- Es un algoritmo usado en varias areas (no solo en la IA), inventado hace más de 150 años.
- La dificultad en las redes neuronales consiste en el computo de las derivadas parciales de cada uno de los parámetros/pesos con respecto a la función de pérdida.
- Recuerda que una red, y más en el aprendizaje profundo, puede tener **miles de millones** de parámetros.
- ¿Cómo **calcular de manera eficiente los gradientes** de cada uno de los parámetros con respecto a la función de pérdida?

# Entrenamiento de una red: Backpropagation

# Propagación hacia atrás

El objetivo de la propagación hacia atrás (**backpropagation**) es calcular las derivadas parciales $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w}$ y $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial b}$, es decir, el gradiente de cada peso (w) y bias (b) con respecto a la función de pérdida.

Este algoritmo responde a la pregunta de como el **cambio de un parámetro** de la red **afecta a la salida** de la función de pérdida.

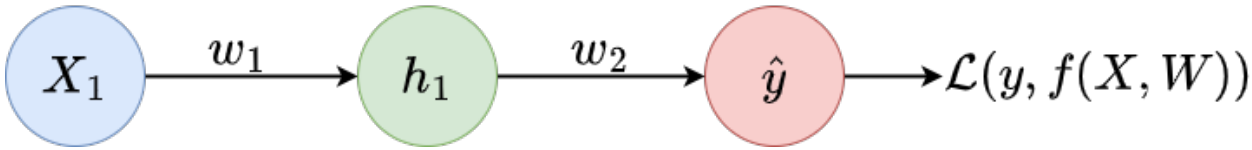
El nombre "propagación hacia atrás" viene de que el error (salida de la función de pérdida), **se propaga hacia atrás** a través de la red, desde la salida hasta la capa de entrada.

## Descubrimiento de la propagación hacia atrás

La propagación hacia atrás fue descubierta a mitad de la década de los 80. Aunque el perceptrón había sido descubierto antes, fue este hecho el que permitió empezar a entrenar las redes neuronales de manera eficiente.

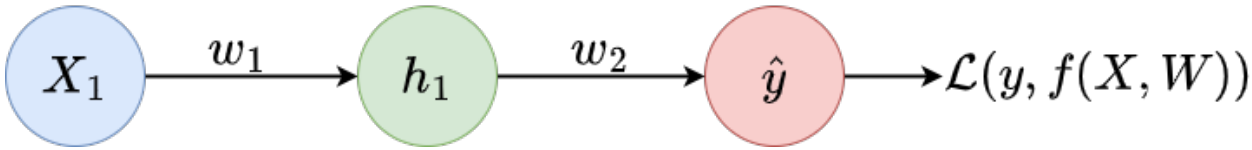
# Propagación hacia atrás

Imaginemos la red más sencilla posible, con una neurona en la capa de entrada, una neurona en la capa intermedia y una neurona en la capa de salida.




Recuerda que la salida de la red es una función de los pesos y los datos de entrada. $\mathcal{L}$ es la función de pérdida utilizada.

# Propagación hacia atrás




¿Cómo podemos calcular el gradiente de los pesos con respecto a la función de pérdida, es decir, $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_1}$ y $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_2}$?

La herramienta matemática que utilizaremos será la **regla de la cadena**. Nos permitirá calcular las derivadas parciales cuando la función a derivar es la composición de otras funciones.

# Regla de la cadena

La regla de la cadena se usa para calcular derivadas con la forma:

$$y = f(g(x))$$
$$y' = f'[g(x)]g'(x)$$

donde $f$ corresponde a la **función externa** y $g$ a la **función interna**.

La regla de la cadena también se puede escribir de la siguiente forma:

$$y = f(u), \text{ con } u = g(x)$$
$$\frac{\partial y}{\partial x} = \frac{\partial y}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x}$$

**Importante**

Una red neuronal no es es más que una composición de muchas funciones por tanto la regla de la cadena es muy útil para calcular las derivadas parciales con respecto a los parámetros de la misma.

# Regla de la cadena: Ejemplo

Supongamos una función polinómica $y$, como por ejemplo:

$$y = (6x^2 + 2)^4$$

# Regla de la cadena: Ejemplo

Supongamos una función polinómica $y$, como por ejemplo:

$$y = (6x^2 + 2)^4$$

en este caso, podemos considerar $y$ como una composición de dos funciones:

- La **función externa**: la potencia a la cuarta
- La **función interna**: lo que hay en el paréntesis.

# Regla de la cadena: Ejemplo

Supongamos una función polinómica $y$, como por ejemplo:

$$y = (6x^2 + 2)^4$$

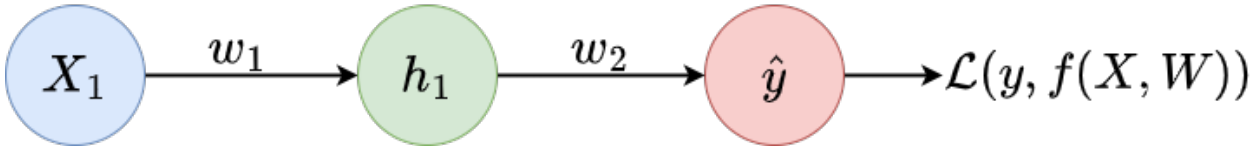
en este caso, podemos considerar $y$ como una composición de dos funciones:

- La **función externa**: la potencia a la cuarta
- La **función interna**: lo que hay en el paréntesis.

Por tanto aplicaríamos la regla de la cadena de la siguiente forma:

$$y' = 4(6x^2 + 2)(12x)$$

# Propagación hacia atrás




Podemos utilizar la **regla de la cadena** para calcular las derivadas parciales con respecto a los parámetros de la red.

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_2} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{y}} \frac{\partial \hat{y}}{\partial w_2}$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_1} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{y}} \frac{\partial \hat{y}}{\partial w_1} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{y}} \frac{\partial \hat{y}}{\partial h_1} \frac{\partial h_1}{\partial w_1}$$

**Importante**

La **regla de la cadena** nos permite dividir el cálculo de los gradientes de la función de pérdida con respecto a los pesos de la red en un serie de **cálculos más pequeños y simples**.

# Propagación hacia atrás

La propagación hacia atrás tiene varios problemas. El primero es que necesita **calcular los gradientes para todos los parámetros de la red por cada uno de los ejemplos** del dataset.

Esto significa calcular $\frac{1}{|d|}\sum_{x_i,y_i\in d}\mathcal{L}(y_i, f(x_i; W))$. De esta manera promediamos el gradiente en cada parámetro para todos ejemplos del conjunto de datos.

A esta técnica se la conoce comúnmente como **Batch Gradient Descent**. Su principal implicación es que **la complejidad** de la realización de una actualización de los pesos **aumenta linealmente** con respecto al tamaño del conjunto de datos de entrenamiento $d$.

# Variaciones del descenso de gradiente

# Tipos de descenso de gradiente

Existen varias soluciones para este problema, cada una con sus ventajas en inconvenientes:

- Descenso de gradiente por lotes (**Batch Gradient Descent**). Es la alternativa mencionada anteriormente. El gradiente se calcula para todos los ejemplos antes de actualizar los pesos.
- Descenso de gradiente por mini-lotes (**Mini-Batch Gradient Descent**). Variante del anterior. En lugar de considerar el conjunto de entrenamiento completo se coge un lote de ejemplos (mini-batch).
- Descenso de gradiente estocástico (**Stochastic Gradient Descent**). En este caso se calcula el gradiente y se actualizan utilizando un único ejemplo elegido aleatoriamente.

# Descenso de gradiente por lotes

En el descenso de gradiente por lotes (**Batch Gradient Descent**):

- El conjunto de entrenamiento es **procesado completamente** antes de realizar una actualización de los pesos.
- La actualización de los pesos se basa en la **media de los gradientes** calculados para cada ejemplo.
- Es un algoritmo **determinista** (siempre que los pesos iniciales sean los mismos).
- **Converge lentamente**, especialmente en datasets grandes.
- Es un algoritmo **estable**.
- Tiene a quedarse en **mínimos locales** (especialmente si la función de pérdida no es convexa).

# Descenso de gradiente estocástico

En el descenso de gradiente estocástico (**Stochastic Gradient Descent, SGD**):

- Se selecciona **un único ejemplo aleatorio** en cada iteración para calcular el gradiente.
- Tiene una **convergencia más rápida** porque los pesos se actualizan más frecuentemente.
- Es más **inestable** que las otras versiones ya que los gradientes son calculados para un solo ejemplo.
- Es menos propenso a quedarse atrapado en **mínimos locales**.

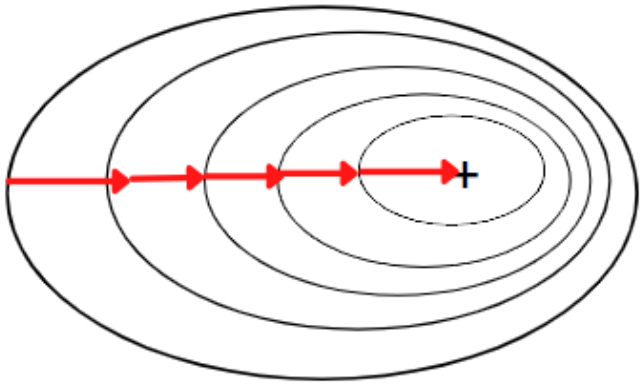
# Descenso de gradiente por mini-lotes

El descenso de gradiente por mini-lotes (**Mini-Batch Gradient Descent**):

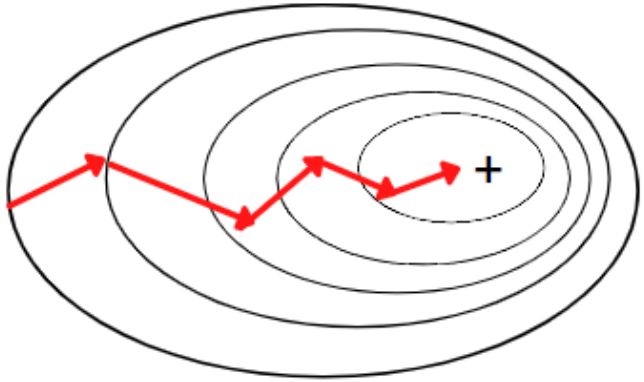
- Es un **punto intermedio** entre las dos soluciones anteriores.
- Las actualizaciones de los pesos de la red se realiza después de procesar un un **subconjunto de los datos** de entrenamiento.
  - El tamaño de este subconjunto se suele llamar **batch size**. Se suelen escoger valores como 32, 64, 128 (potencia de dos). Este valor se considera un hiper-parámetro del proceso de entrenamiento.
- Tiene una **convergencia más rápida** que en la versión por lotes porque actualiza los pesos más frecuentemente.
- Es menos preciso que el descenso de gradiente por lotes ya que **el gradiente calculado es solo una aproximación**.
- Es algoritmo **menos estable** y con más ruido pero esto puede ayudarle a salir de mínimos locales.

