



ugr | Universidad
de **Granada**

TRABAJO FIN DE GRADO
INGENIERÍA INFORMÁTICA

**Implementación optimizada sobre
sistemas heterogéneos de algoritmos de
Deep Learning para clasificación de
imágenes**

Autor
David Sánchez Pérez

Directores
José Miguel Mantas Ruiz



ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍAS INFORMÁTICA Y DE
TELECOMUNICACIÓN

—
Granada, Septiembre de 2024



ugr | Universidad
de Granada

Implementación optimizada sobre sistemas heterogéneos de algoritmos de Deep Learning para clasificación de imágenes

Autor

David Sánchez Pérez

Directores

José Miguel Mantas Ruiz

Implementación optimizada sobre sistemas heterogéneos de algoritmos de Deep Learning para clasificación de imágenes

David Sánchez Pérez

Palabras clave: Inteligencia Artificial, Aprendizaje Automático, Aprendizaje Profundo, Arquitectura de Redes Neuronales, Procesamiento de Imágenes, Algoritmos de Aprendizaje Automático, Implementación en C++, Paralelización con OpenMP, Multihilo, Computación en GPU, Programación CUDA, NVIDIA CUDA, Biblioteca cuDNN, Implementaciones Personalizadas

Resumen

Este *Trabajo de Fin de Grado* se centra en la aplicación de la computación heterogénea a bajo nivel para optimizar el rendimiento de redes neuronales convolucionales (CNNs). Las CNNs son esenciales en una variedad de campos, incluyendo el reconocimiento de imágenes, la visión artificial, la detección de objetos y el procesamiento del lenguaje natural.

El enfoque del proyecto es diseñar y desarrollar diversas implementaciones para optimizar la combinación de CPUs y GPUs en algoritmos de aprendizaje profundo. En primer lugar, se diseñará la arquitectura de las redes neuronales convolucionales a implementar. A continuación, se llevará a cabo una implementación secuencial en CPU, seguida de una implementación paralela en CPU utilizando OpenMP. Posteriormente, se desarrollará un sistema heterogéneo empleando CUDA, y, finalmente, se implementará otro sistema heterogéneo utilizando la biblioteca cuDNN.

Cada implementación será construida desde cero, sin depender de bibliotecas o frameworks externos, salvo por OpenMP, CUDA y cuDNN, con el objetivo de consolidar los conocimientos sobre CNNs y su optimización en sistemas heterogéneos.

Optimized Implementation of Deep Learning Algorithms for Image Classification on Heterogeneous Systems

David Sánchez Pérez

Keywords: Artificial Intelligence, Machine Learning, Deep Learning, Computer Vision, Neural Network Architecture, Image Processing, Machine Learning Algorithms, C++ Implementation, OpenMP Parallelization, Multithreading, GPU Computing, CUDA Programming, NVIDIA CUDA, cuDNN Library, Custom Implementations

Abstract

This *Bachelor's Thesis* focuses on the application of low-level heterogeneous computing to optimize the performance of convolutional neural networks (CNNs). CNNs are crucial in various fields, including image recognition, computer vision, object detection, and natural language processing.

The project's approach is to design and develop several implementations to enhance the synergy between CPUs and GPUs in deep learning algorithms. First, the architecture of the convolutional neural networks to be implemented will be designed. Next, a sequential implementation on CPU will be carried out, followed by a parallel CPU implementation using OpenMP. Subsequently, a heterogeneous system using CUDA will be developed, and finally, another heterogeneous system utilizing the cuDNN library will be implemented.

Each implementation will be built from scratch, without relying on external libraries or frameworks, except for OpenMP, CUDA, and cuDNN, with the aim of consolidating knowledge about CNNs and their optimization on heterogeneous systems.

Yo, **David Sánchez Pérez**, alumno de la titulación Grado en Ingeniería Informática de la **Escuela Técnica Superior de Ingenierías Informática y de Telecomunicación de la Universidad de Granada**, con DNI 77240989C, autorizo la ubicación de la siguiente copia de mi Trabajo Fin de Grado en la biblioteca del centro para que pueda ser consultada por las personas que lo deseen.

Fdo: David Sánchez Pérez

Granada a 30 de Agosto de 2024.

D. José Miguel Mantas Ruiz, Profesor del Departamento Lenguajes y Sistemas Informáticos de la Universidad de Granada.

Informa:

Que el presente trabajo, titulado *Implementación optimizada sobre sistemas heterogéneos de algoritmos de Deep Learning para clasificación de imágenes*, ha sido realizado bajo su supervisión por **David Sánchez Pérez**, y autorizo la defensa de dicho trabajo ante el tribunal que corresponda.

Y para que conste, expiden y firman el presente informe en Granada a 30 de Agosto de 2024.

El director:

José Miguel Mantas Ruiz

Índice general

1. Introducción	1
1.1. Resumen	1
1.2. Objetivos	3
1.2.1. Objetivos de aprendizaje	3
1.2.2. Objetivos de diseño e implementación	4
1.3. Planificación	4
1.4. Estimación de costos	6
1.4.1. Costos de personal	6
1.4.2. Costos de equipo	6
1.4.3. Resumen total de costos	7
2. Conceptos previos	9
2.1. Machine Learning	9
2.2. Aprendizaje supervisado	10
2.3. División de datos en entrenamiento y test	10
2.4. Redes Neuronales Totalmente Conectadas	11
2.4.1. Neurona	11
2.4.2. Estructura por capas	12
2.4.3. Funciones de activación	12
2.4.4. Capa SoftMax	14
2.4.5. Tipos de codificaciones de etiquetas	15
2.4.6. Función de error o pérdida	15
2.4.7. Precisión	15
2.4.8. Descenso del gradiente	17
2.4.9. Inicialización de pesos	17
2.4.10. Inicialización de sesgos	17
2.4.11. Retropropagación en la capa SoftMax	19
2.4.12. Retropropagación en redes neuronales totalmente conectadas	20
2.4.13. Gradiente respecto a sesgos	22
2.5. Redes Neuronales Convolucionales	22
2.5.1. Introducción a CNNs	23
2.5.2. Estructura por capas	24

2.5.3.	Capa convolucional	25
2.5.4.	Retropropagación en capas convolucionales	31
2.5.5.	Retropropagación en capas convolucionales con relleno	36
2.5.6.	Capa de agrupación máxima	37
2.5.7.	Capa de aplanado	39
2.6.	OpenMP	41
2.7.	CUDA	42
2.7.1.	Gestión de memoria	42
2.7.2.	Kernels	43
2.7.3.	Jerarquía de hebras	43
2.8.	cuDNN (Deep Neural Network)	44
2.8.1.	Manejador	44
2.8.2.	Tensores	44
2.8.3.	Principales funciones	47
3.	Paralelización con sistemas homogéneos y heterogéneos	49
3.1.	Tipos de paralelismo	49
3.2.	Paralelización en sistemas homogéneos mediante OpenMP . .	50
3.3.	Paralelización en sistemas heterogéneos	51
3.3.1.	GEMM	51
3.3.2.	Convolución como GEMM	51
3.3.3.	Memoria requerida al emplear GEMM	53
3.3.4.	Retropropagación GEMM en capa convolucional . . .	54
3.3.5.	Capa totalmente conectada como GEMM [1]	56
3.3.6.	Multiplicación de matrices en CUDA	62
3.3.7.	Flujo de ejecución	65
4.	Comparación entre distintas implementaciones	67
4.0.1.	Modelos a emplear	67
4.0.2.	Bases de datos	70
4.0.3.	Resultados en entrenamiento	70
4.0.4.	Comparación de rendimiento	72
5.	Conclusiones y trabajo futuro	77
A.	cuDNN, Principales funciones	79
B.	Planificación detallada	85
C.	Retropropagación en capa SoftMax	91
C.1.	Cálculo del gradiente de la función de error	91
C.2.	Derivada de softmax con respecto a su entrada, $\frac{\partial O_i}{\partial Z_k}$	92
C.3.	Caso $\frac{\partial S(Z_i)}{\partial Z_i}$	92
C.3.1.	Caso $\frac{\partial S(Z_i)}{\partial Z_j}$, con $i \neq j$	93

C.4. Combinación de casos	93
C.5. Simplificación One-Hot	94
D. Retropropagación en redes neuronales rotalmente conectadas	97
D.1. Retropropagación con 1 capa oculta [2] [3]	97
D.1.1. Capa SoftMax	98
D.1.2. Pesos capas h1-SoftMax	99
D.1.3. Sesgos capa softmax	99
D.1.4. Capa oculta h1	100
D.1.5. Pesos capas entrada-h1	101
D.1.6. Sesgos capa h1	102
D.1.7. Capa de entrada	102
D.2. Retropropagación con 2 capas ocultas	104
D.2.1. Capa SoftMax	104
D.2.2. Pesos capas h2-SoftMax	105
D.2.3. Sesgos capa softmax	105
D.2.4. Capa oculta h2	106
D.2.5. Pesos capas h1-h2	107
D.2.6. Sesgos capa h2	108
D.2.7. Capa oculta h1	108
D.2.8. Pesos capa input-h1	110
D.2.9. Sesgos capa h1	110
D.2.10. Capa input	111
D.3. Conclusiones	112
D.3.1. Gradiente respecto a la entrada de la capa	112
D.3.2. Gradiente respecto a los pesos	113
D.3.3. Gradiente respecto a sesgos	113
E. Retropropagación en capas convolucionales	115
E.1. Sumatoria de gradientes	115
E.1.1. Gradiente de Y_{11}^c	116
E.1.2. Gradiente de Y_{12}^c	117
E.1.3. Gradiente de Y_{21}^c	118
E.1.4. Gradiente de Y_{22}^c	119
E.1.5. Gradiente respecto a pesos como convolución	119
E.1.6. Gradiente respecto a entrada como convolución	120
E.2. Retropropagación con relleno	123
E.2.1. Gradiente de Y_{11}^c	123
E.2.2. Gradiente de Y_{12}^c	124
E.2.3. Gradiente de Y_{13}^c	125
E.2.4. Gradiente de Y_{21}^c	126
E.2.5. Gradiente de Y_{22}^c	127
E.2.6. Gradiente de Y_{23}^c	127

E.2.7. Gradiente de Y_{31}^c	128
E.2.8. Gradiente de Y_{32}^c	129
E.2.9. Gradiente de Y_{33}^c	130
E.2.10. Gradiente respecto a pesos como convolución	130
E.2.11. Gradiente respecto a entrada como convolución	131

Índice de figuras

2.1. Esquema de una neurona	11
2.2. Esquema de una capa de neuronas	12
2.3. Imagen de la función de activación ReLU	13
2.4. Imagen de la función de activación Sigmoide	14
2.5. Imagen de la función de activación SoftMax	14
2.6. Ejemplo de funcionamiento del descenso del gradiente	17
2.7. Estructura de una red totalmente conectada con una capa oculta, y con softmax en la última capa	19
2.8. Retropropagación en la capa l	21
2.9. Retropropagación respecto a los pesos entre la capa l-1 y l . .	22
2.10. Esquema de las dimensiones en una capa convolucional de una red neuronal convolucional	23
2.11. Estructura por capas en una red neuronal convolucional . .	24
2.12. Componentes en una capa convolucional	25
2.13. Propagación hacia delante en una capa convolucional	26
2.14. Propagación hacia delante en una capa convolucional con varios canales de profundidad	27
2.15. Propagación hacia delante en una capa convolucional con varios filtros	28
2.16. Relleno sobre un volumen de entrada X	29
2.17. Relleno sobre un volumen de entrada X	29
2.17. Convolución sobre X con relleno completo	30
2.18. Ejemplo de propagación hacia delante en una capa convolucional	31
2.19. Cálculo del gradiente de la pérdida con respecto a cada filtro como convolución entre la entrada X y la salida Y	33
2.20. Inversión de los pesos en K tanto horizontal como verticalmente	34
2.21. Cálculo del gradiente de la pérdida con respecto a cada valor de entrada como convolución entre los pesos K y la salida Y .	35
2.22. Cálculo del gradiente de la pérdida con respecto a la entrada X con uno y dos niveles de relleno	36
2.23. Componentes en una capa de agrupación máxima	37
2.24. Propagación hacia delante en una capa de agrupación máxima	37