# Comparativa entre las diferentes versiones

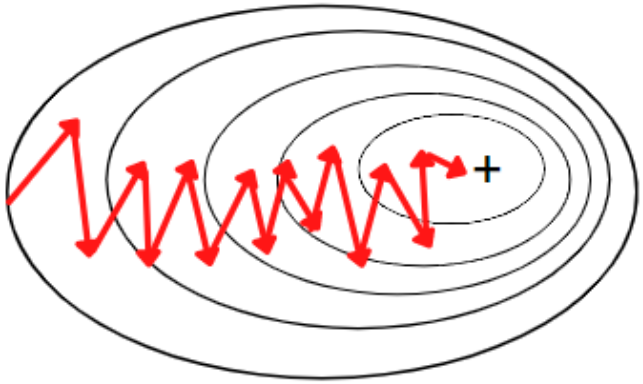
**Batch Gradient Descent**



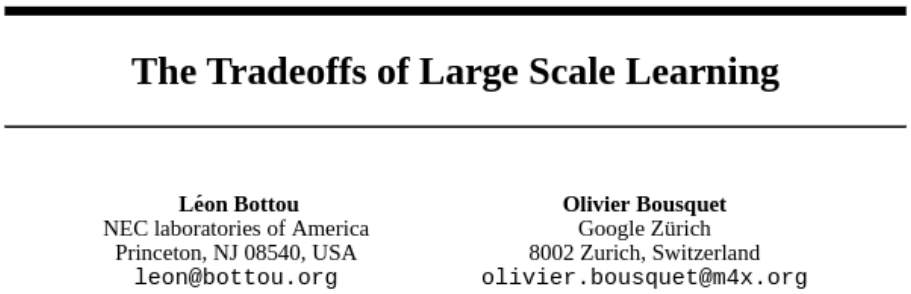
**Mini-Batch Gradient Descent**



**Stochastic Gradient Descent**



# ¿Qué algoritmo de optimización elegir?



**The Tradeoffs of Large Scale Learning**

**Léon Bottou**
NEC laboratories of America
Princeton, NJ 08540, USA
leon@bottou.org

**Olivier Bousquet**
Google Zürich
8002 Zurich, Switzerland
olivier.bousquet@m4x.org

Un resultado importante descubierto por Bottou and Bousquet (2011) indica lo siguiente:

- SGD no es el algoritmo más efectivo en términos de minimizar el error de entrenamiento.
- Pero, generalmente obtiene **modelos que generalizan mejor**.

**Generalización con respecto a sobreajuste**

Aunque estudiaremos este tema en más profundidad, recuerda que lo que nos interesa es ser capaces de generalizar lo aprendido y no simplemente memorizar el conjunto de entrenamiento (sobreajuste).

# ¿Qué algoritmo de optimización elegir?

Generalmente, Mini-Batch Gradient Descent será una buena elección inicial ya que combina las fortalezas de los otros dos enfoques.

Realmente que algoritmo de optimización utilizar depende del problema en concreto y de la arquitectura de la red. De todas maneras, es útil entender los algoritmos de optimización existentes para ser capaces de ajustar hiper-parámetros como por ejemplo el **batch-size** o el **learning rate**.

## Otros algoritmos de optimización

En próximas unidades veremos otros algoritmos de optimización más avanzados, como Adam, AdamW o RMSProp, etc. Estos algoritmos trabajan con conceptos como el **momento** o los **learning rates** adaptativos.

# Desvanecimiento del gradiente y sus soluciones

# Desvanecimiento del gradiente

¿Qué es el desvanecimiento del gradiente?

- El **desvanecimiento del gradiente** es un problema que puede ocurrir durante el entrenamiento de redes neuronales profundas.
- Como hemos visto anteriormente, la actualización de los pesos depende de los gradientes de la función de pérdida con respecto a los parámetros de la red neuronal. Estos **se vuelven muy pequeños** a medida que se retropropagan a través de varias capas.
  - Si estos gradientes son muy pequeños puede hacer que los pesos en ciertas capas apenas cambien.
- Este problema puede hacer que la red neuronal **converja muy lentamente** o incluso que **no converja en absoluto**.

# Desvanecimiento del gradiente

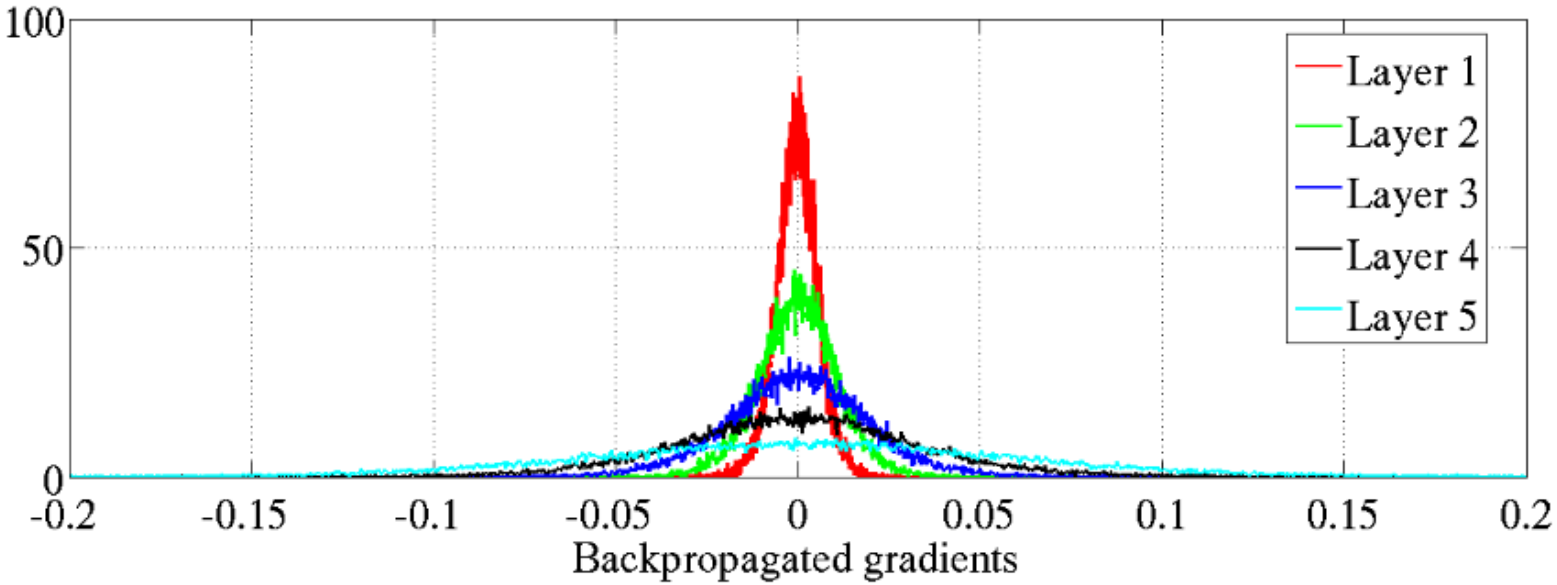
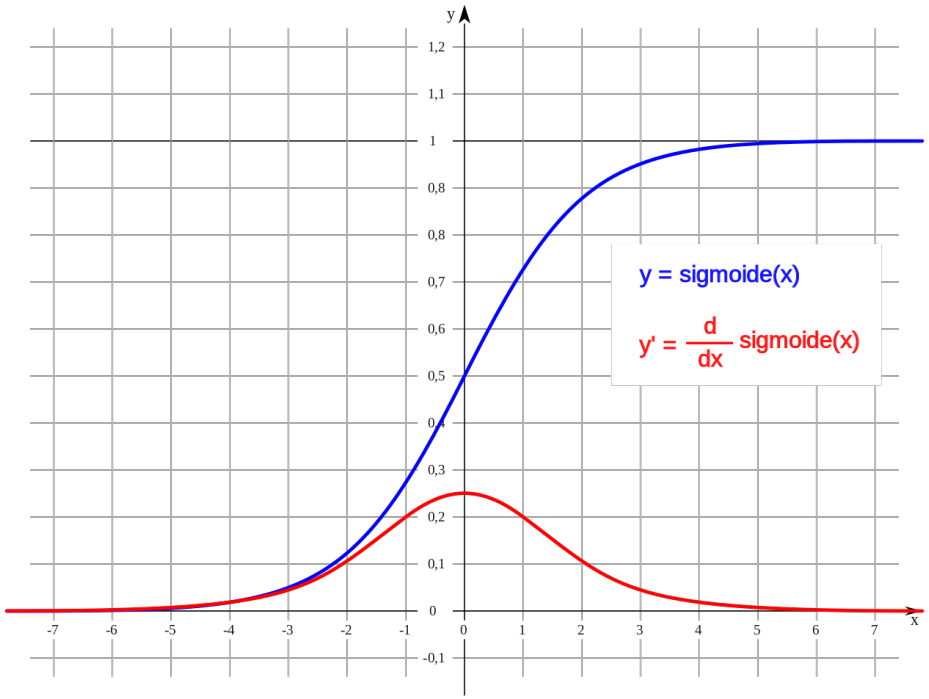



Figure: Figura extraída del paper "Understanding the difficulty of training deep feedforward neural networks" de Xavier Glorot y Yoshua Bengiom, 2010.

# Causas del desvanecimiento del gradiente

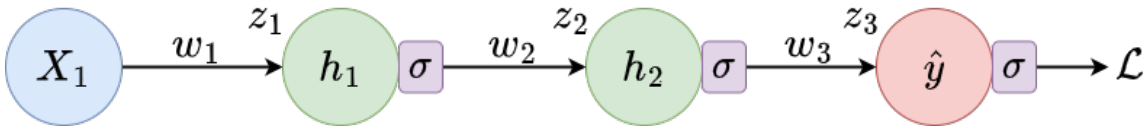
Las principales causas del desvanecimiento del gradiente son:

- Esto puede ocurrir cuando se utilizan **funciones de activación que tienen gradientes muy pequeños**, como la función sigmoide.
- También puede ocurrir cuando se utiliza una **inicialización inapropiada de los pesos** de la red neuronal.



# Desvanecimiento del gradiente: ejemplo

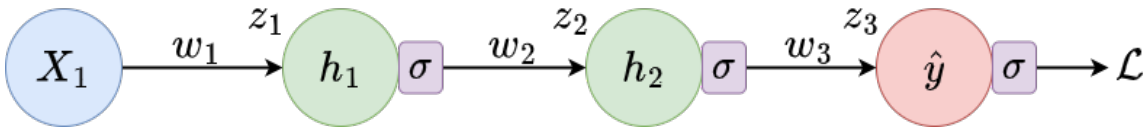
Imaginemos una red neuronal, con dos capas ocultas y funciones de activación ($\sigma$) sigmoides, inicializada con unos pesos de una Gausiana, con media 0 y desviación pequeña, tal que generalmente $-1 < w_i < 1$.