2.25. Propagación hacia delante en una capa de agrupación máxima	38
2.26. Retropropagación en capa de agrupación máxima	38
2.27. Propagación hacia delante en una capa de aplanado	40
2.28. Retropropagación en una capa de aplanado	41
2.29. Jerarquía de hebras en un grid CUDA	43
2.30. Ejemplo de tensor 4D con dimensiones: N=1, C=1, H=5, y W=6	46
2.31. Ejemplo de tensor 4D NCHW con dimensiones: N=1, C=1, H=5, y W=6	46
 3.1. Flujo de las hebras en la implementación con OpenMP	51
3.2. Convolución estándar frente a convolución GEMM	53
3.3. Retropropagación respecto a la entrada en una capa convolucional de forma estándar frente a GEMM	55
3.4. Retropropagación respecto a los pesos en una capa convolucional de forma estándar frente a GEMM	56
3.5. Propagación GEMM hacia delante en una capa totalmente conectada	57
3.6. Propagación GEMM de un minibatch entero hacia delante en una capa totalmente conectada	58
3.7. Cálculo del gradiente respecto a la entrada en una capa totalmente conectada	59
3.8. Cálculo del gradiente respecto a la entrada de todo un minibatch en una capa totalmente conectada	60
3.9. Cálculo del gradiente respecto a los pesos en una capa totalmente conectada	61
3.10. Cálculo del gradiente respecto a los pesos de todo un minibatch en una capa totalmente conectada	62
3.11. Tercera implementación de multiplicación matricial con CUDA	63
3.12. Cuarta implementación de multiplicación matricial con CUDA	64
3.13. Flujo de las hebras en la implementación con CUDA	65
 4.1. Entrenamiento con CIFAR10	71
4.2. Entrenamiento con 10 Big Cats	72
4.3. Secuencial vs OpenMP	73
4.4. Ganancia de OpenMP respecto a secuencial	73
4.5. OpenMP vs CUDA vs CUDNN	74
4.6. Ganancia de CUDA y cuDNN sobre OpenMP	75
4.7. CUDA vs CUDNN	75
 C.1. Estructura de una red totalmente conectada con softmax en la última capa	91
 D.1. Red Neuronal totalmente conectada con 1 capa oculta	97
D.2. Retropropagación en la capa softmax	98

D.3. Retropropagación con respecto a pesos entre la capa oculta y la capa SoftMax	99
D.4. Imagen de los 'caminos' desde la capa softmax hasta la neurona n_0^1	100
D.5. Retropropagación con respecto a neuronas de la capa oculta h1	100
D.6. Retropropagación con respecto a los pesos entre la capa de entrada y la capa oculta h1	101
D.7. Imagen de los 'caminos' desde la capa oculta h1 hasta n_0^0	102
D.8. Retropropagación en la capa input	103
D.9. Red Neuronal totalmente conectada con 2 capas ocultas	104
D.10.Retropropagación en la capa softmax	104
D.11.Retropropagación respecto a los pesos entre la capa oculta h2 y la capa SoftMax	105
D.12.Imagen de los 'caminos' desde la capa softmax hasta n_0^2	106
D.13.Retropropagación en la capa oculta h2	106
D.14.Retropropagación respecto a los pesos entre las capas ocultas h1 y h2	107
D.15.'Caminos' desde la capa softmax hasta n_0^1	108
D.16.Retropropagación en la capa oculta h1	109
D.17.Retropropagación respecto a los pesos entre la capa de entrada y la capa oculta h1	110
D.18.'Caminos' desde la capa oculta h1 hasta n_0^0	111
D.19.Retropropagación en la capa input	111
D.20.Retropropagación en la capa l	112
D.21.Retropropagación respecto a los pesos entre la capa l-1 y l	113
E.1. Ejemplo de propagación hacia delante en una capa convolucional	115
E.2. Cálculo de Y_{12}^c mediante propagación hacia delante en una capa convolucional	117
E.3. Cálculo de Y_{21}^c mediante propagación hacia delante en una capa convolucional	118
E.4. Cálculo de Y_{22}^c mediante propagación hacia delante en una capa convolucional	119
E.5. Cálculo del gradiente de la pérdida con respecto a cada filtro como convolución entre X e Y	120
E.6. Inversión de los pesos en K tanto horizontal como verticalmente	121
E.7. Cálculo del gradiente de la pérdida con respecto a cada valor de entrada como convolución entre K e Y	122
E.8. Ejemplo de retropropagación en una capa convolucional con relleno	123
E.9. Retropropagación de Y_{11}^c	123
E.10.Retropropagación de Y_{12}^c	124
E.11.Retropropagación de Y_{13}^c	125

E.12.Retropropagación de Y_{21}^c	126
E.13.Retropropagación de Y_{22}^c	127
E.14.Retropropagación de Y_{23}^c	127
E.15.Retropropagación de Y_{31}^c	128
E.16.Retropropagación de Y_{32}^c	129
E.17.Retropropagación de Y_{33}^c	130
E.18.Cálculo del gradiente de la pérdida con respecto a cada filtro como convolución entre X e Y	131
E.19.Cálculo del gradiente de la pérdida con respecto a la entrada como convolución	132
E.20.Cálculo del gradiente de la pérdida con respecto a la entrada X con uno y dos niveles de relleno	133

Índice de cuadros

1.1.	Planificación del proyecto	5
1.2.	Costes del proyecto	6
1.3.	Costes totales del proyecto	7
4.1.	Comparación rendimiento CuDNN vs CUDA	76
B.1.	Planificación del proyecto	89

Capítulo 1

Introducción

Este capítulo, establece el marco general del proyecto. Comienza con un Resumen que ofrece una visión general del contexto, propósito y relevancia del trabajo. A continuación, se presentan los Objetivos del proyecto, divididos en Objetivos de aprendizaje, enfocados en la adquisición de conocimientos teóricos, y Objetivos de diseño e implementación, que buscan aplicar estos conocimientos en la práctica. El capítulo, también incluye una sección de Planificación, donde se detalla la estructura temporal del proyecto, y finaliza con una Estimación de costos, donde se analizan los recursos financieros y materiales requeridos para su ejecución.

1.1. Resumen

En los inicios, las computadoras empleaban exclusivamente CPUs (Central Processing Units) [4] para llevar a cabo tareas de programación de propósito general. Sin embargo, desde la última década empezaron a surgir otros elementos de procesamiento como las GPUs (Graphics Processing Units) [5], las cuales se desarrollaron inicialmente para realizar cálculos gráficos paralelos especializados. Con el tiempo, han ido evolucionando tanto en prestaciones como en versatilidad, permitiendo a día de hoy su uso en tareas de cómputo paralelo de propósito general de alto rendimiento.

Gracias a la difusión de las GPUs en aplicaciones de propósito general, se logró el cambio de sistemas homogéneos a heterogéneos [6], el cual destaca por ser un logro de gran importancia y considerable magnitud en toda la historia de la computación de alto rendimiento.

La computación homogénea emplea uno o más procesadores de la misma arquitectura para ejecutar una aplicación. Por otro lado, la computación heterogénea no se rige por esas reglas y rompe dicha limitación, empleando con ello un conjunto de arquitecturas distintas para ejecutar una misma aplicación, de tal forma que cada arquitectura se encargue de aquellas tareas para las que se encuentra mejor preparada, obteniendo por ello una mejora

notable en cuanto a rendimiento.

En el campo de la computación heterogénea destaca el uso agrupado de CPUs y GPUs, pues su conjunto forma una excelente complementación. Mientras que la CPU se encuentra optimizada para tareas dinámicas de ráfagas de cómputo cortas y un flujo de control impredecible, la GPU se especializa justamente en el caso contrario: ráfagas de cómputo muy costosas pero con un flujo de control simple.

De esta forma, si una tarea presenta un número reducido de datos, una lógica de control sofisticada y un bajo nivel de paralelismo, se asignará a la CPU. Si por el contrario, esta presenta una cantidad exuberante de datos, así como un alto grado de paralelismo al procesar dichos datos, se asignará a la GPU pues presenta un gran número de núcleos y puede dar soporte a una cantidad de hebras mucho mayor que la posible mediante CPU. [7]

Tal y como se explicará en detalle en secciones posteriores, el patrón de entrenamiento en redes neuronales convolucionales o CNNs (Convolutional Neural Networks) [8] es computacionalmente intensivo y altamente paralelo [9]. Por ello, se adoptará un enfoque de computación heterogénea en este ámbito, con el propósito de acortar los tiempos de ejecución requeridos en dichos entrenamientos. Las redes neuronales convolucionales son de gran importancia y destacan por ser un subconjunto del aprendizaje automático [10] y el corazón de los algoritmos de aprendizaje profundo [11], además de potenciar las tareas de reconocimiento de imágenes [12] y visión artificial [13]. Entre sus principales usos destacan la detección de objetos en imágenes o vídeos [14], segmentación de imágenes [15], generación de imágenes [16], análisis de vídeos [17], procesamiento del lenguaje natural [18], o incluso sistemas autónomos [19], entre otros.

Con el objetivo de lograr una mayor comprensión sobre sistemas heterogéneos aplicados a redes neuronales convolucionales, a lo largo de este proyecto se desarrollarán una serie de implementaciones. Primero se empezará por una implementación secuencial que simplemente use la CPU. Después, se creará otra implementación que aproveche el paralelismo a nivel de grano grueso en CPU mediante la librería OpenMP [20]. Una vez adquiridos conocimientos sobre redes neuronales convolucionales y unas bases paralelismo a nivel de CPU, tendrá lugar la creación de una tercera implementación, caracterizada por ser el primer sistema heterogéneo de este proyecto y emplear el framework CUDA [21]. Por último, una vez entendidas las bases de CNNs, paralelismo tanto a nivel de CPU como a nivel de GPU, y sistemas heterogéneos aplicados a CNNs, se contarán con los conocimientos necesarios para crear y entender cómo funcionan realmente por debajo las librerías del sector. Por ello, se seleccionó una librería de bajo nivel y grandes prestaciones como cuDNN [22] para elaborar una última implementación y lograr obtener un mayor rendimiento, a la vez que se consolida lo aprendido durante todo el proceso.

Cabe destacar que cada una de las implementaciones a desarrollar serán de

muy bajo nivel y no se apoyarán en ninguna librería o framework externo que facilite los cálculos, con la única excepción de OpenMP, CUDA y cuDNN, tal y como se comentó anteriormente.

1.2. Objetivos

El principal objetivo de este proyecto es diseñar y desarrollar redes neuronales convolucionales (CNNs) desde sus cimientos, a un nivel de programación relativamente bajo. Esto permite una profunda comprensión de sus fundamentos y funcionamiento, comunes a bibliotecas especializadas en el campo. Para ello, se desarrollan distintas implementaciones de la misma aplicación, cada una con mejores prestaciones que la anterior.

La principal razón de este proyecto es aprender los fundamentos del machine learning aplicados a redes neuronales convolucionales, así como el diseño y desarrollo de sistemas heterogéneos de altas prestaciones, y el uso de librerías de bajo nivel del ámbito como cuDNN, que a su vez es empleada por otras librerías de más alto nivel del sector como Caffe2 [23], Keras [24], MATLAB [25], Pytorch [26], o TensorFlow [27], entre otras [28].

A continuación se desglosan en dos categorías los objetivos específicos que permiten alcanzar el objetivo principal. Los objetivos de aprendizaje se centran en la adquisición de los conocimientos teóricos requeridos para la concepción de este proyecto, mientras que los objetivos de diseño e implementación buscan llevar a la práctica dicho conocimiento teórico adquirido anteriormente, aportando con ello una experiencia de aprendizaje de mayor categoría.

1.2.1. Objetivos de aprendizaje

- **OA.1** Conocer los fundamentos del machine learning y como se aplican a CNNs.
- **OA.2** Conocer los distintos componentes de una CNN y la conexión entre los mismos.
- **OA.3** Comprender implementaciones similares a las planteadas en este proyecto para comprender y analizar las funcionalidades y propiedades que se requieren.
- **OA.4** Aprender como diseñar e implementar CNNs empleando tecnologías de programación de bajo nivel como C++.
- **OA.5** Comprender el diseño e implementación de CNNs empleando paralelización a nivel de CPU mediante OpenMP y C++.
- **OA.6** Mejorar mi aprendizaje sobre diseño e implementación de sistemas heterogéneos usando CUDA.