En este caso, como ya sabemos, podemos evaluar la red de la siguiente manera:

$$z_1 = w_1 x_1$$
$$h_1 = \sigma(z_1)$$
$$z_2 = w_2 h_1$$
$$h_2 = \sigma(z_2)$$
$$z_3 = w_3 h_2$$
$$\hat{y} = \sigma(z_3)$$

# Desvanecimiento del gradiente: ejemplo



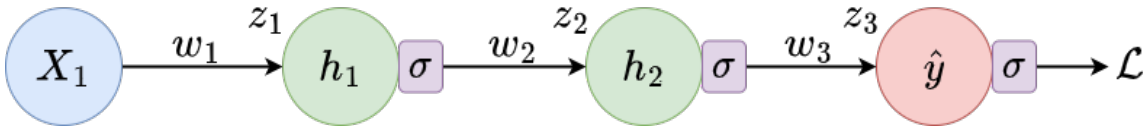

Resumiendo, la evaluación de la red sería:

$$\hat{y} = \sigma(w_3(\sigma(w_2(\sigma(w_1 x_1)))$$

Si ahora queremos calcular la derivada de $\mathcal{L}$ con respecto al peso $w_1$, tendríamos:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_1} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{y}} \frac{\partial \hat{y}}{\partial z_3} \frac{\partial z_3}{\partial h_2} \frac{\partial h_2}{\partial z_2} \frac{\partial z_2}{\partial h_1} \frac{\partial h_1}{\partial z_1} \frac{\partial z_1}{\partial w_1}$$

# Desvanecimiento del gradiente: ejemplo




$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_1} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{y}} \frac{\partial \hat{y}}{\partial z_3} \frac{\partial z_3}{\partial h_2} \frac{\partial h_2}{\partial z_2} \frac{\partial z_2}{\partial h_1} \frac{\partial h_1}{\partial z_1} \frac{\partial z_1}{\partial w_1}$$

Dónde:

$$\frac{\partial z_1}{\partial w_1} = x_1, \ \frac{\partial z_2}{\partial h_1} = w_2, \ \frac{\partial z_3}{\partial h_2} = w_3$$

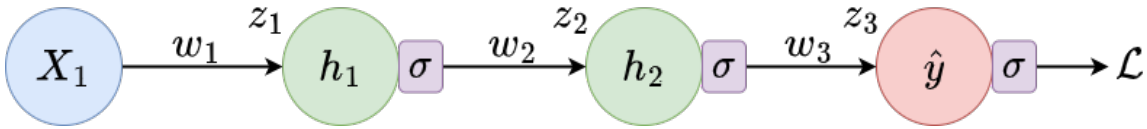
y:

$$\frac{\partial h_1}{\partial z_1} = \frac{\partial \sigma(z_1)}{\partial z_1}, \frac{\partial h_2}{\partial z_2} = \frac{\partial \sigma(z_2)}{\partial z_2}, \frac{\partial \hat{y}}{\partial z_3} = \frac{\partial \sigma(z_3)}{\partial z_3}$$

El cálculo del gradiente puede entonces reescribirse como:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_1} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{y}} \frac{\partial \sigma(z_3)}{\partial z_3} w_3 \frac{\partial \sigma(z_2)}{\partial z_2} w_2 \frac{\partial \sigma(z_1)}{\partial z_1} x_1$$

# Desvanecimiento del gradiente: ejemplo




$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_1} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{y}} \frac{\partial \sigma(z_3)}{\partial z_3} w_3 \frac{\partial \sigma(z_2)}{\partial z_2} w_2 \frac{\partial \sigma(z_1)}{\partial z_1} x_1$$

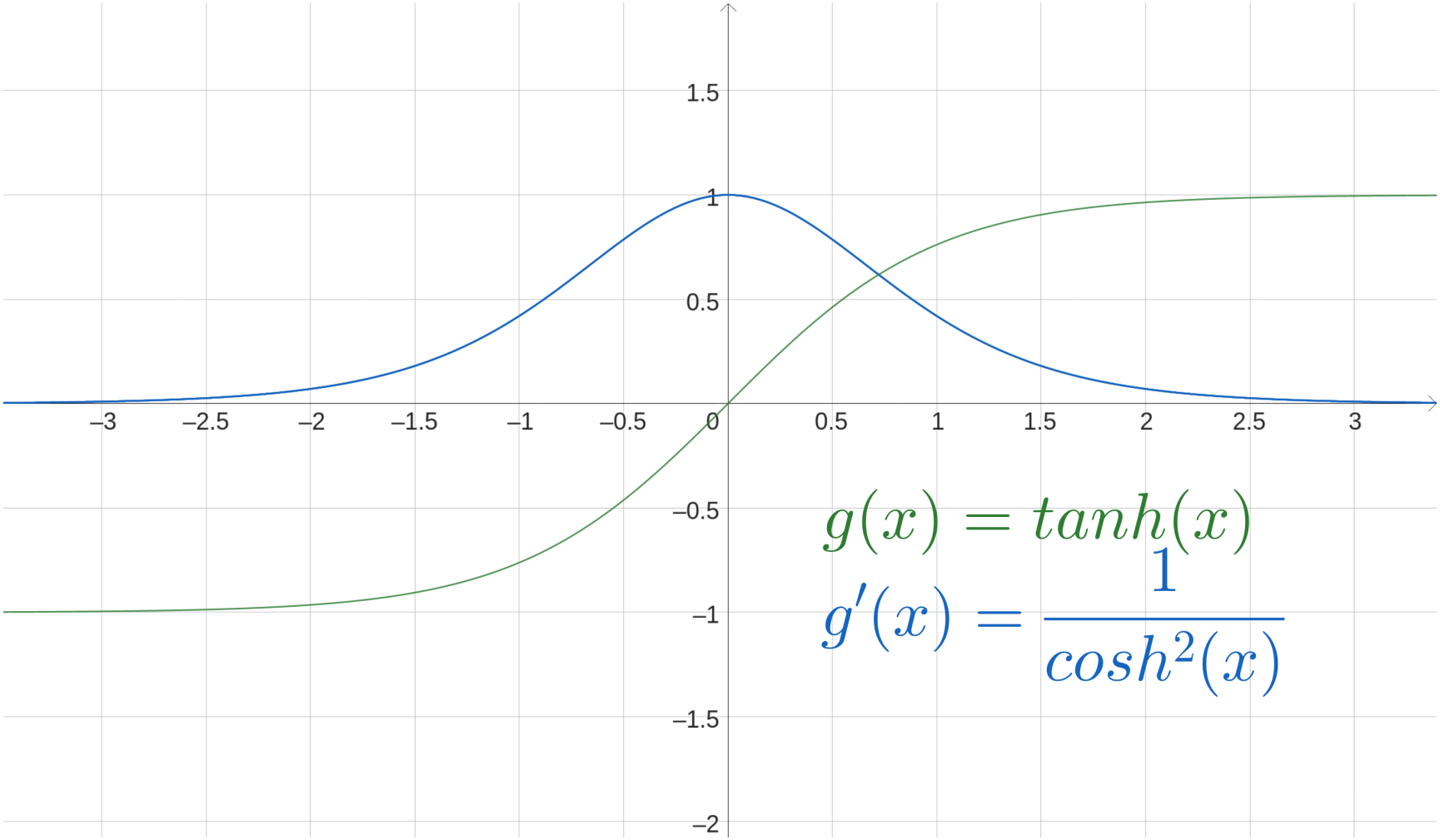
De esta ecuación debemos hacer dos observaciones:

- Los pesos $w_j$ tendrán un valor entre -1 y 1.
- $\sigma'(z_j)$ valdrá como mucho 0.25.

Esto hace que cuanto más productos encadenemos (cuanto más profunda sea la red), mayor será la probabilidad de que el **gradiente sea muy cercano a cero**.

Como podemos ver, **la inicialización de los pesos es muy importante** ya que si tomamos todo ceros por ejemplo, el gradiente siempre valdría cero.

# Otras funciones de activación con el mismo problema




$$g(x) = tanh(x)$$

$$g'(x) = \frac{1}{cosh^2(x)}$$

# Función de activación ReLU

La función ReLU tiene las siguientes características:

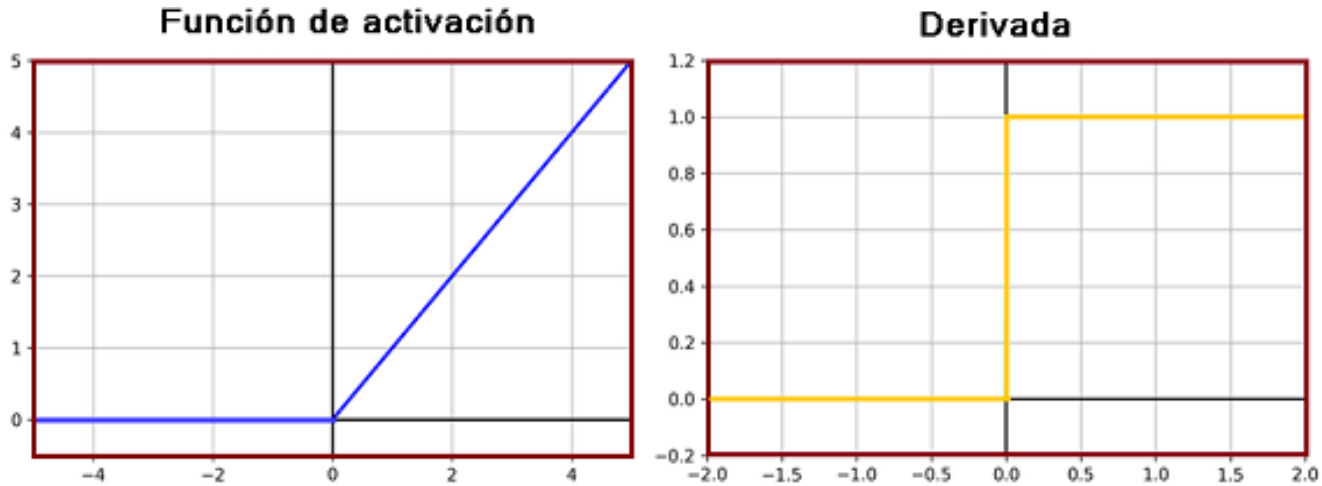
- Si el valor es mayor que cero, la activación es 1, por tanto **resuelve el problema del desvanecimiento del gradiente**.
- Es más rápida de calcular.

La función ReLU tiene el problema de que cuando el valor es negativo, su derivada es cero, cortando la propagación hacia atrás (**neuronas muertas**).

**ReLU**

$\max(0, x)$

$$f(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x > 0 \\ 0 & \text{otro caso} \end{cases}$$