- **OA.7** Comprender el diseño e implementación de CNNs mediante sistemas heterogéneos usando CUDA.
- **OA.8** Aprender como diseñar e implementar CNNs mediante librerías específicas para este ámbito y de bajo nivel como cuDNN.

1.2.2. Objetivos de diseño e implementación

- **ODD.1** Diseñar e implementar CNNs a bajo nivel mediante C++.
- **ODD.2** Diseñar e implementar CNNs a bajo nivel mediante C++ y paralelización a nivel de CPU mediante OpenMP.
- **ODD.3** Diseñar e implementar CNNs a bajo nivel como sistema heterogéneo mediante C++ y CUDA.
- **ODD.4** Diseñar e implementar CNNs mediante la librería de bajo nivel cuDNN.

1.3. Planificación

Para el desarrollo de este proyecto, se ha requerido llevar a cabo una serie de tareas con diferentes dificultades e importancias. A continuación, se muestra una planificación general del mismo en la tabla 1.1, junto con las fases que componen su desarrollo, y una planificación temporal de cada apartado por separado, (para obtener información adicional, véase el apéndice B). Cabe destacar que, cada apartado, se basa en los conocimientos adquiridos en los apartados anteriores, a la vez que introduce conceptos nuevos y mejora las prestaciones del modelo. De esta manera, cada apartado supondrá retos nuevos nunca antes vistos y, si un apartado anterior presenta algún fallo desconocido en el momento, se deberá volver a la etapa anterior y subsanarlo. Tras solventarlo, se podrá proseguir con la etapa posterior. Además, dada la naturaleza de ‘caja negra’ de las redes neuronales, estas presentan cierta dificultad a la hora de depurar el código. Por tanto, esto supondrá un tiempo de depuración considerable en todas y cada una de las implementaciones, tal y como se mostrará a continuación.

- **Estudio previo:** Consiste en el estudio y comprensión de cuestiones generales, dentro del campo de aprendizaje automático y visión por computador, comunes a redes neuronales totalmente conectadas, y redes neuronales convolucionales.
- **Investigación y desarrollo de redes neuronales totalmente conectadas:** En este periodo, me centré en la investigación y comprensión sobre las redes neuronales totalmente conectadas a bajo nivel. De esta manera, sabía que podría generar cualquier tipo de red totalmente

conectada de manera dinámica, sin necesidad de realizar ningún tipo de cálculo posterior, independientemente del lenguaje de programación empleado, así como del uso o no de librerías que faciliten el proceso.

- **Investigación y desarrollo de redes neuronales convolucionales:** Una vez familiarizado con redes neuronales totalmente conectadas, se trató de comprender de igual forma las redes neuronales convolucionales, pues se encuentran ampliamente relacionadas.
- **Investigación y desarrollo de sistemas homogéneos con OpenMP:**

Una vez, comprendido el funcionamiento tanto de las redes neuronales totalmente conectadas, como de las redes neuronales convolucionales, me centré en reducir los tiempos de cómputo requeridos en ellas, mediante un paralelismo orientado a datos con OpenMP, (se analizará en detalle en secciones posteriores).

- **Investigación y desarrollo de sistemas heterogéneos con CUDA y cuDNN:** Con el conocimiento teórico y práctico ya adquirido sobre sistemas homogéneos, aplicados tanto a redes neuronales totalmente conectadas como a redes neuronales convolucionales, se avanza ahora hacia la exploración de sistemas heterogéneos, aplicados a estas mismas arquitecturas de redes neuronales.

Apartado	Tiempo (Horas)
Estudio previo	16
Investigación y desarrollo de redes neuronales totalmente conectadas	143
Investigación y desarrollo de redes neuronales convolucionales	152
Investigación y desarrollo de sistemas homogéneos con OpenMP	103
Investigación y desarrollo de sistemas heterogéneos con CUDA y cuDNN	282
Tiempo total:	696

Cuadro 1.1: Planificación del proyecto

1.4. Estimación de costos

Para la correcta ejecución del proyecto descrito, se ha desarrollado un plan de costos que contempla los recursos humanos, materiales y tecnológicos necesarios para completar las actividades descritas en la planificación. El presente plan se divide en las siguientes categorías: costos de personal, costos de equipos y software, y otros costos indirectos.

1.4.1. Costos de personal

El costo asociado al personal abarca las horas invertidas en cada una de las actividades planificadas en el proyecto. Para el cálculo de estos costos, se ha utilizado un valor promedio de 9€ por hora de trabajo.

Apartado	Costos (€)
Estudio previo	144
Investigación y desarrollo de redes neuronales totalmente conectadas	1287
Investigación y desarrollo de redes neuronales convolucionales	1368
Investigación y desarrollo de sistemas homogéneos con OpenMP	927
Investigación y desarrollo de sistemas heterogéneos con CUDA y cuDNN	2538
Costos de personal total:	6264

Cuadro 1.2: Costes del proyecto

En el Cuadro 1.2, se presentan los costos de personal correspondientes a cada sección del proyecto.

1.4.2. Costos de equipo

Para las implementaciones homogéneas que utilizan exclusivamente CPU, una instancia AWS comparable al equipo usado para el desarrollo de este proyecto, sería la instancia c6i.2xlarge, con un precio aproximado de 0,33€ por hora. Se estima que el costo total para el uso de esta instancia es de aproximadamente unos 92€.

En el caso de entornos heterogéneos que requieren GPU, se contempla el uso de una Nvidia Tesla T4, con un costo aproximado de 0,60 €/hora. Se estima un costo total de 138€ para su utilización en el proyecto.

1.4.3. Resumen total de costos

Considerando los costos previamente detallados, el Cuadro 1.3 proporciona un resumen integral de los costos totales asociados al proyecto. Este cuadro, integra tanto los costos de personal, como los costos derivados del uso de recursos computacionales, permitiendo una visión consolidada de la inversión total requerida. En el cuadro, se desglosan los gastos por categorías, facilitando así una evaluación clara y precisa del presupuesto del proyecto.

Apartado	Costos (€)
Costos de personal	6264
Costos de equipo	230
Costos totales:	6494

Cuadro 1.3: Costes totales del proyecto

Capítulo 2

Conceptos previos

Este segundo capítulo, establece los fundamentos teóricos esenciales para el desarrollo del proyecto. Comienza con una introducción al Machine Learning y el aprendizaje supervisado, explicando la importancia de dividir los datos en conjuntos de entrenamiento y test. Posteriormente, se profundiza en las Redes Neuronales Totalmente Conectadas, detallando desde la estructura de una neurona hasta conceptos avanzados como funciones de activación, retropropagación, y optimización mediante el descenso del gradiente.

El capítulo también aborda las Redes Neuronales Convolucionales (CNNs), describiendo su estructura y funcionamiento, incluyendo tanto la retropropagación en capas convolucionales, como la retropropagación en capas de agrupación máxima. Además, se exploran tecnologías clave para la implementación eficiente de redes neuronales, como OpenMP, CUDA y cuDNN, explicando su gestión de memoria, jerarquía de hebras y principales funciones. Este capítulo, proporciona una base teórica sólida que sustentará las implementaciones y experimentos presentados en el resto del proyecto.

2.1. Machine Learning

El término Machine Learning (ML), en castellano aprendizaje automático, designa el campo de las ciencias de computación que en vez de enfocarse en el diseño de algoritmos explícitos, opta por el estudio de técnicas de aprendizaje. Este enfoque tiene un gran éxito en tareas computacionales donde no es factible diseñar un algoritmo de forma explícita. [9]

En vez de averiguar las distintas reglas a seguir para llegar a una solución, esta alternativa permite simplemente suministrar ejemplos de lo que debería pasar en distintas situaciones, y dejar que la máquina aprenda y extraiga ella misma sus propias conclusiones. De esta forma, el procedimiento en aprendizaje supervisado (el tipo de aprendizaje en que nos centramos) consiste en 'entrenar' con una muestra de N ejemplos, extraer información de ellos, y posteriormente poder evaluar de forma 'correcta' (bajo un margen de error

controlado) otra muestra de M ejemplos, siendo $M > N$. [29]
Este enfoque ha contribuido al avance de áreas como reconocimiento de voz, visión por ordenador, procesamiento de lenguaje natural, etc.

2.2. Aprendizaje supervisado

El aprendizaje supervisado [30] se caracteriza por, a partir de una serie de datos de entrada $X = \{x_1, x_2, \dots\}$ y sus etiquetas asociadas $Y = \{y_1, y_2, \dots\}$ (cada etiqueta $y_i \in Y$ representa la clase a la que pertenece su elemento asociado $x_i \in X$ [31]), entrenar un modelo (un programa informático que aproxima el comportamiento objetivo) con estos. Así, mediante un proceso iterativo, este va aprendiendo de forma que al finalizar dicho entrenamiento el mismo modelo sea capaz de tomar mejores decisiones que antes de comenzarlo.

Suponiendo que nuestra muestra tiene N datos, tanto X como Y se unen para formar lo que se conoce como dataset $D = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_N, y_N)\}$. Para que el aprendizaje sea posible, debe existir una función $F: X \rightarrow Y$ tal que $y_i = F(x_i)$ para $i \in \{1 \dots N\}$. De esta forma, en función del dataset D , el modelo tratará de encontrar una función G que aproxime a F para dicho conjunto. Además, se suelen aplicar técnicas que permitan una mejor generalización del modelo, expandiendo las capacidades del mismo y permitiendo que su conocimiento pueda ser útil incluso fuera de la muestra de datos inicial. [29]

2.3. División de datos en entrenamiento y test

Suponiendo que, a partir de unos datos de entrada y un modelo, logremos que este los emplee para aprender, normalmente el objetivo final es emplear dicho modelo fuera de esa muestra inicial.

Por ejemplo, en el caso de aprender a montar en bici lo que se suele querer es aprender a montar en cualquier bici, no aprender a usar una bici y cada vez que se quiera cambiar de vehículo tener que volver a empezar dicho aprendizaje.

En el caso de los modelos de aprendizaje automático, un ejemplo simple puede ser, dada una imagen de un animal (que puede ser solo de un perro o de un gato), determinar si es una imagen de un perro o de un gato. Si se entrena un modelo con 200 imágenes, suele ser común que su desarrollador quiera emplear dicho modelo entrenado para distinguir gatos de perros con imágenes que este no vio nunca antes.

Es decir, aunque se entrene un modelo con una muestra de N imágenes, es importante saber que, en la mayoría de los casos, lo que se busca no es un buen rendimiento exclusivamente en la muestra con que se entrenó, sino también en muestras en las que no se entrenó.

Para visualizar la generalización del modelo, el conjunto de datos D se suele dividir en 2 subconjuntos, (entrenamiento y test) de forma que se pueda estimar si realmente 'aprende' o solo memoriza.

Una vez realizada la división, se entrena el modelo con los datos del conjunto de entrenamiento. Cuando se termina el entrenamiento, se accede al conjunto test y se visualiza el rendimiento del modelo sobre el mismo. Como los datos de test no se emplearon en ningún momento, aportan una estimación sobre la generalización del modelo fuera de la muestra con la que se entrenó.

2.4. Redes Neuronales Totalmente Conectadas

Antes de analizar las redes neuronales convolucionales (CNNs), tiene sentido empezar por las redes neuronales 'clásicas' o totalmente conectadas. Se define una red neuronal como un programa o modelo de machine learning que toma decisiones de forma similar al cerebro humano, empleando para ello procesos que imitan a los de las neuronas biológicas [32].

Una red neuronal cuenta con una serie de neuronas artificiales organizadas por capas, y se caracteriza por tener una capa de entrada, una o varias capas ocultas y una capa de salida.

2.4.1. Neurona

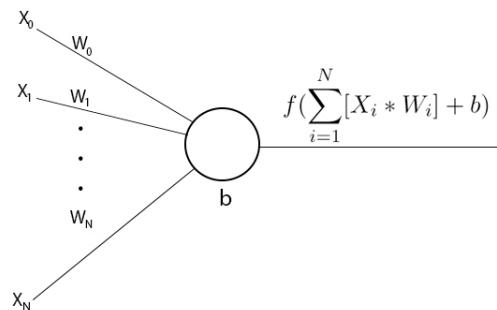


Figura 2.1: Esquema de una neurona

Una neurona parte de una serie de datos de entrada $X = \{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ tal que cada $x_i \in X$ se encuentra asociado a un peso $w_i \in W$ y obtiene un único dato de salida o resultado operando con los datos de entrada y sus pesos.