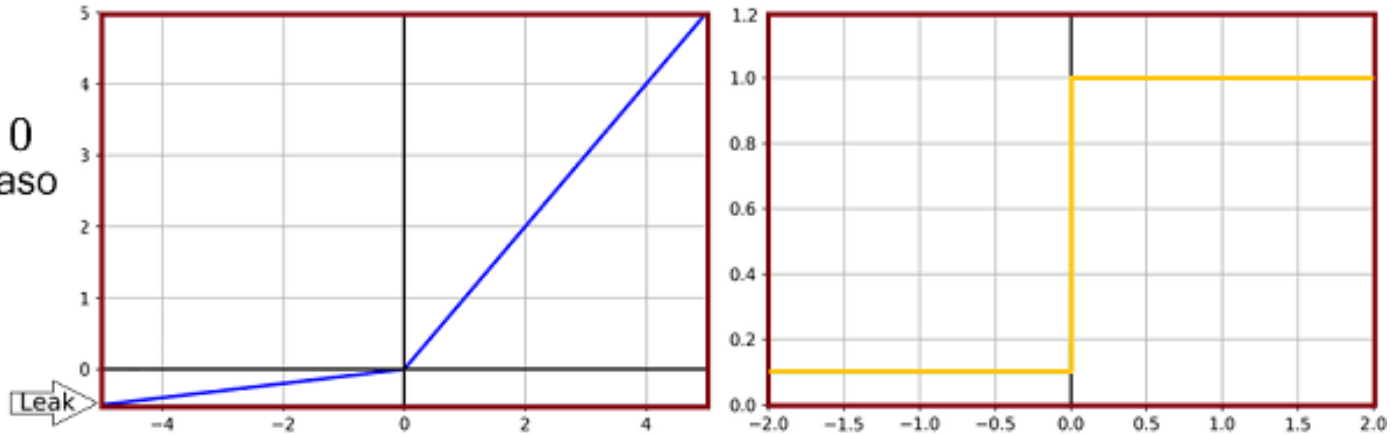


# Función de activación LeakyReLU

**Leaky ReLU**

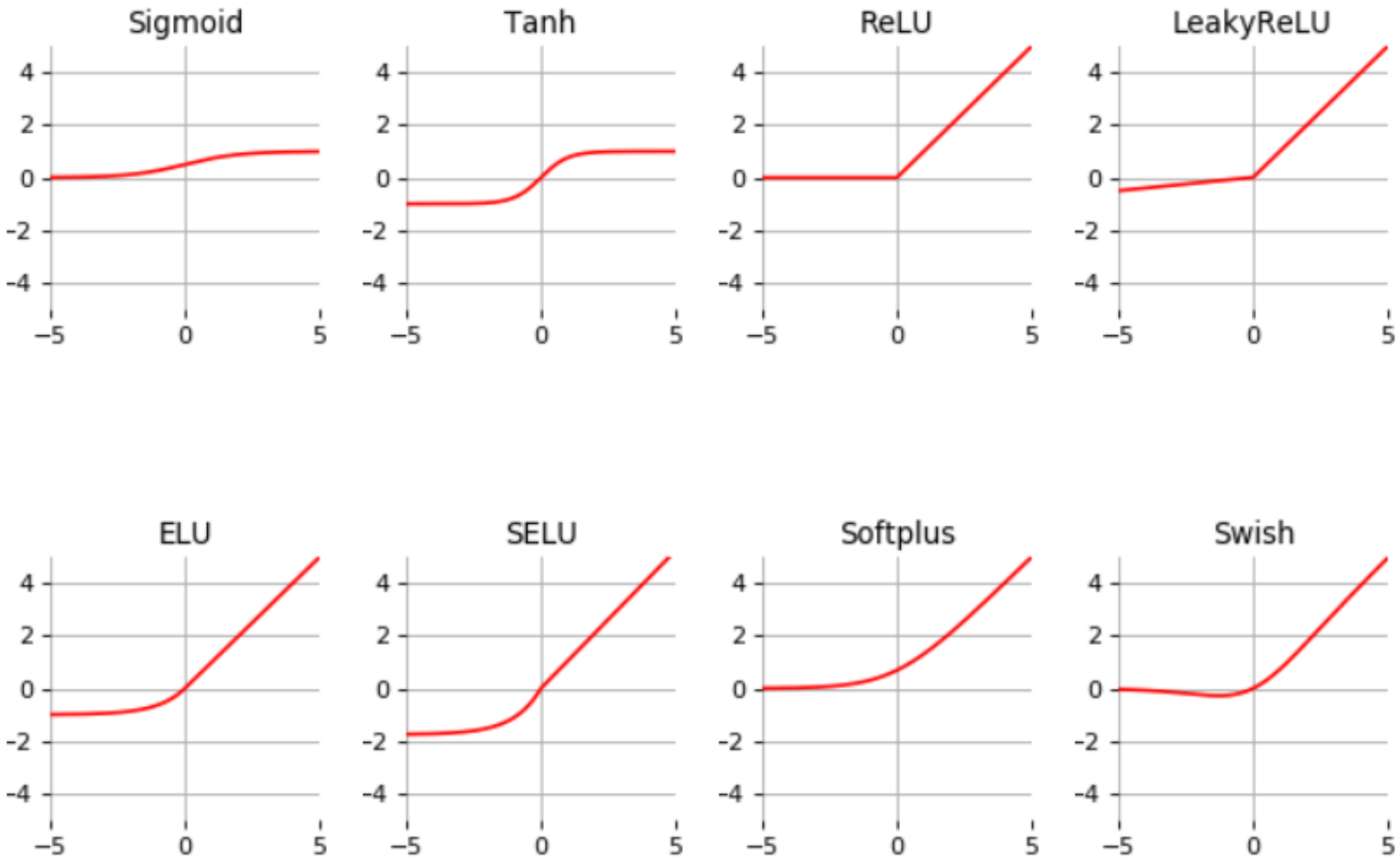
$\max(0{,}1x, x)$

$$f(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x > 0 \\ 0{,}01 & \text{otro caso} \end{cases}$$

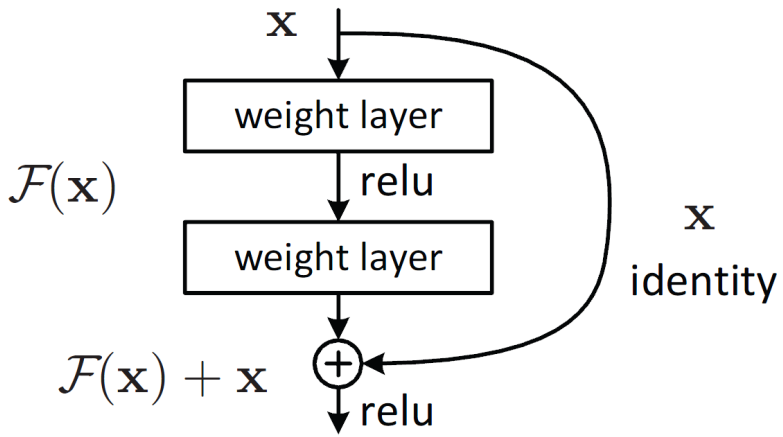



Esta función de activación garantiza que haya un valor distinto de cero para valores negativos, resolviendo parcialmente los problemas de la función ReLU.

# Otras funciones de activación



# Otras soluciones: Redes Residuales

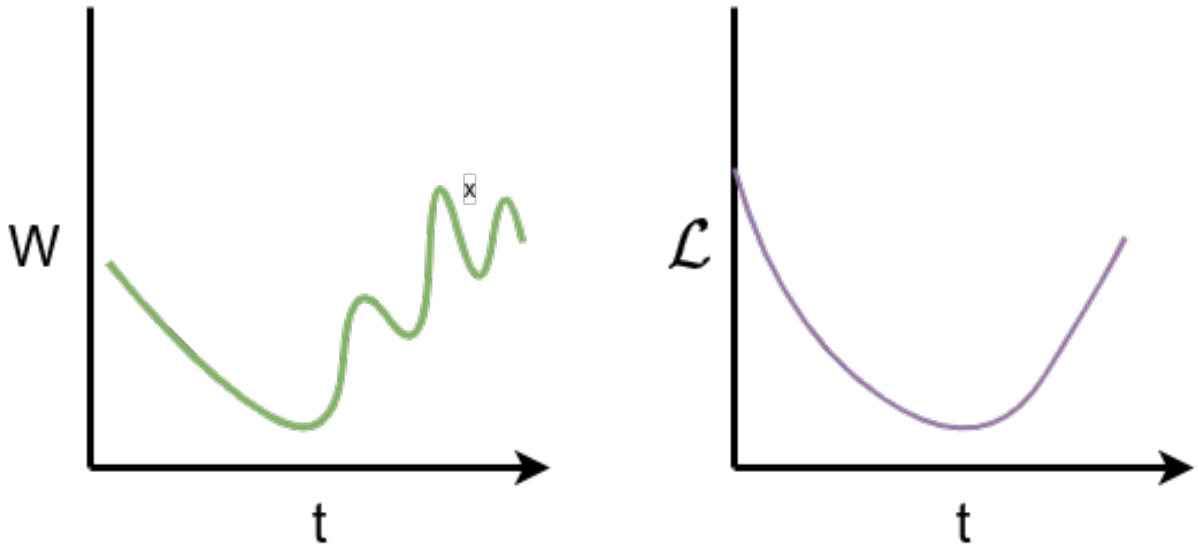



Las **ResNet** (Residual Networks) ofrecen varios beneficios para abordar el problema del desvanecimiento del grandiente:

- Facilitan el entrenamiento de redes más profundas al permitir que **los gradientes se propaguen directamente a través de las conexiones residuales**.
- Evitan la degradación del rendimiento a medida que se aumenta la profundidad de la red.
- Permiten el entrenamiento de arquitecturas extremadamente profundas con **cientos o incluso miles de capas**.

# El problema del Exploding Gradient

El "exploding gradient" es otro desafío común en el entrenamiento de redes neuronales profundas. Ocurre cuando **los gradientes se vuelven cada vez más grandes** a medida que se propagan hacia atrás en las capas más profundas de la red. Esto puede llevar a **inestabilidad en el proceso de optimización** y dificultar el entrenamiento de la red.



# Como detectar y monitorizar estos problemas

Esta parte la veremos en prácticas pero existe software específico que nos permite **monitorizar los pesos de una red neuronal** durante el entrenamiento de la misma.

# Otras funciones de activación importantes: Softmax

La función de activación **softmax** es muy utilizada en redes neuronales cuando tratamos con problemas de clasificación. Tiene como entrada un vector $\mathbf{x}$ y produce una distribución de probabilidad $\mathbf{p}$ sobre $K$ clases.

Está definida como:

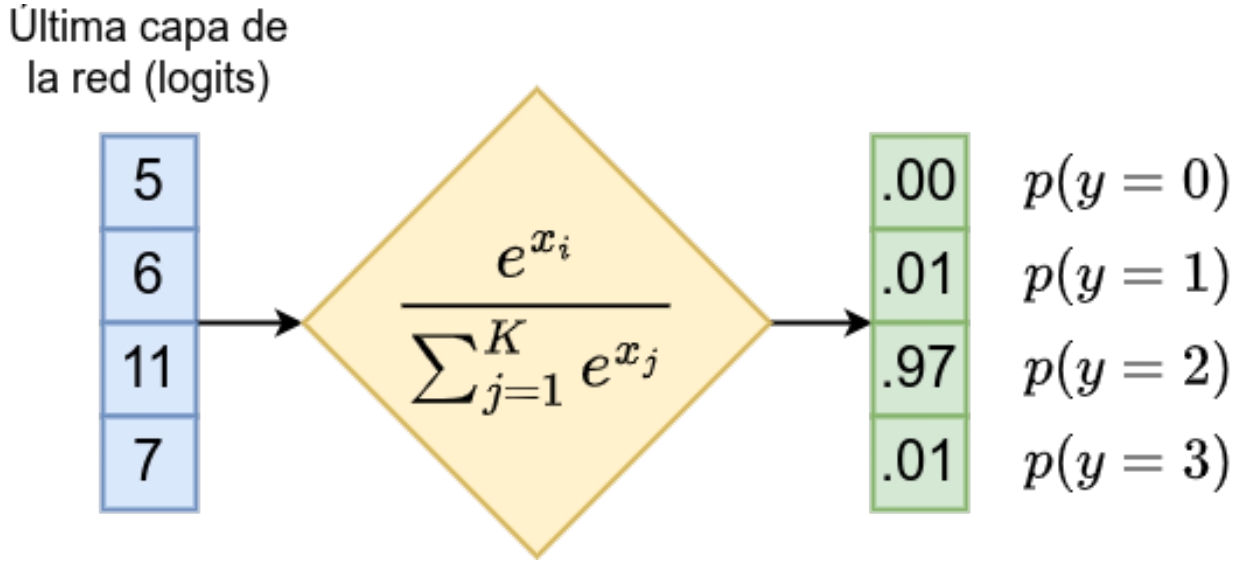
$$\text{softmax}(\mathbf{x}_i) = \frac{e^{x_i}}{\sum_{j=1}^{K} e^{x_j}} \quad \text{para } i = 1, 2, \ldots, K$$

Las principales propiedades de la función softmax son:

- La salida siempre es **positiva y suma uno**.
- Los valores de salida representan las **probabilidades de cada clase**.
- Evidentemente, es una **función diferenciable** (sino no se podría usar en una red).