En la Figura 2.1 se muestra cómo esta los emplea para realizar una suma ponderada y posteriormente añadir un sesgo b , además de aplicar una fun-

ción (que llamaremos función de activación) f sobre el resultado obtenido para obtener la salida.

2.4.2. Estructura por capas

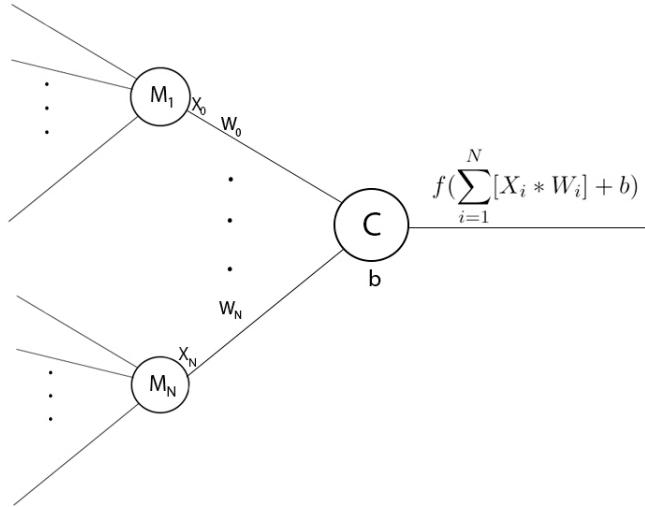


Figura 2.2: Esquema de una capa de neuronas

Las neuronas se suelen agrupar por capas, de tal forma que la salida de una compone la entrada de la siguiente, formando así modelos más sofisticados. En la Figura 2.2, se puede ver cómo la salida de la neurona C se obtiene tomando como entrada la salida de las neuronas M_1, M_2, \dots, M_N .

En este proyecto se desarrollarán redes neuronales para tareas de clasificación multiclase. Para clasificar N clases distintas, la capa de salida tendrá N neuronas. De esta forma, nuestra red totalmente conectada tendrá una capa de entrada (para recibir los datos de entrenamiento), una capa de salida, y las capas intermedias entre estas dos recibirán el nombre de capas ocultas.

2.4.3. Funciones de activación

Una función de activación, en el contexto de las redes neuronales, es una función matemática f que se aplica al resultado de sumar el producto escalar del vector de entrada y el vector de pesos con el sesgo para obtener la salida de una neurona. Su objetivo consiste en introducir no linealidad en el modelo, permitiendo que la red aprenda e identifique patrones complejos en los datos. Sin no linealidad, una red neuronal se comportaría esencialmente como un modelo de regresión lineal, independientemente del número de capas que tenga [33]. Introduciremos a continuación una serie de funciones de activación de interés:

Función ReLU

$$ReLU(x) = \max(0, x) \quad (2.1)$$

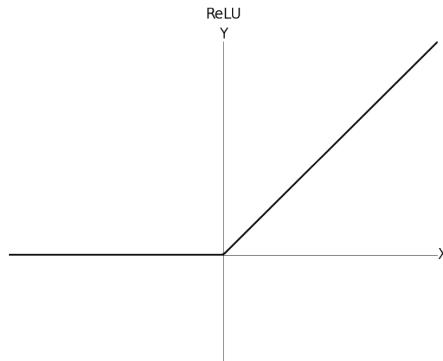


Figura 2.3: Imagen de la función de activación ReLU

A cambio de un bajo coste computacional, la función de activación ReLU (véase la Figura 2.3) aporta no linealidad a la neurona, permitiendo a esta aprender funciones de mayor complejidad.

Como su gradiente es 0 ó 1 (0 para valores negativos, 1 para valores positivos), evita una reducción excesiva del mismo para valores positivos, mitigando así el problema del desvanecimiento del gradiente, caracterizado por la presencia de gradientes muy pequeños en retropropagación (se analizará esto con detalle en secciones posteriores) y provocar un aprendizaje lento [34].

Además, tal y como sugieren los expertos, se empleará ReLU como función de activación en las capas intermedias de los modelos a implementar [35] [36].

Función Sigmoide

$$\text{sigmoide}(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (2.2)$$

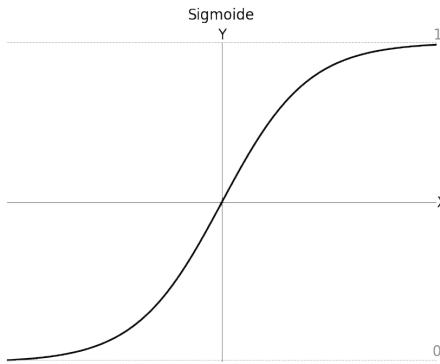


Figura 2.4: Imagen de la función de activación Sigmoide

Se define la función de activación Sigmoide como una función interesante en el ámbito de la clasificación binaria, pues es caracterizada por transformar un valor de entrada en una salida perteneciente al rango [0-1] , tal y como se muestra en la Figura 2.4.

Aunque sea monótona creciente y diferenciable en todos los puntos, tiende a saturarse con valores extremos (positivos o negativos). Por tanto, su aplicación dependerá del caso concreto a tratar. [37]

2.4.4. Capa SoftMax

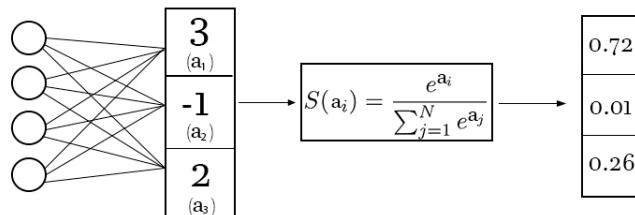


Figura 2.5: Imagen de la función de activación SoftMax

La función SoftMax se suele emplear en la capa de salida de la red. Se caracteriza por, para N entradas, producir N salidas con valores en el rango [0-1] que mantienen la proporción de entrada y cuya suma es 1. Por tanto, cada salida i se puede interpretar como la probabilidad de pertenencia a la clase i, siendo especialmente útil en clasificación multiclas. [38]

De esta forma, en la Figura 2.5 se muestra un ejemplo de clasificación multiclas con 3 clases distintas.

Para una entrada dada, el modelo estima que esta pertenece a la clase 0, pues según este, dicha entrada presenta un 72 % de probabilidad de pertenecer a la clase 0, un 1 % a la clase 1, y un 26 % a la clase 2.

2.4.5. Tipos de codificaciones de etiquetas

En el campo del machine learning existen varios tipos de codificaciones. Así, para codificar 3 clases distintas se podrían codificar o bien mediante $\{1, 2, 3\}$, o mediante $\{100, 010, 001\}$ (codificación one-hot [39]), por ejemplo. En este proyecto se empleará la codificación one-hot por simplicidad y seguir el mismo enfoque seguido en la gran mayoría de bibliografía online.

2.4.6. Función de error o pérdida

En modelos de aprendizaje automático se suele emplear una función de optimización iterativa como descenso del gradiente (se muestra en el siguiente apartado) para, a partir de una función de error y unos datos de entrada, estimar el error del modelo sobre los mismos. Esta estimación del error se puede emplear para ir reduciendo el error iteración a iteración y así ir aprendiendo.

Entropía Cruzada

$$E(y, \hat{y}) = - \sum_{i=1}^N [y_i * \log(\hat{y}_i)] \quad (2.3)$$

En los modelos a desarrollar en este proyecto, se empleará la Entropía Cruzada como función de error por ser una métrica empleada en aprendizaje automático para medir las prestaciones de un modelo de clasificación. La pérdida o error, se mide como un valor positivo mayor que 0, siendo 0 un modelo perfecto. [40]

En la fórmula 2.3, se muestra la fórmula para el cálculo de la entropía cruzada, donde H es el número de clases al que puede pertenecer cada dato de entrada $x_i \in X$, y_i representa la etiqueta real de la entrada x_i empleada, e \hat{y}_i representa la etiqueta que el modelo predijo para dicha entrada x_i .

2.4.7. Precisión

$$\text{Precision} = \frac{\text{Predicciones correctas}}{\text{Predicciones totales}} \quad (2.4)$$

En los modelos a desarrollar en este proyecto, se utilizará la precisión (accuracy) como métrica para evaluar la eficacia del modelo en la clasificación de un conjunto de datos específico. La precisión representa la proporción de predicciones correctas sobre el total de predicciones realizadas, y se calcula mediante la fórmula 2.4. Este valor se expresa como un porcentaje o como

un número en el rango [0-1], donde 1 indica un modelo perfecto y 0 denota un modelo totalmente erróneo [41].

Importancia de la función de error en el aprendizaje

Para visualizar el papel de la función de error en el aprendizaje de un modelo, supondremos que los datos actuales cuentan con N=3 clases tal que, para un $x_i \in X$ dado y empleando la codificación One-Hot para las etiquetas, se tiene que $y_i = [0, 0, 1]$.

$$E(y, \hat{y}) = - \sum_{i=1}^N [y_i * \log(\hat{y}_i)] = 0 + 0 + \log(0.1) = -\log(0.1) = 2.3 \quad (2.5)$$

Como la configuración inicial del modelo es desconocida, se supone que sus predicciones iniciales para x_i son $\hat{y}_i = [0.6, 0.3, 0.1]$. En este caso, x_i pertenece a la clase 3 pero el modelo predice que pertenece a la clase 1, pues 0.6 se interpreta como la probabilidad de pertenecer a la clase 1 y es la probabilidad más grande de todo \hat{y}_i .

Por tanto, su función de error indicaría que el error obtenido viene dado por la fórmula 2.5.

$$E(y, \hat{y}) = - \sum_{i=1}^N [y_i * \log(\hat{y}_i)] = 0 + 0 + \log(0.6) = -\log(0.6) = 0.5 \quad (2.6)$$

Tras entrenar el modelo durante varias iteraciones, y_i permanece constante, pero \hat{y}_i se modifica a $\hat{y}_i = [0.1, 0.3, 0.6]$, de forma que el nuevo error obtenido vendría dado por la fórmula 2.6, y ahora el modelo realizaría una predicción correcta sobre la clase de x_i , aunque todavía le quedaría margen de mejora pues el error es de 0.5 y este se puede minimizar. De esta forma, se visualiza como, a lo largo del entrenamiento de un modelo, este se centra en reducir el error obtenido, y como consecuencia de ello va modificando sus predicciones, de tal forma que se vayan ajustando a lo especificado por sus datos de entrada y etiquetas asociadas.

2.4.8. Descenso del gradiente

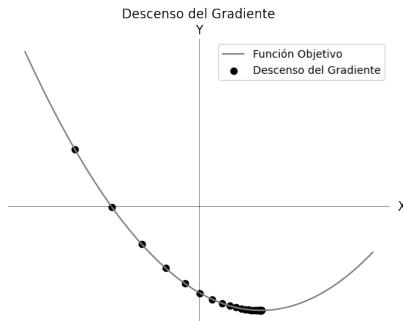


Figura 2.6: Ejemplo de funcionamiento del descenso del gradiente

Tal y como se comentaba anteriormente, el descenso del gradiente es un método de optimización iterativo que busca el mínimo en una función diferenciable. En la figura 2.6 se muestra un ejemplo del mismo, donde la función objetivo a minimizar hace referencia a la función de pérdida, y cada punto sobre ella representa una iteración del algoritmo, indicando cómo el error del modelo sobre la muestra se va reduciendo con cada iteración.

Su nombre viene del término 'gradiente', siendo este una generalización multivariable de la derivada y denominado por el símbolo ∇ . Para una función f y un punto p , este indica la dirección del máximo incremento en la misma. El descenso del gradiente usa esta información para, una vez obtenido el gradiente, desplazarse en dirección contraria, es decir, en dirección del mínimo. Además, la distancia que se recorre en cada iteración viene dada por un hiperparámetro alpha denominado "learning rate" [42] [43] [44].

A diferencia de los parámetros de un modelo (pesos y sesgos), sus hiperparámetros son establecidos por el usuario y no se "aprenden" durante el entrenamiento del modelo.

2.4.9. Inicialización de pesos

Tal y como sugieren los expertos, se inicializarán los pesos mediante la "inicialización He" o "inicialización Kaiming He". Esta consiste en, para un peso w , inicializarlo según una distribución gaussiana con una media de 0.0 y una desviación típica de $\sqrt{\frac{2}{N_in}}$, siendo N_in el número de neuronas en la capa de entrada [45] [46] [47] [35] [36].

2.4.10. Inicialización de sesgos

De la misma forma, se vuelve a seguir la bibliografía, indicando esta vez una inicialización de sesgos a 0.0 [48] [49].

Actualización de parámetros

El procedimiento para entrenar una red neuronal consiste en, para una entrada x_i y una etiqueta asociada y_i , emplear x_i para realizar una predicción \hat{y}_i (Propagación hacia delante de x_i por la red) que posteriormente se podrá comparar con y_i mediante una función de error $H(x)$ y obtener una medida de lo buena o mala que fue la misma. Una vez obtenido dicho “error”, se aplica el algoritmo del descenso del gradiente para obtener el gradiente de la pérdida respecto a cada parámetro de la red (Retropropagación) [40].

$$W_i^{t+1} = W_i^t - \alpha * \frac{\partial H(x)}{\partial W_i} \quad (2.7)$$

$$b_{t+1} = b_t - \alpha * \frac{\partial H(x)}{\partial b_t} \quad (2.8)$$

Así, se actualizarán los parámetros de la red neuronal (pesos y sesgos) según las fórmulas 2.7 y 2.8. En ellas, W_i^t y b_t indican los valores del peso W_i y bias b en el instante o iteración t , de la misma forma que W_i^{t+1} y b_{t+1} representan los valores de los mismos en el instante $t+1$ [50].

Es decir, dada una iteración t y unos datos de entrada X , primero se realiza la propagación hacia delante de los mismos a lo largo del modelo para obtener \hat{Y} o la predicción de los mismos. Una vez obtenida \hat{Y} , se emplea la función de error para obtener el error del modelo sobre los datos de entrada. Con ello, se realiza la retropropagación del gradiente de la pérdida o error a lo largo del modelo, de forma que cada parámetro del mismo obtenga el gradiente de la pérdida respecto a él. Una vez cada parámetro tiene asociado su gradiente respecto a la pérdida, lo emplea junto con α para actualizar su valor, dirigiéndose en sentido contrario al gradiente con una magnitud igual a α , permitiendo así la reducción del error en la iteración $t+1$. Los parámetros se actualizan una vez por iteración, tras realizar la retropropagación.

Descenso del gradiente estocástico

Algorithm 1 Descenso del gradiente estocástico [51]

```

for época  $p \in \{0, \dots, P - 1\}$  do
    Desordenar datos de entrenamiento.
    for minibatch  $\in [m_{\text{inicio}}, \dots, m_{\text{fin}}]$  do
        Obtener datos del minibatch.
        Realizar propagación hacia delante.
        Obtener error mediante función de error.
        Realizar retropropagación y obtener gradiente de la pérdida
        respecto a cada parámetro del modelo.
        Actualizar parámetros.
    end for
end for

```

El descenso del gradiente estocástico es una variante que sustituye el gradiente real por una estimación del mismo, logrando reducir la carga computacional y tiempo de entrenamiento a cambio de una menor tasa de convergencia [52] [53].

Se caracteriza por, en cada época (un paso completo a través de todo el conjunto de datos de entrenamiento durante el proceso de aprendizaje [52]), dividir el conjunto de entrenamiento en varios subconjuntos aleatorios y disjuntos entre ellos (minibatch).

Para cada minibatch, se realiza la propagación hacia delante, el cálculo del error, la retropropagación y la actualización de parámetros en ese orden.

2.4.11. Retropropagación en la capa SoftMax

Tal y como se comentó en secciones anteriores, se empleará SoftMax en la última capa totalmente conectada. De este modo, se definen los valores de entrada a la misma como Z , y los de salida como O , tal y como se muestra en la Figura 2.9.

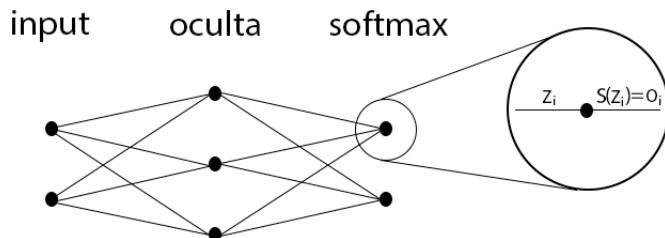


Figura 2.7: Estructura de una red totalmente conectada con una capa oculta, y con softmax en la última capa

Según esta notación, la función de error 2.3 se convierte en la fórmula 2.9.

$$E = - \sum_{i=1}^N [y_i * \ln(O_i)] \quad (2.9)$$

De este modo, se define el cálculo del gradiente de la pérdida, con respecto a cada neurona de entrada Z_k , de la capa SoftMax, según la fórmula 2.10 [54] [55]. Para obtener una explicación detallada, y un desarrollo completo sobre los orígenes de dicha fórmula, consulte el apéndice C.

$$\frac{\partial E}{\partial Z_k} = O_k - y_k = \text{gradiente}_Z k \quad (2.10)$$

2.4.12. Retropropagación en redes neuronales totalmente conectadas

En esta sección, se analizará el cálculo del gradiente de la pérdida con respecto a cada parámetro entrenable de una red neuronal totalmente conectada, así como con respecto a la entrada y a la salida de cada capa. De este modo, se presentarán los cálculos aplicables a cualquier tipo de red totalmente conectada. Para obtener una explicación detallada, y un desarrollo completo sobre los orígenes de cada fórmula planteada en esta sección, se recomienda encarecidamente consultar el apéndice D.

Tal y como se muestra en la Figura 2.7, se definen como capas ocultas todas aquellas capas situadas entre la capa de entrada y la capa de salida. En particular, se definen como capas ocultas “intermedias” todas las capas, exceptuando la última de ellas, dado que estas capas comparten la mayoría de los cálculos asociados a la retropropagación. En consecuencia, una red neuronal totalmente conectada puede dividirse en 4 grupos {capa de entrada, capas ocultas intermedias, última capa oculta, capa de salida o capa softmax}.

A continuación, se realiza el cálculo necesario para la retropropagación de una capa de neuronas l específica. Suponemos que la capa $l+1$ tiene Q neuronas, la capa $l-1$ tiene K neuronas, y que todas las capas ocultas intermedias usan ReLU como función de activación.

Gradiente respecto a la entrada de la capa

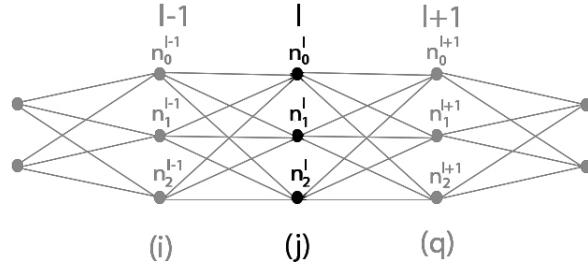


Figura 2.8: Retropropagación en la capa l

La Figura 2.8 muestra una representación en la que los 'puntos' están interconectados mediante líneas, las cuales representan neuronas artificiales, y los pesos que las conectan, respectivamente. Cada punto corresponde a una neurona, y, cada línea, a un peso. El superíndice indica la capa a la que pertenece una neurona o peso, mientras que el subíndice especifica el número de la neurona o peso en su respectiva capa. En el caso de los pesos, se requieren 2 subíndices para identificar a cada uno, ya que cada peso conecta 2 neuronas.

En este contexto, la capa oculta l está compuesta por 3 neuronas, denotadas como n_0^l , n_1^l , y n_2^l . De este modo, se define como W_{jq}^l al peso que une las neuronas n_j^l y n_q^{l+1} . Para la neurona n_j^l , se denota como a_j^l el valor de la neurona antes de aplicar la función de activación asociada, y como z_j^l , el valor obtenido después de aplicar dicha función. Además, se define como $gradiente_a_{l+1q}$ al gradiente de la pérdida con respecto a a_q^{l+1} . Asimismo, se denota como $ReLU'(a_j^l)$ a la derivada de la función de activación ReLU aplicada al valor (a_j^l).

$$\frac{\partial E_{total}}{\partial a_j^l} = \sum_{q=1}^Q gradiente_a_{l+1q} * W_{ij}^l * ReLU'(a_j^l) \quad (2.11)$$

La fórmula 2.11, ilustra el cálculo necesario para determinar el gradiente de la función de pérdida, con respecto a la neurona de entrada j, de una capa oculta intermedia l, $\frac{\partial E_{total}}{\partial a_j^l}$, a partir del gradiente de la función de pérdida, con respecto a la entrada de capa l+1, $gradiente_a_{l+1q}$.

Gradiente respecto a los pesos

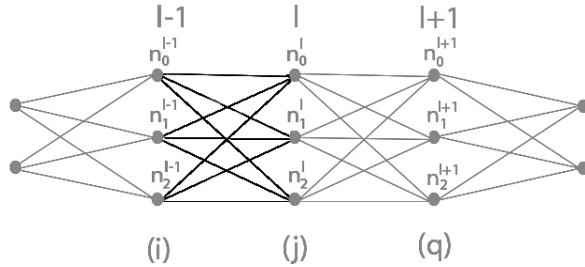


Figura 2.9: Retropropagación respecto a los pesos entre la capa $l-1$ y l

$$\frac{\partial E_{total}}{\partial W_{ij}^{l-1}} = \text{gradiente_}h_{l_j} * z_i^{l-1} \quad (2.12)$$

La fórmula 2.12, detalla el cálculo necesario para determinar el gradiente de la pérdida, con respecto a los pesos entre las capas ocultas l y $l-1$.

2.4.13. Gradiente respecto a sesgos

$$\frac{\partial E}{\partial b_j^l} = \text{gradiente_}h_{l_j} \quad (2.13)$$

La fórmula 2.13 muestra el cálculo necesario para determinar el gradiente de la función de pérdida con respecto a los sesgos de la capa oculta l .

2.5. Redes Neuronales Convolucionales

Las redes neuronales convolucionales [8] surgen como una adaptación de las redes neuronales totalmente conectadas para el caso concreto de tratamiento de imágenes. Ambas comparten la idea de contar con una serie de neuronas artificiales distribuidas por capas de forma de la salida de la capa i sea la entrada de la capa $i+1$. Su principal diferencia reside en los datos de entrada y en las operaciones que se realizan en cada capa. Por ello, en secciones posteriores, se introducirán en detalle dos nuevas capas (capa convolucional y capa de agrupación máxima), cada una caracterizada por realizar un tipo de operación distinto.

2.5.1. Introducción a CNNs

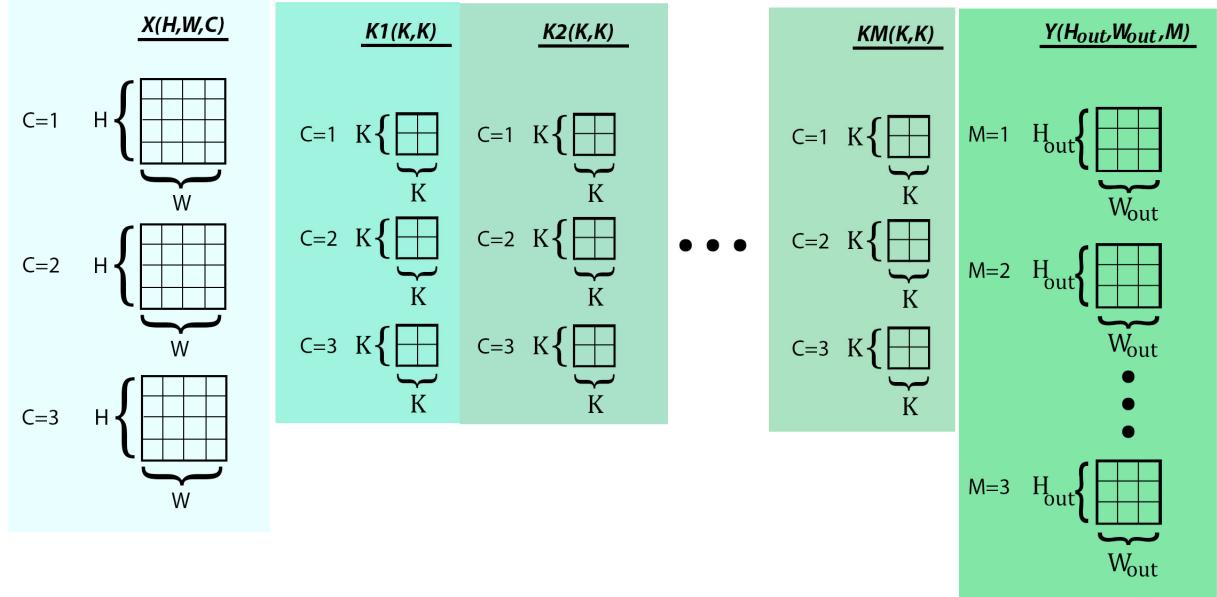


Figura 2.10: Esquema de las dimensiones en una capa convolucional de una red neuronal convolucional

Las redes neuronales convolucionales (CNN, Convolutional Neural Network) se distinguen por su capacidad para trabajar con volúmenes de datos 3D. En este proyecto, se emplearán imágenes RGB como entrada para cada CNN. De este modo, cada imagen RGB puede interpretarse como un conjunto de capas 2D. De esta manera, si definimos X como un volumen 3D que representa una imagen RGB, X estará compuesto por 3 imágenes 2D, cada una correspondiente a un color (rojo, verde y azul). Adicionalmente, las dimensiones de X se definen como H (filas), W (columnas) y C (canales de profundidad), o, de forma abreviada, $X(H, W, C)$ (véase la Figura 2.10).