# Otras funciones de activación importantes: Softmax

Ejemplo de uso de la función softmax:



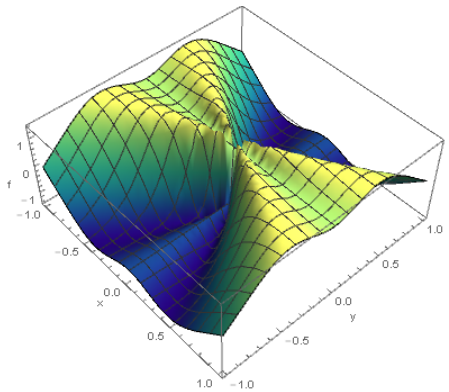

## Importante

Ten en cuenta que esta función de activación se usa generalmente en la **última capa de la red** para convertir la salida de la red a probabilidades de pertenecer a cada clase. Como veremos más adelante no es adecuada para clasificación binaria (la sigmoide sería más adecuada), solo para clasificación multiclase.

# Diferenciación automática y grafos computacionales

# Diferenciación automática

- Como hemos visto en este tema, la **diferenciación** es una pieza clave para el **cálculo de los gradientes** y por tanto para el entrenamiento de una red neuronal.
- Frameworks como **PyTorch** y **TensorFlow** proporcionan herramientas que son capaces de calcular los gradientes para cualquier arquitectura de red propuesta.
- Estos frameworks implementan un mecanismo llamado **grafo computacional** para realizar el cálculo de gradientes de manera eficiente.



# Grafo computacional

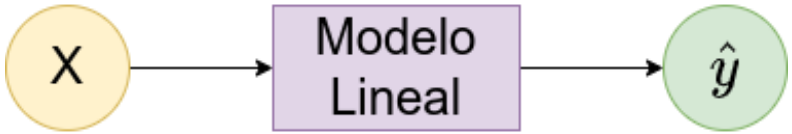
- En PyTorch y TensorFlow, las operaciones se representan mediante un **grafo computacional**.
- El grafo está compuesto por **nodos** que representan las **operaciones** y los **artistas** que indican las **dependencias entre las operaciones**.
- El grafo captura la estructura de cómputo de un modelo y permite el cálculo de gradientes eficientemente.
- Durante la **pasada hacia adelante**, el grafo se construye registrando todas las operaciones realizadas.
- Durante el **propagación hacia atrás**, el grafo se utiliza para calcular los gradientes mediante la regla de la cadena.

**Ejemplo**

A continuación veremos un ejemplo práctico de un grafo computacional para un problema simple de regresión lineal.

# Grafo computacional: Ejemplo

Supongamos que queremos usar una red neuronal con una sola neurona para construir un **modelo lineal** para aprender un problema de **regresión lineal**.




El modelo a aprender, con una sola neurona, será le siguiente:

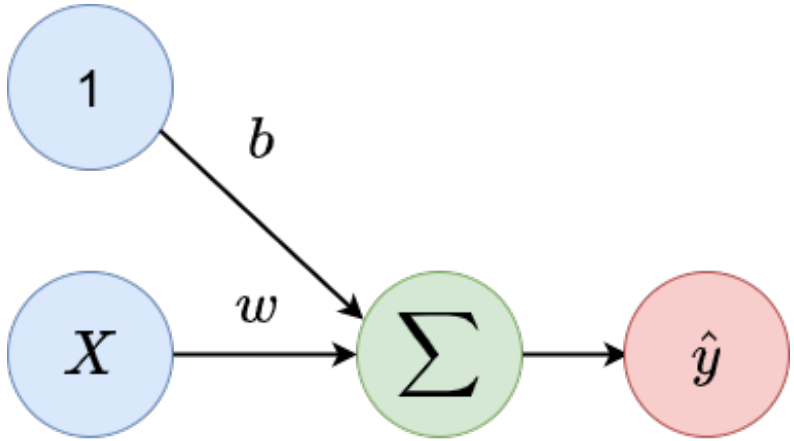
$$\hat{y} = wx + b$$

La función de pérdida que utilizaremos será el **error cuadrático**:

$$\mathcal{L} = (\hat{y} - y)^2$$

# Grafo computacional: Ejemplo

Siguiendo la notación que hemos usado en transparencias previas, el modelo ($\hat{y} = wx + b$) se podría representar de la siguiente manera:

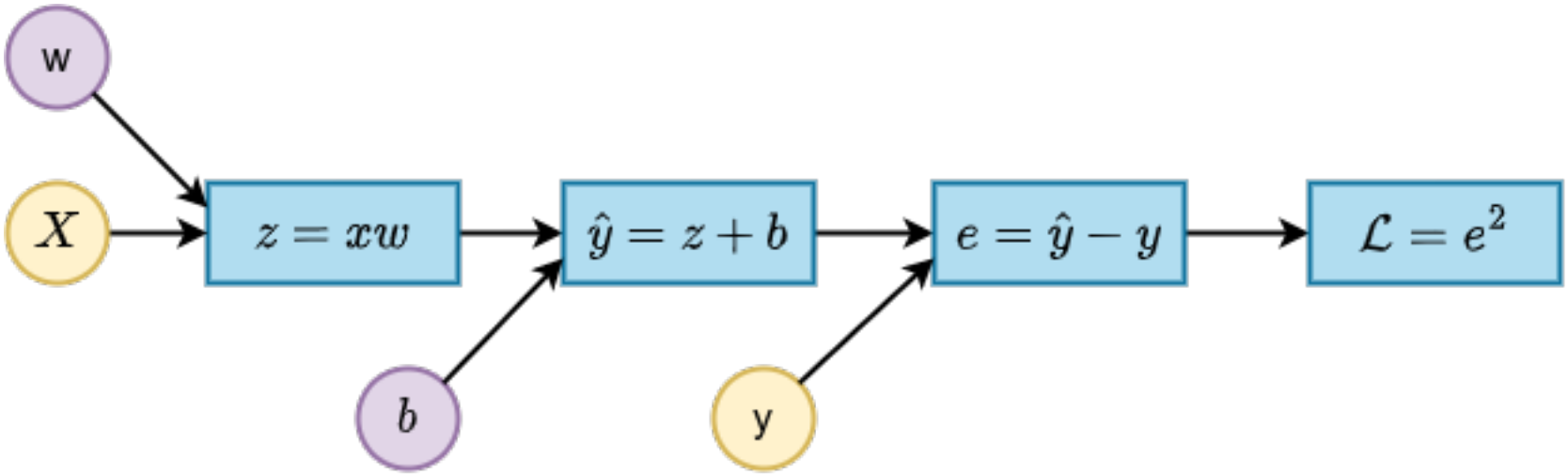



## Importante

Ten en cuenta que como la entrada solo tiene una dimensión y solo tenemos un peso, hemos evitado el uso de subíndices. El término bías, también es un parámetro a aprender indicado por la letra $b$.

# Grafo computacional: Ejemplo

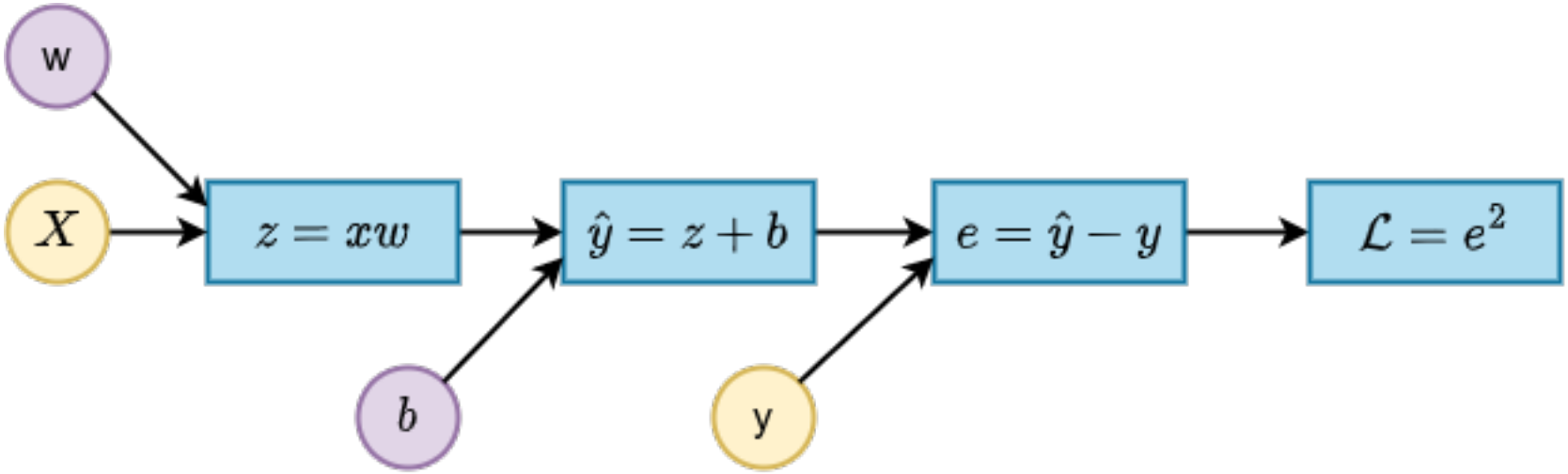
El **grafo computacional** del modelo sería el siguiente:




**Importante**

Ten en cuenta que el grafo computacional representa las operaciones a realizar, divididas en **operaciones básicas** de las cuales **su derivada es conocida**.

# Grafo computacional: Ejemplo

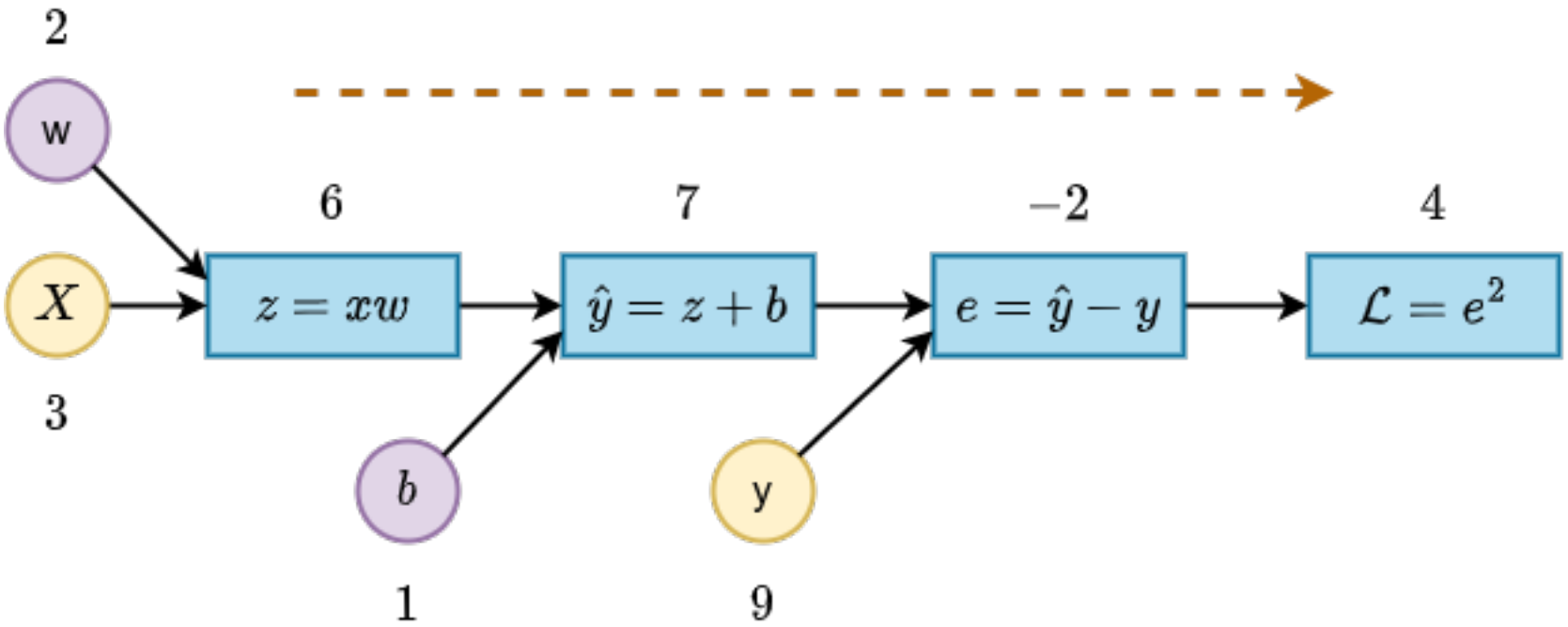



En este grafo computacional, tenemos tres tipos de nodos:

- **Nodos de entrada**, en amarillo, representan los puntos de entrada pertenecientes al conjunto de entrenamiento.
- **Nodos de parámetros**, en violeta, corresponden a los parámetros del modelo.
- **Nodos de computación**, en cajas azules, que representan las operaciones intermedias necesarias para hacer una pasada hacia adelante del modelo.