De manera equivalente, en una capa convolucional, los kernels de pesos se definen como $\{K_1, K_2, \dots, K_M\}$ o $\{K_1(K, K), K_2(K, K), \dots, K_M(K, K)\}$, donde cada uno de ellos tendrá K filas y K columnas.

Finalmente, en cada capa de una red neuronal convolucional, se define el volumen de salida como Y o $Y(H_{out}, W_{out}, M)$, y estará compuesto de H_{out} filas, W_{out} columnas, y M canales de profundidad, (uno por kernel de pesos).

2.5.2. Estructura por capas

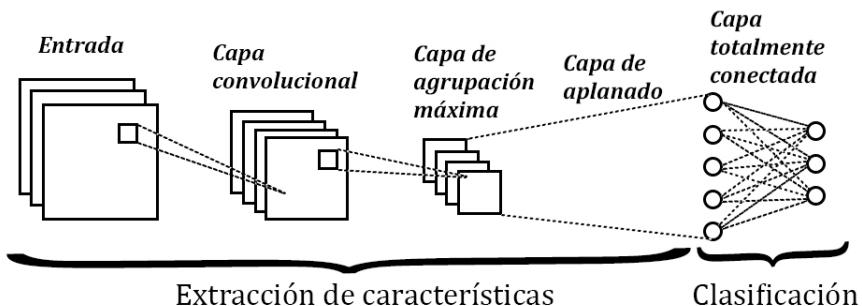


Figura 2.11: Estructura por capas en una red neuronal convolucional

La arquitectura básica de una CNN se compone de dos partes principales (véase la Figura 2.11):

- **Extracción de Características:** Se define como extracción de características, al proceso que emplea múltiples pares de capas convolucionales y de agrupamiento máximo. Estas, se emplean para reducir y resumir las características de especial importancia, presentes en el conjunto de datos original.
- **Clasificación:** Una vez obtenido el resultado del proceso de extracción de características, en la etapa de clasificación, se emplea para predecir la clase de las imágenes de entrada. La capa totalmente conectada, realiza la clasificación final, combinando la información procesada en las etapas anteriores.

A continuación, se define cada una de las capas involucradas en una red neuronal convolucional:

- **Capa convolucional:** La capa convolucional, extrae características de la entrada X mediante la operación de convolución, y esta se realiza con un filtro de tamaño KxK. De esta manera, genera un mapa de características de salida (Y), que preserva la relación espacial entre los píxeles, y resalta elementos clave como bordes y esquinas.
- **Capa de agrupación máxima:** Se define como capa de agrupación máxima, aquella centrada en reducir la dimensionalidad de la entrada. Dicha reducción se obtiene al seleccionar, dentro de una región definida de la entrada, el valor máximo, preservando así las características más relevantes. Esta operación no solo disminuye la complejidad computacional, sino que también contribuye a que la red sea más invariantes a pequeñas traslaciones en la entrada.

- **Capa de aplanado:** Se define como capa de aplanado aquella que transforma un volumen tridimensional en un vector unidimensional. De este modo, facilita la transición de las características extraídas por capas convolucionales y de agrupamiento hacia capas totalmente conectadas.
- **Capa totalmente conectada:** Se define como capa totalmente conectada aquella en la que cada neurona está conectada a todas las neuronas de la capa anterior y posterior. De este modo, permite la combinación de todas las características extraídas para realizar la clasificación multiclas que se llevará a cabo en este proyecto.

2.5.3. Capa convolucional

Componentes

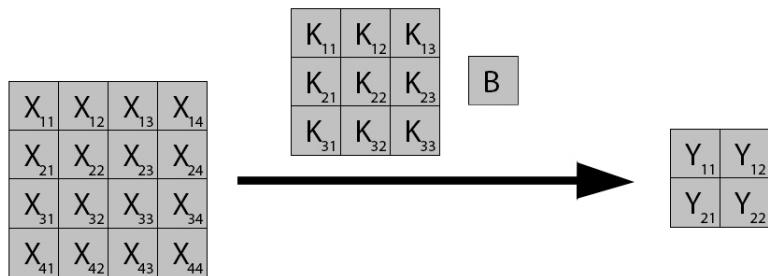


Figura 2.12: Componentes en una capa convolucional

Una capa convolucional parte de un volumen de entrada X , un kernel de filtros K , un sesgo B y una función de activación para, mediante una convolución, obtener un volumen de salida Y [56] [57].

Propagación hacia delante

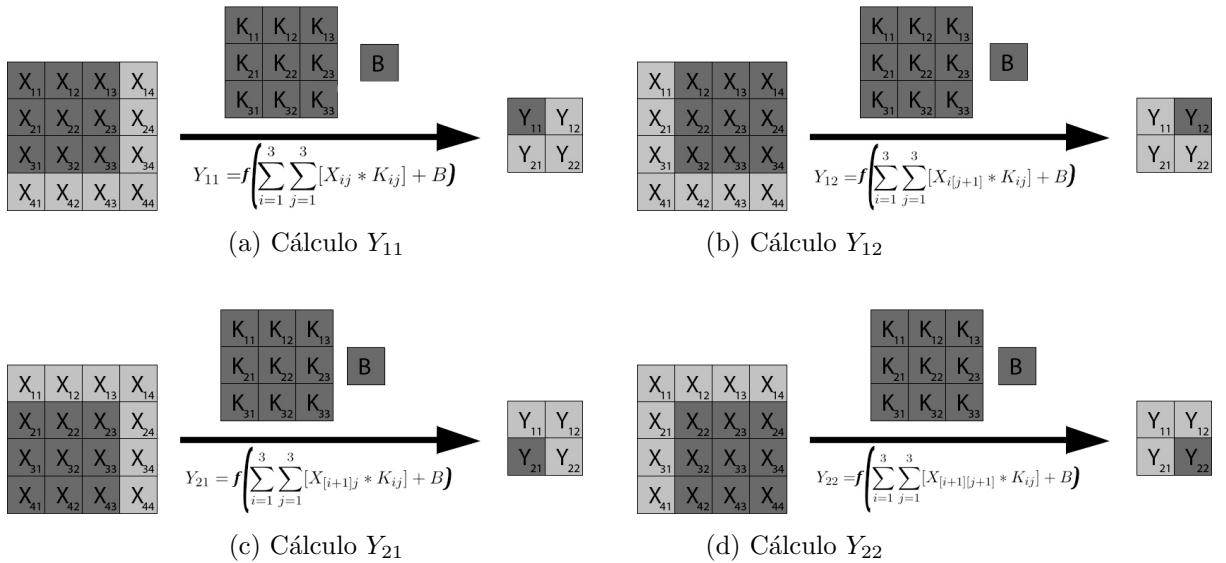


Figura 2.13: Propagación hacia delante en una capa convolucionarial

Una convolución entre 2 volúmenes de datos X y K , consiste en “deslizar K sobre X ” tal y como se muestra en la Figura 2.13. De esta forma, en cada “paso” se recorren ambos volúmenes, multiplicando los elementos de X y K que se encuentren superpuestos en la misma posición. Posteriormente, se suma cada resultado obtenido, además de un sesgo B y finalmente se aplica una función de activación [56].

Por simplicidad inicial, en la Figura 2.13 se emplea un volumen X con un solo canal de profundidad. Sin embargo, este no es el caso común. Por tanto, se denotará como X_{ij}^c al elemento de X que se encuentre en la posición (i,j) del canal de profundidad c . De la misma forma, se definirá K_{ij}^c como el peso $k \in K$ que se encuentre en la posición (i, j) del canal de profundidad c del kernel de pesos K [57].

Propagación hacia delante de X con varios canales de profundidad

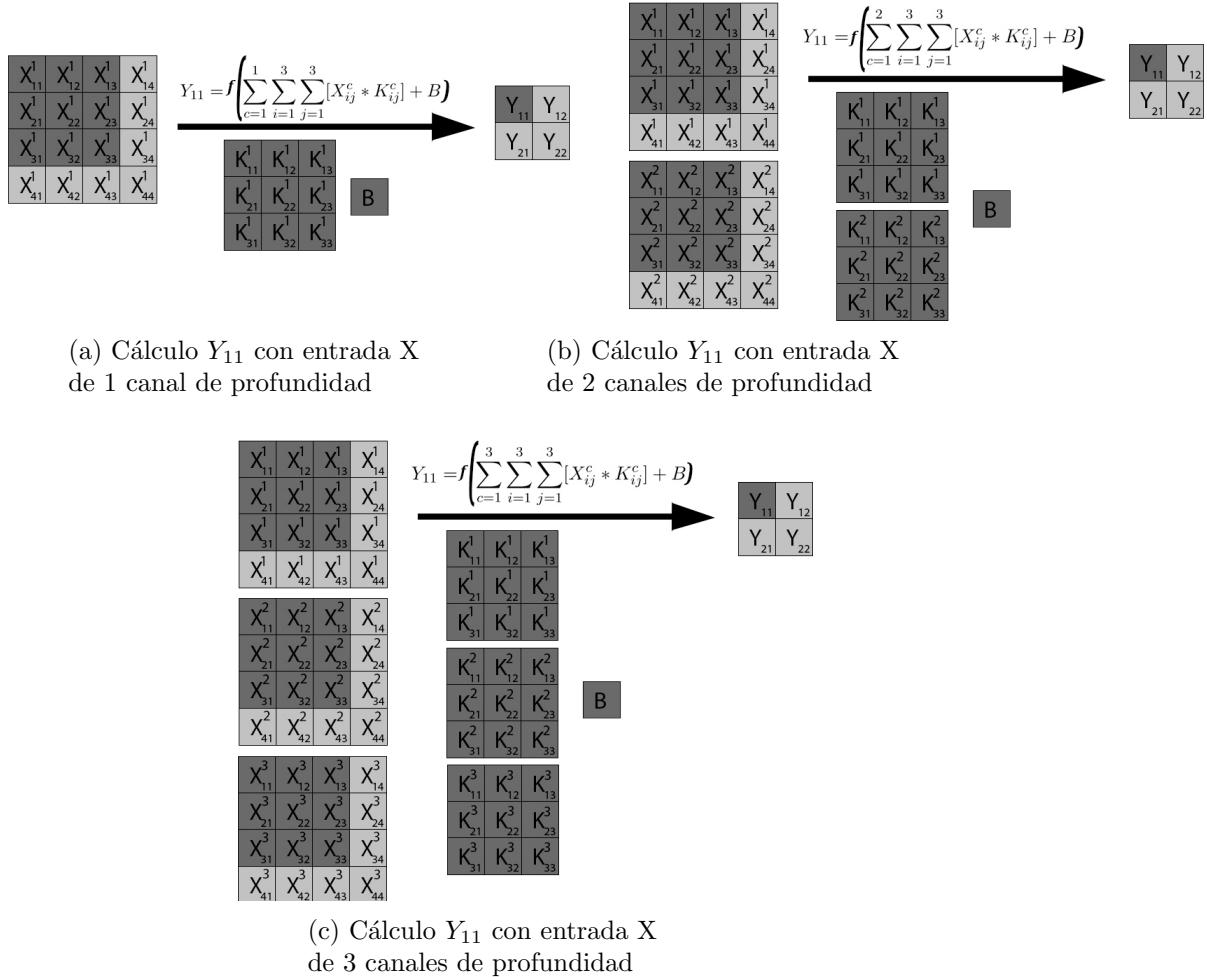


Figura 2.14: Propagación hacia delante en una capa convolucional con varios canales de profundidad

De esta forma, en la Figura 2.14 se muestra como una convolución con C canales de profundidad se descompone en la suma de C convoluciones con un canal de profundidad (véase la fórmula 2.14).

Por último, en cada “paso” del “deslizamiento” se suma un solo sesgo y se aplica una sola vez la función de activación, independientemente del número de canales de profundidad que presente la entrada X .

$$\begin{aligned} \text{convolucion_C_canales}(X, K) &= \text{convolucion_1_canal}(X^1, K^1) + \\ &\quad \text{convolucion_1_canal}(X^2, K^2) + \dots + \text{convolucion_1_canal}(X^C, K^C) \end{aligned} \quad (2.14)$$

Propagación hacia delante de X con varios filtros

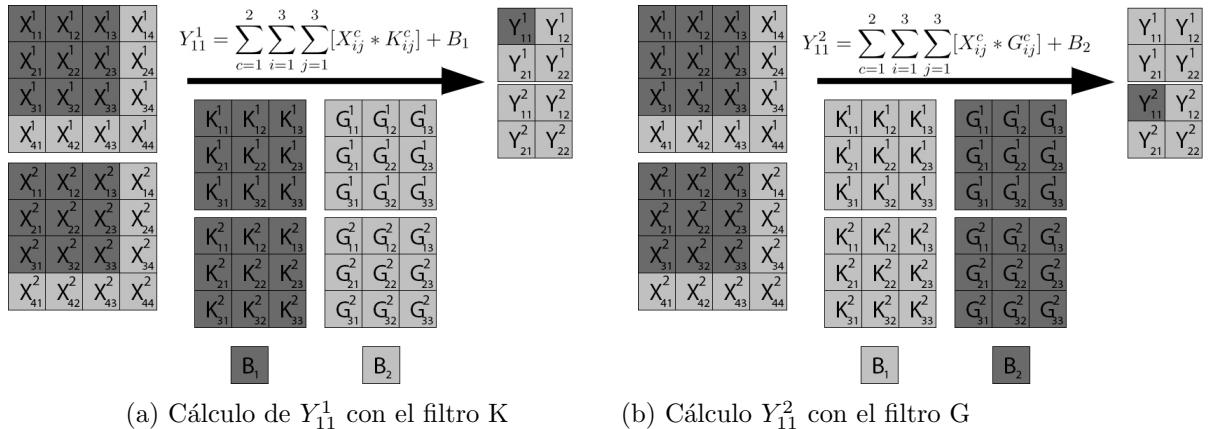
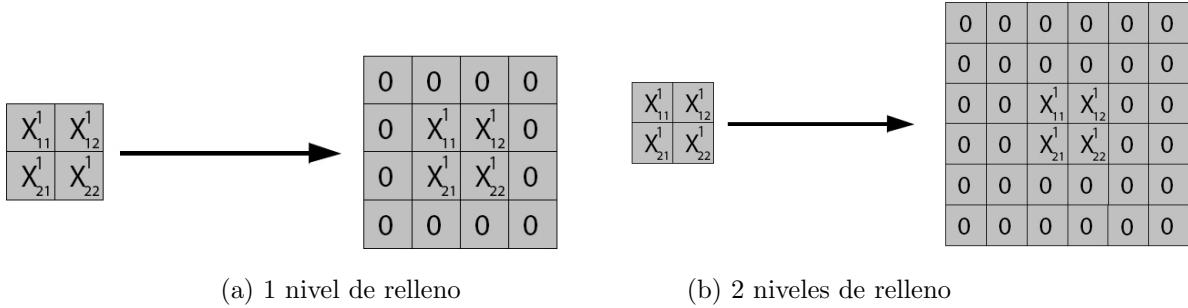


Figura 2.15: Propagación hacia delante en una capa convolucional con varios filtros

Cada convolución entre dos volúmenes 3D produce un volumen de salida 2D. Por tanto, al aplicar M convoluciones entre un volumen de entrada X y una serie de filtros $K=\{K_1, K_2, \dots, K_M\}$, se obtendrá un volumen 3D de salida con tantas capas de profundidad como convoluciones se aplicaron (M). En la Figura 2.15 se observa como al aplicar M=2 convoluciones sobre la misma entrada X (una con el filtro K y otra con el filtro G) se obtiene un volumen de salida con 2 capas de profundidad [57].

Relleno o “Padding”

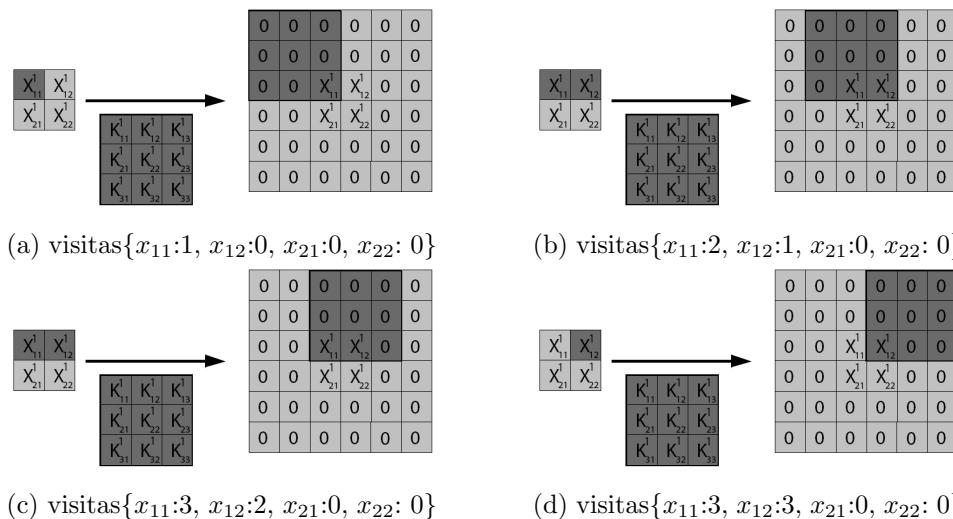
En la figura 2.13 se visualiza como al realizar una convolución entre un volumen X con dimensiones 1x4x4 y un kernel de pesos K con dimensiones 1x3x3, el resultado obtenido es un volumen Y de dimensiones 1x2x2. La reducción de dimensionalidad es un problema pues afecta directamente al número de convoluciones que se pueden aplicar sobre un volumen. Por tanto, el “relleno” o “padding” [58] se aplica antes de realizar una convolución y es una técnica empleada para conservar las dimensiones espaciales de un volumen de entrada X, expandiendo cada canal del mismo tal y como se muestra en la figura 2.16 [59].

Figura 2.16: Relleno sobre un volumen de entrada X

De esta forma, un relleno a un nivel sobre un volumen añadirá sobre el mismo dos filas y dos columnas con valores igual a 0. Un relleno a dos niveles añadirá cuatro filas y columnas con valores igual a cero, ..., un relleno a n niveles añadirá 2^n filas y columnas con valores igual a 0.

Relleno completo

Se denomina como relleno completo [60] [61] aquel que asegura que cada valor o casilla de X sea visitada el mismo número de veces que el resto en una operación de convolución.

Figura 2.17: Relleno sobre un volumen de entrada X

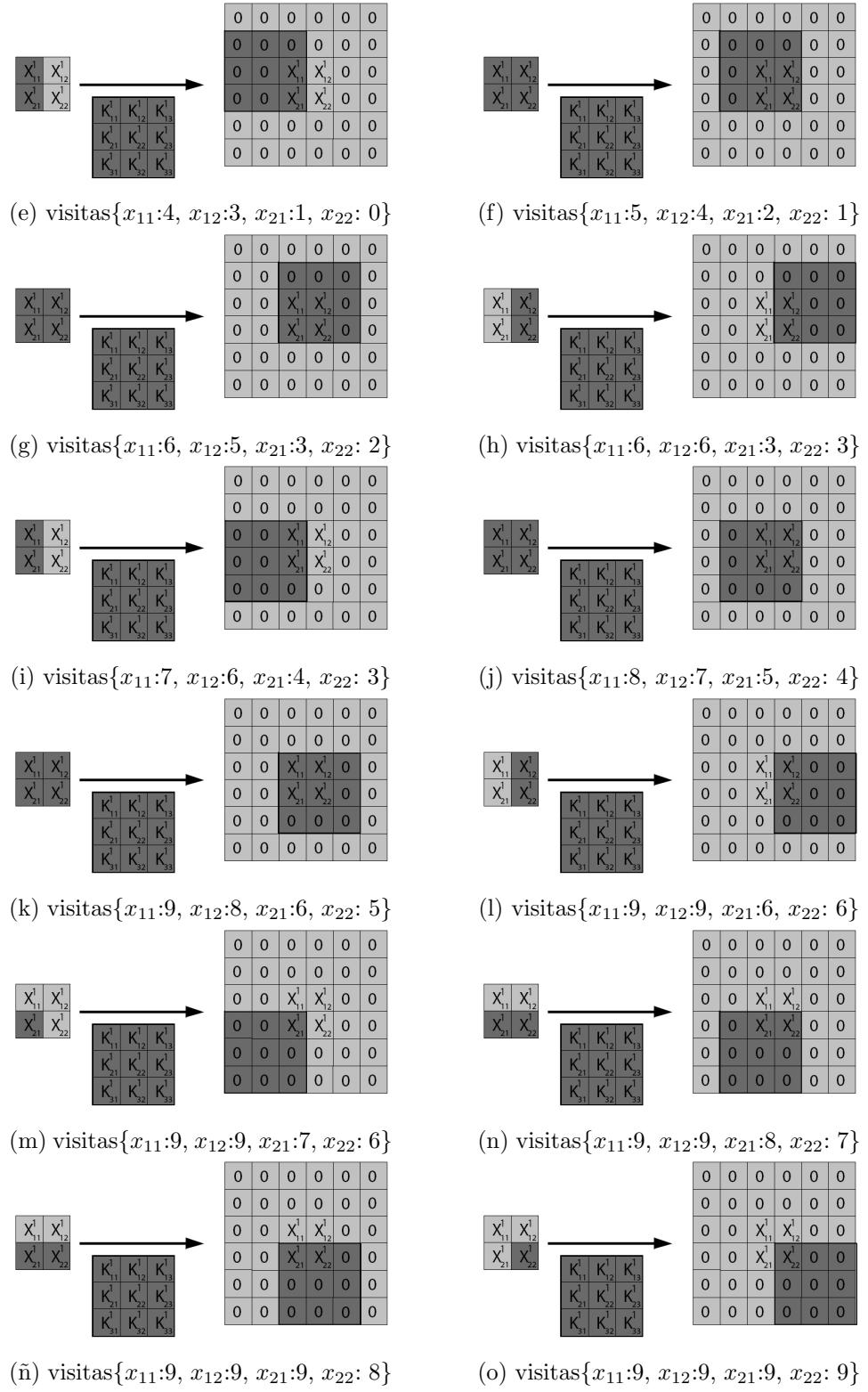


Figura 2.17: Convolución sobre X con relleno completo

Tal y como se muestra en la figura 2.17, se realiza un relleno completo pues en la convolución entre X y K se accede a cada valor de X el mismo número de veces (9).

2.5.4. Retropropagación en capas convolucionales

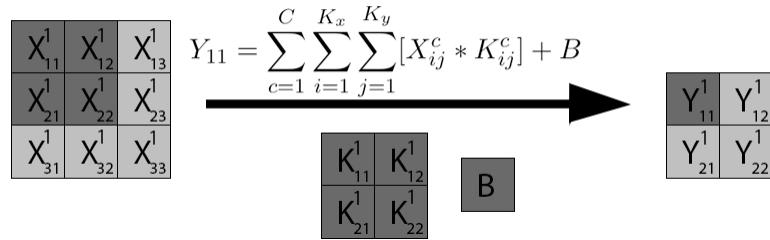


Figura 2.18: Ejemplo de propagación hacia delante en una capa convolucional

La figura 2.18 ilustra el cálculo de Y_{11}^1 para un ejemplo de propagación hacia delante concreto. En dicha figura, C representa el número de canales de profundidad del volumen de entrada X , mientras que K_x y K_y se refieren al número de filas y columnas del kernel K utilizado, respectivamente. Siguiendo la notación empleada en secciones anteriores, se denotará por A_{ij}^c al valor de X_{ij}^c antes de aplicar la función de activación correspondiente, y por Z_{ij}^c al valor resultante después de aplicar dicha función. Para obtener más detalles, se recomienda consultar el apéndice E.