# Grafo computacional: Ejemplo

Dado este grafo computacional, es muy sencillo hacer una **pasada hacia adelante**:




## Valores iniciales

Ten en cuenta que se ha considerado unos valores para los pesos $w = 2$, $b = 1$. También se ha considerado un punto de entrada $(3, 9)$.

# Grafo computacional: Ejemplo

Para realizar una **pasada hacia atrás**, deberíamos de calcular los gradientes de la función de pérdida $\mathcal{L}$ con respecto a cada parámetro de la red ($w$ y $b$ en este caso). Ejemplo de cálculo de $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w}$:

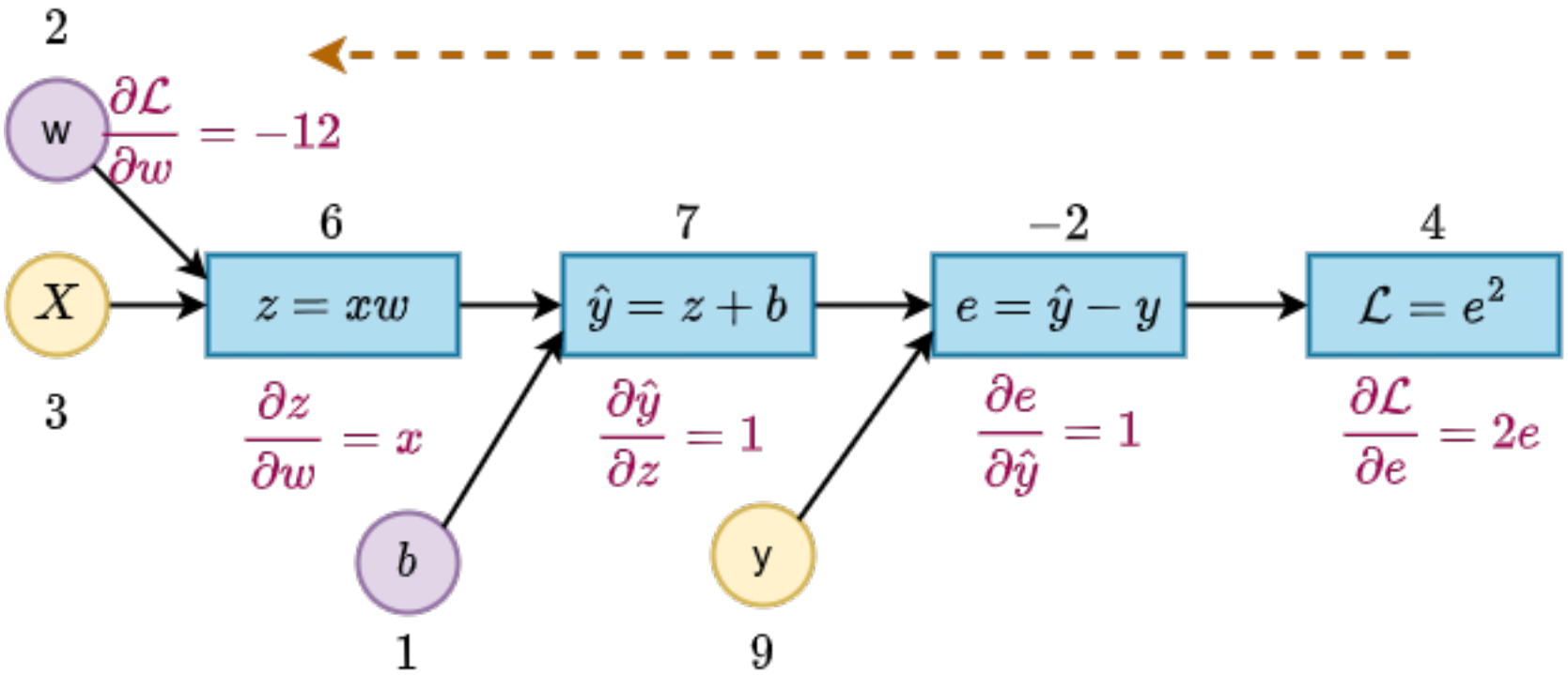
$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial e}\frac{\partial e}{\partial w} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial e}\frac{\partial e}{\partial \hat{y}}\frac{\partial \hat{y}}{\partial w} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial e}\frac{\partial e}{\partial \hat{y}}\frac{\partial \hat{y}}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial w}$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial e} = 2e;\ \frac{\partial e}{\partial \hat{y}} = 1;\ \frac{\partial \hat{y}}{\partial z} = 1;\ \frac{\partial z}{\partial w} = x = 3$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w} = -12$$

# Grafo computacional: Ejemplo

Podemos visualizar la **pasada hacia atrás** gráficamente:



# Grafo computacional: Ejemplo

El mismo cálculo se podría hacer para calcular el gradiente de $b$, $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial b}$:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial b} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial e}\frac{\partial e}{\partial b} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial e}\frac{\partial e}{\partial \hat{y}}\frac{\partial \hat{y}}{\partial b}$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial e} = 2e;\ \frac{\partial e}{\partial \hat{y}} = 1;\ \frac{\partial \hat{y}}{\partial b} = 1;$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial b} = -4$$

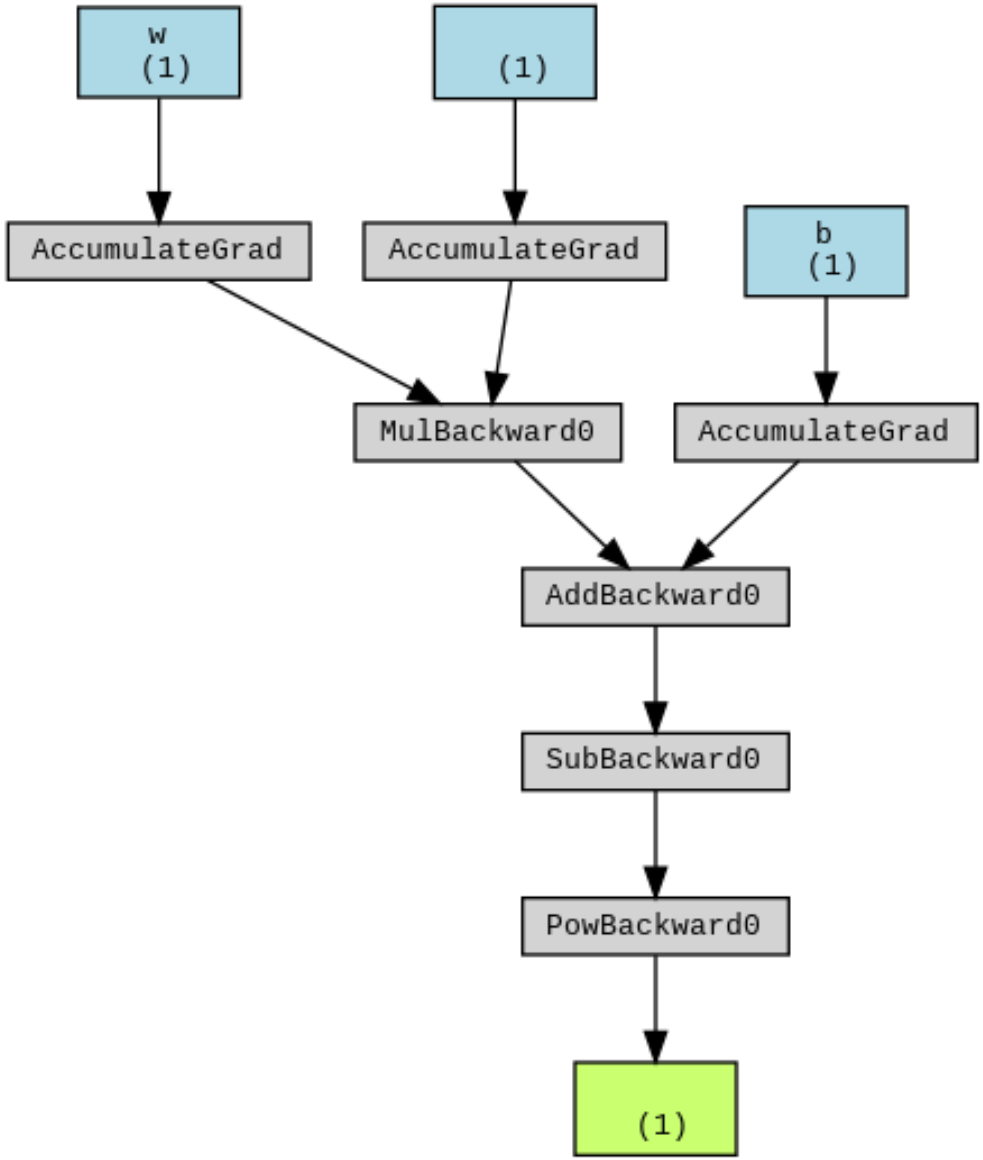
**Importante**

Como puedes ver en este ejemplo, hay varias derivadas parciales que son **comunes** para diferentes parámetros de la red. Los mecanismos de diferenciación automáticos son capaces de almacenar y **reutilizar** estos valores para evitar calcularlos multiples veces.

# Grafo computacional: Ejemplo

Ejemplo de este gráfico computacional generado por **PyTorch** y su sistema de diferenciación automática **AutoGrad**:

```
z = w*x
y_hat = z + b
e = (y_hat - y_true)
l = e ** 2
l.backward()
```



# Diferenciación automática

Para que un sistema de diferenciación automática pueda funcionar:

- Los **bloques** de la red tienen que ser **diferenciables**, incluida la función de pérdida.
- Los **bloques** de la red deben estar **implementados** en el framework correspondiente.
- Los frameworks de aprendizaje profundo proveen maneras de **extenderlos** creando nuevos bloques para los que nosotros mismos indicamos la manera de derivarlos.

**Nota**

Los frameworks de aprendizaje profundo proveen los bloques más comunes para la creación de redes neuronales, incluyendo funciones de pérdida, funciones de activación, etc. Esto hace que **la diferenciación sea un aspecto transparente** para los usuarios.

# Redes DAG

# Redes DAG

Hasta ahora todos los conceptos que hemos visto se basan en **redes totalmente conectadas**. Realmente muchas de las arquitecturas de redes neuronales van más allá de esta arquitectura, utilizando por ejemplo:

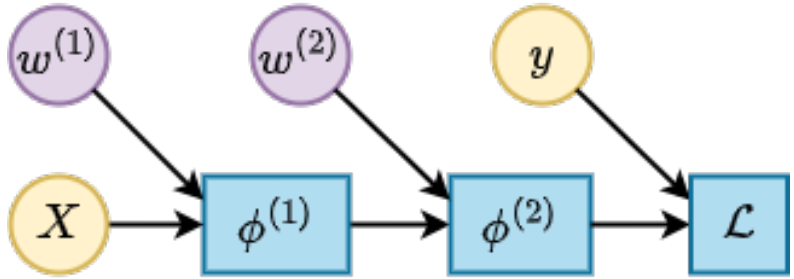
- **Conexiones no lineales**, es decir, cuando la salida de una capa no se conecta necesariamente con la entrada de la siguiente (un ejemplo son las ResNet vistas anteriormente).
- **Reutilización de pesos** en diferentes partes de la red. Por ejemplo en las redes convolucionales.

## Redes DAG

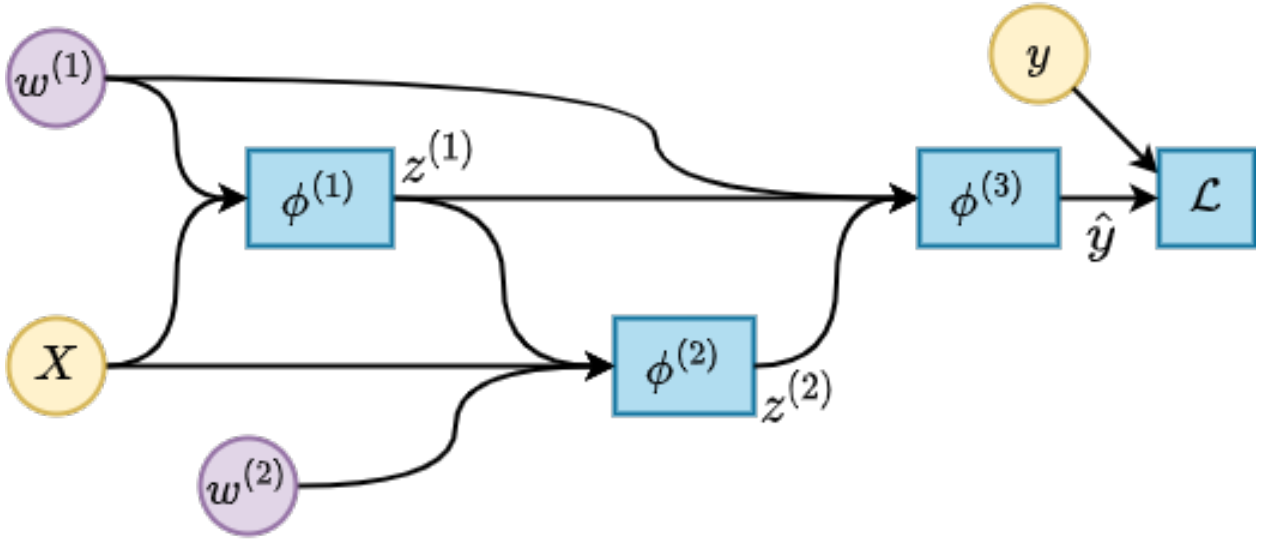
Las redes DAG (Grafo Dirigido Acíclico) permiten generalizar el concepto de red totalmente conectada para permitir arquitecturas más complejas.

# Redes DAG

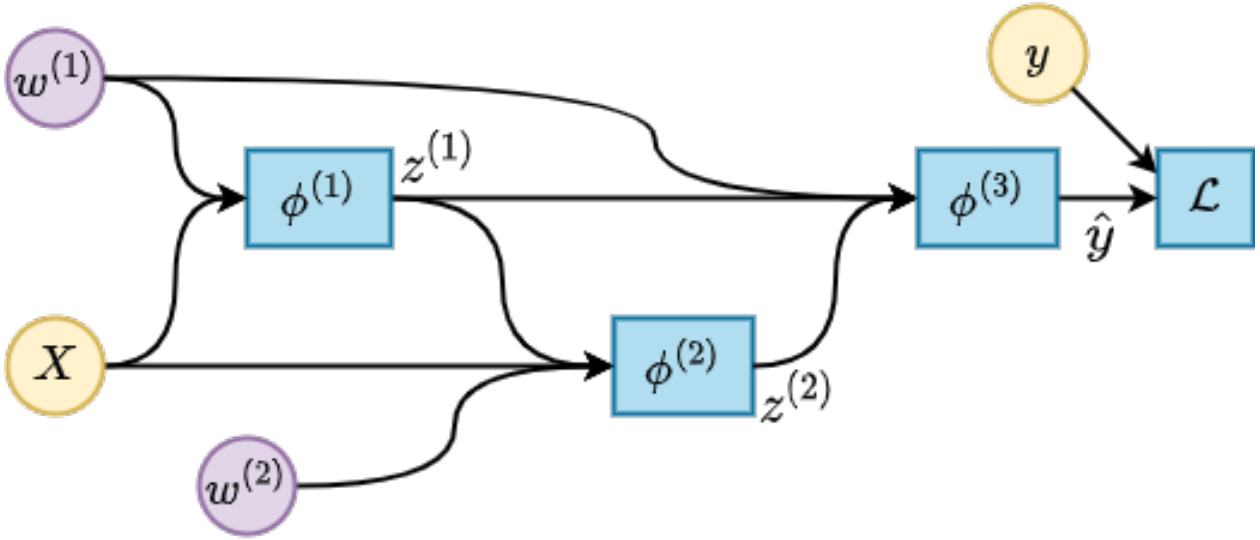
Vamos a simplificar el grafo computacional de una red totalmente conectada con dos capas:




Con las redes DAG, podemos representar otros tipos de arquitecturas:



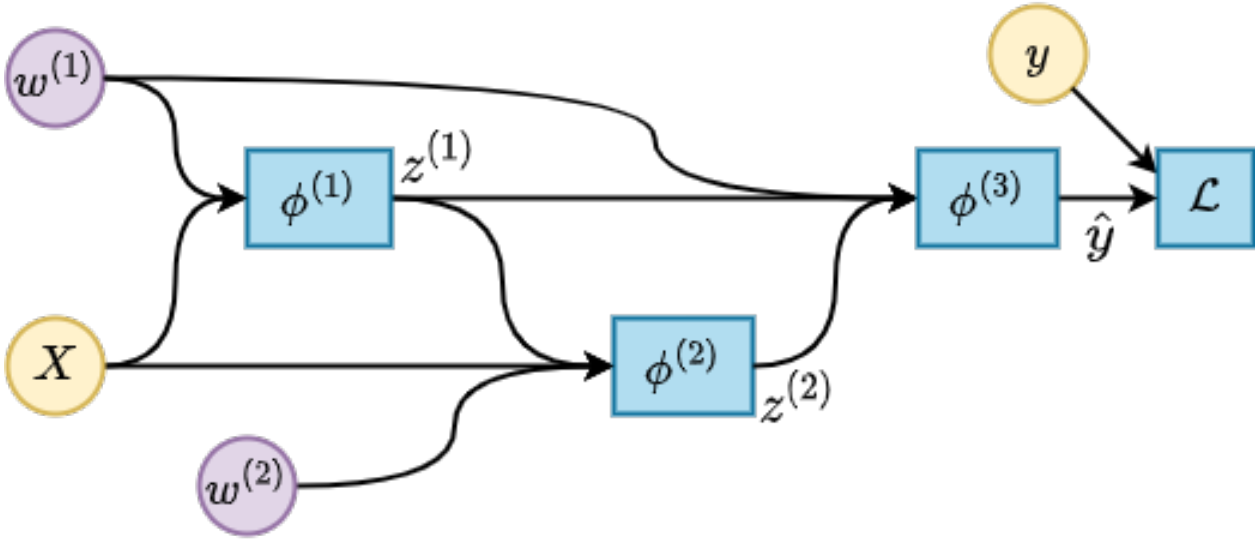
# Redes DAG: Pasada hacia adelante




Donde:

$$z^{(1)} = \phi^{(1)}(X; w^{(1)}) = w^{(1)}X$$

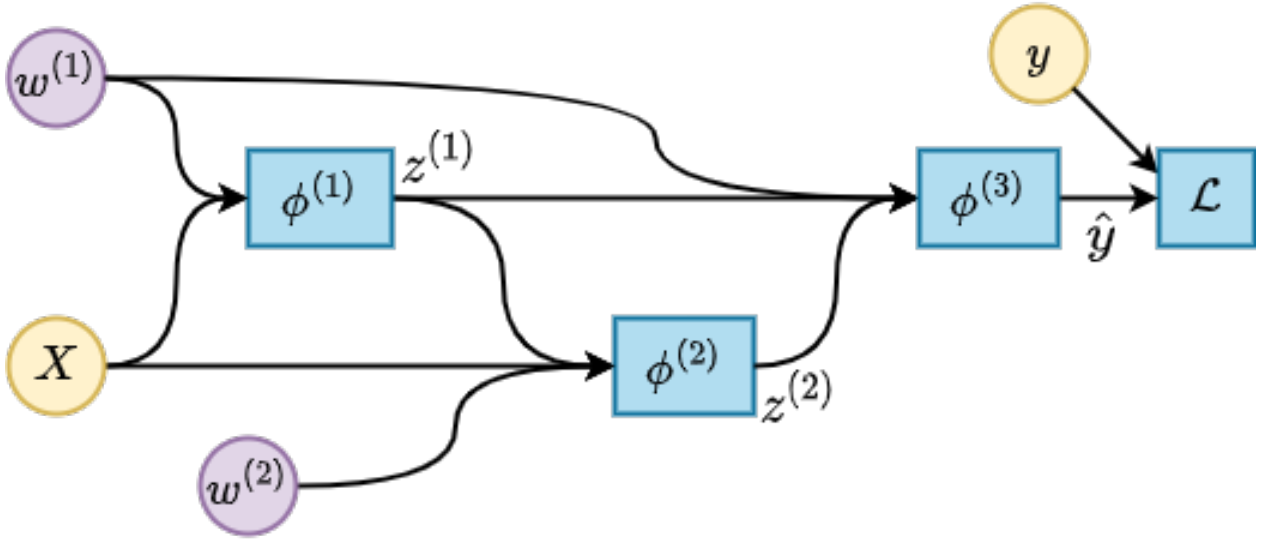
# Redes DAG: Pasada hacia adelante




Donde:

$$z^{(1)} = \phi^{(1)}(X; w^{(1)}) = w^{(1)}X$$
$$z^{(2)} = \phi^{(2)}(X, z^{(1)}; w^{(2)}) = w^{(2)}(z^{(1)} + X)$$

# Redes DAG: Pasada hacia adelante



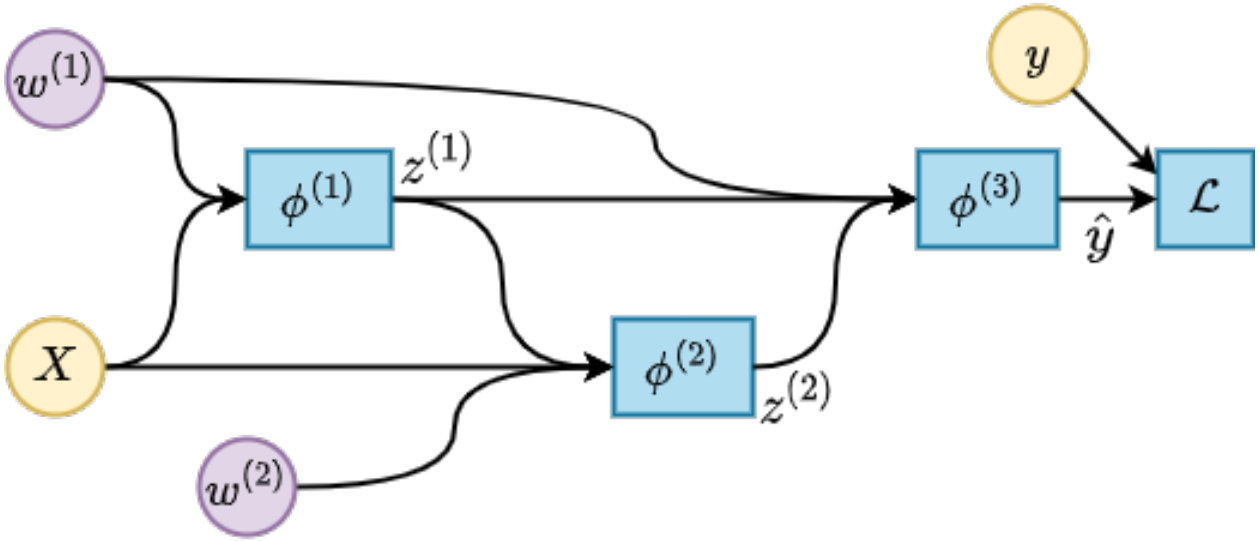

Donde:

$$z^{(1)} = \phi^{(1)}(X; w^{(1)}) = w^{(1)}X$$
$$z^{(2)} = \phi^{(2)}(X, z^{(1)}; w^{(2)}) = w^{(2)}(z^{(1)} + X)$$
$$\hat{y} = \phi^{(3)}(z^{(1)}, z^{(2)}; w^{(1)}) = w^{(1)}(z^{(1)} + z^{(2)})$$

**Nota**

Ten en cuenta que podríamos haber definido las funciones $\phi$ de otra manera y obtener un gráfico computacional diferente.

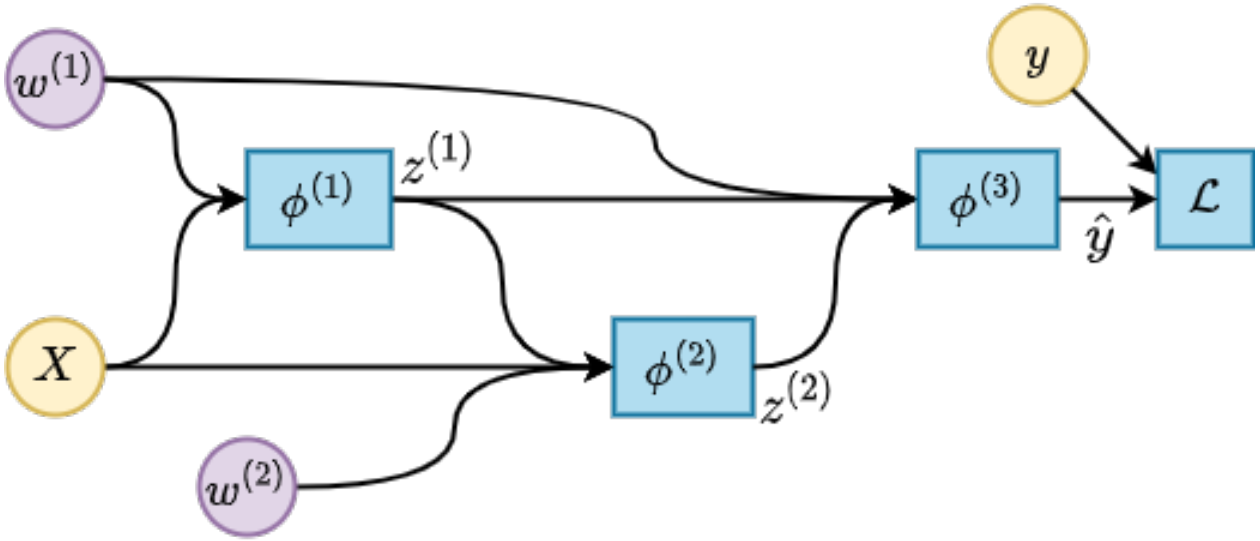
# Redes DAG: Pasada hacia atrás




Como siempre, en la **pasada hacia atrás**, estamos interesados en calcular el gradiente, es decir, la derivada parcial la función de pérdida $\mathcal{L}$ con respecto a los pesos:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w^{(1)}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{y}} \frac{\partial \hat{y}}{\partial w^{(1)}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{y}} \left( \frac{\partial \hat{y}}{\partial z^{(1)}} \frac{\partial z^{(1)}}{\partial w^{(1)}} + \frac{\partial \hat{y}}{\partial z^{(2)}} \frac{\partial z^{(2)}}{\partial w^{(1)}} \right)$$

# Redes DAG: Pasada hacia atrás

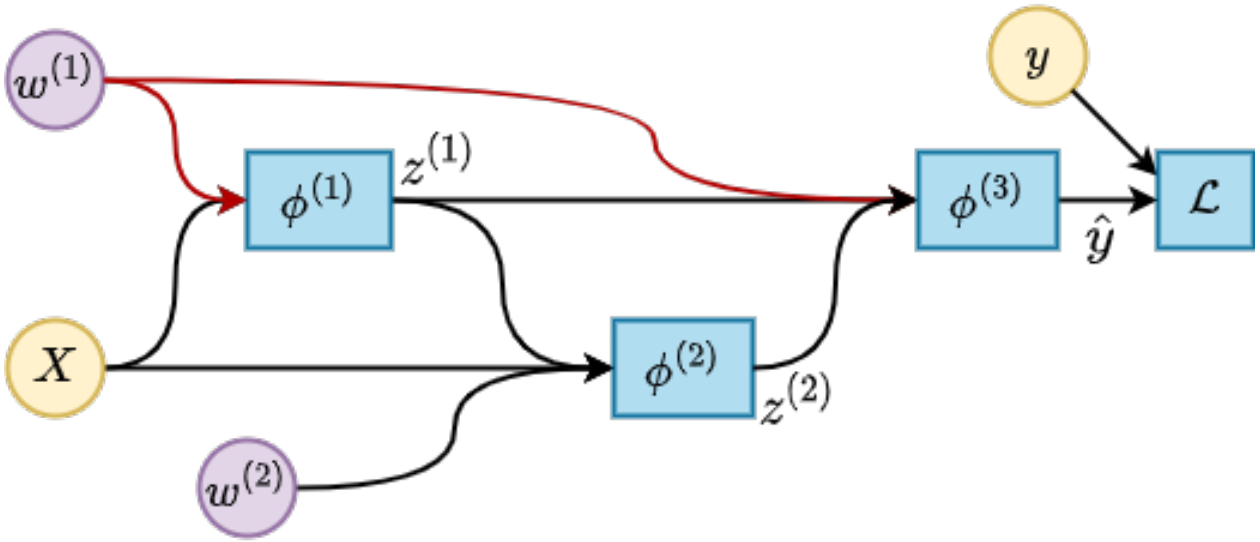



Como siempre, en la **pasada hacia atrás**, estamos interesados en calcular el gradiente, es decir, la derivada parcial la función de pérdida $\mathcal{L}$ con respecto a los pesos:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w^{(1)}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{y}} \frac{\partial \hat{y}}{\partial w^{(1)}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{y}} \left( \frac{\partial \hat{y}}{\partial z^{(1)}} \frac{\partial z^{(1)}}{\partial w^{(1)}} + \frac{\partial \hat{y}}{\partial z^{(2)}} \frac{\partial z^{(2)}}{\partial w^{(1)}} \right)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w^{(2)}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{y}} \frac{\partial \hat{y}}{\partial w^{(2)}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{y}} \frac{\partial \hat{y}}{\partial z^{(2)}} \frac{\partial z^{(2)}}{\partial w^{(2)}}$$

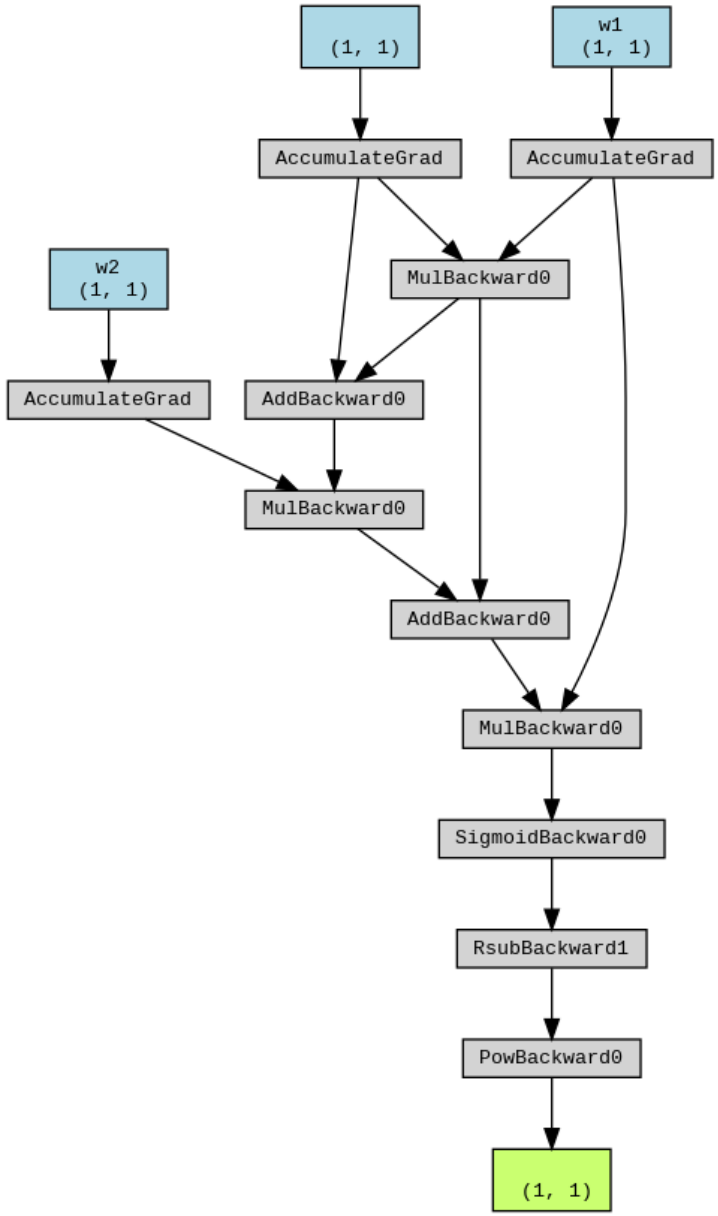
# Redes DAG: Reutilización de pesos




En la red anterior podemos ver como el peso $w^{(1)}$ se **reutiliza** en dos partes de la red. Veremos como esto será un procedimiento común en varias arquitecturas que veremos en temas posteriores.

# Redes DAG: Grafo computacional

A la derecha se muestra el **gráfico computacional** en PyTorch correspondiente a la red anterior, considerando que la función de pérdida es MSE y tenemos una función de activación sigmoide antes de la última capa.




## Nota

Puedes comprobar como los frameworks de aprendizaje profundo permiten definir este tipo de arquitecturas y operar con ellas sin ningún tipo de problema.