Sumatoria de gradientes

$$\frac{\partial E}{\partial K_{11}^c} = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \left[\frac{\partial E}{\partial Y_{ij}^c} * \frac{\partial Y_{ij}^c}{\partial K_{11}^c} \right]$$

$$\frac{\partial E}{\partial X_{11}^c} = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \left[\frac{\partial E}{\partial Y_{ij}^c} * \frac{\partial Y_{ij}^c}{\partial Z_{11}^c} * \frac{\partial Z_{11}^c}{\partial A_{11}^c} \right]$$

Para calcular el gradiente de la función de error con respecto a cada peso K_{xy} o entrada X_{xy} , se debe realizar una sumatoria del gradiente correspondiente sobre cada valor de salida producido por la convolución. En el caso de los pesos asociados a un canal de profundidad $c \in C$, cada peso K_{xy} se empleó en el cálculo de cada valor Y_{ij}^c . Por otro lado, los valores de la entrada X_{xy} contribuyen al cálculo de varios valores de salida $\{Y_1, Y_2\} \in Y$. Este proceso fue detallado anteriormente en la sección 2.5.1, y se aborda con mayor profundidad en el apéndice E.

Gradiente de Y_{11}^c

$$Y_{11}^c = Z_{11}^c * K_{11}^c + Z_{12}^c * K_{12}^c + Z_{21}^c * K_{21}^c + Z_{22}^c * K_{22}^c \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial Y_{11}^c}{\partial K_{xy}^c} = \frac{\partial (Z_{11}^c * K_{11}^c + Z_{12}^c * K_{12}^c + Z_{21}^c * K_{21}^c + Z_{22}^c * K_{22}^c)}{\partial K_{xy}^c} \quad (2.16)$$

$$\frac{\partial Y_{11}^c}{\partial K_{11}^c} = Z_{11}^c, \quad \frac{\partial Y_{11}^c}{\partial K_{12}^c} = Z_{12}^c \quad (2.17)$$

$$\frac{\partial Y_{11}^c}{\partial K_{21}^c} = Z_{21}^c, \quad \frac{\partial Y_{11}^c}{\partial K_{22}^c} = Z_{22}^c \quad (2.18)$$

$$\frac{\partial Y_{11}^c}{\partial Z_{11}^c} = K_{11}^c, \quad \frac{\partial Y_{11}^c}{\partial Z_{12}^c} = K_{12}^c, \quad \frac{\partial Y_{11}^c}{\partial Z_{13}^c} = 0 \quad (2.19)$$

$$\frac{\partial Y_{11}^c}{\partial Z_{21}^c} = K_{21}^c, \quad \frac{\partial Y_{11}^c}{\partial Z_{22}^c} = K_{22}^c, \quad \frac{\partial Y_{11}^c}{\partial Z_{23}^c} = 0 \quad (2.20)$$

$$\frac{\partial Y_{11}^c}{\partial Z_{31}^c} = 0, \quad \frac{\partial Y_{11}^c}{\partial Z_{32}^c} = 0, \quad \frac{\partial Y_{11}^c}{\partial Z_{33}^c} = 0 \quad (2.21)$$

La fórmula 2.15, presenta una descomposición de Y_{11}^c en términos de Z y K . Esto, es esencial para el cálculo del gradiente, tanto con respecto a Z , (como se detalla en las fórmulas E.7, E.8, E.9), como con respecto a K , (como se muestra en las fórmulas 2.16, 2.17, 2.18). Esta descomposición, permite calcular el gradiente de Y_{11}^c con respecto a cada parámetro de la capa convolucional.

Cabe destacar que, para calcular el gradiente con respecto a cada valor del volumen de entrada (X), también debe calcularse la derivada de la función de activación asociada a dicha capa. Es decir, $\frac{\partial Z}{\partial A}$. Sin embargo, dado que este proceso ha sido abordado en secciones anteriores, se omitirá en esta ocasión, al igual que el cálculo del gradiente con respecto al sesgo de cada capa. El propósito de esta omisión es evitar cálculos redundantes y concentrar la atención en los aspectos más relevantes e innovadores. No obstante, es importante señalar que todos los cálculos discutidos en esta documentación, y más, están implementados en el código correspondiente, lo que garantiza que este conocimiento se ha aplicado y verificado en la práctica.

Además, dado que todo ha sido realizado manualmente por la misma persona, la mayoría de las variables e índices utilizados en la documentación coinciden perfectamente o son muy similares a los empleados en el código. Esto asegura que cualquier lector con conocimientos básicos de programación pueda comprender gran parte de las implementaciones desarrolladas en este proyecto.

Gradiente con respecto a los pesos como convolución

Finalmente, se procede al cálculo de la suma total de gradientes con respecto a cada peso de la capa, conforme a las fórmulas 2.22, 2.23, 2.24, y 2.25. Para una explicación detallada del cálculo y los fundamentos de cada fórmula, se recomienda consultar el apéndice E. Los gradientes resultantes, revelan un patrón claro que refleja la contribución de cada peso en el cálculo del error total.

$$\frac{\partial E}{\partial K_{11}^c} = \frac{\partial E}{\partial Y_{11}^c} * Z_{11}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{12}^c} * Z_{12}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{21}^c} * Z_{21}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{22}^c} * Z_{22}^c \quad (2.22)$$

$$\frac{\partial E}{\partial K_{12}^c} = \frac{\partial E}{\partial Y_{11}^c} * Z_{12}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{12}^c} * Z_{13}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{21}^c} * Z_{22}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{22}^c} * Z_{23}^c \quad (2.23)$$

$$\frac{\partial E}{\partial K_{21}^c} = \frac{\partial E}{\partial Y_{11}^c} * Z_{21}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{12}^c} * Z_{22}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{31}^c} * Z_{31}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{22}^c} * Z_{32}^c \quad (2.24)$$

$$\frac{\partial E}{\partial K_{22}^c} = \frac{\partial E}{\partial Y_{11}^c} * Z_{22}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{12}^c} * Z_{23}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{31}^c} * Z_{32}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{22}^c} * Z_{33}^c \quad (2.25)$$

Como se observa en los cálculos realizados, estos coinciden con una operación de convolución entre la entrada X y el gradiente respecto a la capa de salida Y . Este procedimiento se detalla en la Figura 2.19 [62].

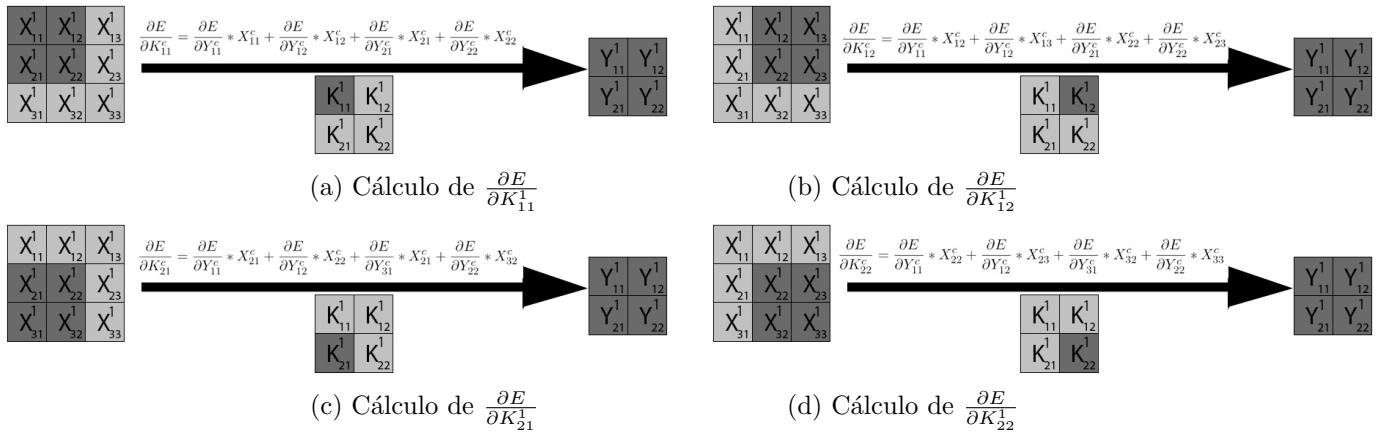


Figura 2.19: Cálculo del gradiente de la pérdida con respecto a cada filtro como convolución entre la entrada X y la salida Y

En la figura 2.19, cada subfigura $\{(a), (b), (c), (d)\}$ representa el cálculo del gradiente con respecto a un peso específico. Aunque la representación puede parecer algo diferente a simple vista, los cálculos son esencialmente los mismos que los obtenidos anteriormente, con la única diferencia en la forma en que se visualizan.

Gradiente con respecto a la entrada como convolución

Por razones de simplicidad, y en consonancia con las recomendaciones de expertos, y la experiencia personal, se empleará ReLU como función de activación en las capas convolucionales. Dado que, la derivada de esta función ya ha sido previamente calculada, (véase la fórmula D.35), se considerará esta información para los cálculos subsiguientes.

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial E}{\partial A_{11}^c} &= \frac{\partial E}{\partial Y_{11}^c} * K_{11}^c * \text{ReLU}'(A_{11}^c) \\
 \frac{\partial E}{\partial A_{12}^c} &= (\frac{\partial E}{\partial Y_{11}^c} * K_{12}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{12}^c} * K_{11}^c) * \text{ReLU}'(A_{12}^c) \\
 \frac{\partial E}{\partial A_{13}^c} &= \frac{\partial E}{\partial Y_{12}^c} * K_{12}^c * \text{ReLU}'(A_{13}^c) \\
 \frac{\partial E}{\partial A_{21}^c} &= (\frac{\partial E}{\partial Y_{11}^c} * K_{21}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{21}^c} * K_{11}^c) * \text{ReLU}'(A_{21}^c) \\
 \frac{\partial E}{\partial A_{22}^c} &= (\frac{\partial E}{\partial Y_{11}^c} * K_{22}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{12}^c} * K_{21}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{21}^c} * K_{12}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{22}^c} * K_{11}^c) * \text{ReLU}'(A_{22}^c) \\
 \frac{\partial E}{\partial A_{23}^c} &= (\frac{\partial E}{\partial Y_{12}^c} * K_{22}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{22}^c} * K_{12}^c) * \text{ReLU}'(A_{23}^c) \\
 \frac{\partial E}{\partial A_{31}^c} &= \frac{\partial E}{\partial Y_{21}^c} * K_{21}^c * \text{ReLU}'(A_{31}^c) \\
 \frac{\partial E}{\partial A_{32}^c} &= (\frac{\partial E}{\partial Y_{21}^c} * K_{22}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{22}^c} * K_{21}^c) * \text{ReLU}'(A_{32}^c) \\
 \frac{\partial E}{\partial A_{33}^c} &= \frac{\partial E}{\partial Y_{22}^c} * K_{22}^c * \text{ReLU}'(A_{33}^c)
 \end{aligned}$$

Tal y como se observa en los cálculos obtenidos, estos corresponden a una convolución completa entre el gradiente con respecto a la capa de salida (Y) y los pesos (K), invertidos tanto horizontal como verticalmente. El proceso de cálculo del gradiente con respecto a cada valor de entrada $x \in X$ se presenta en detalle en la figura 2.21, mientras que la manera de invertir los pesos se ilustra en la figura 2.20 [62].

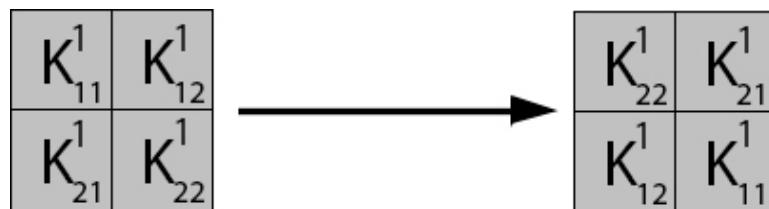


Figura 2.20: Inversión de los pesos en K tanto horizontal como verticalmente

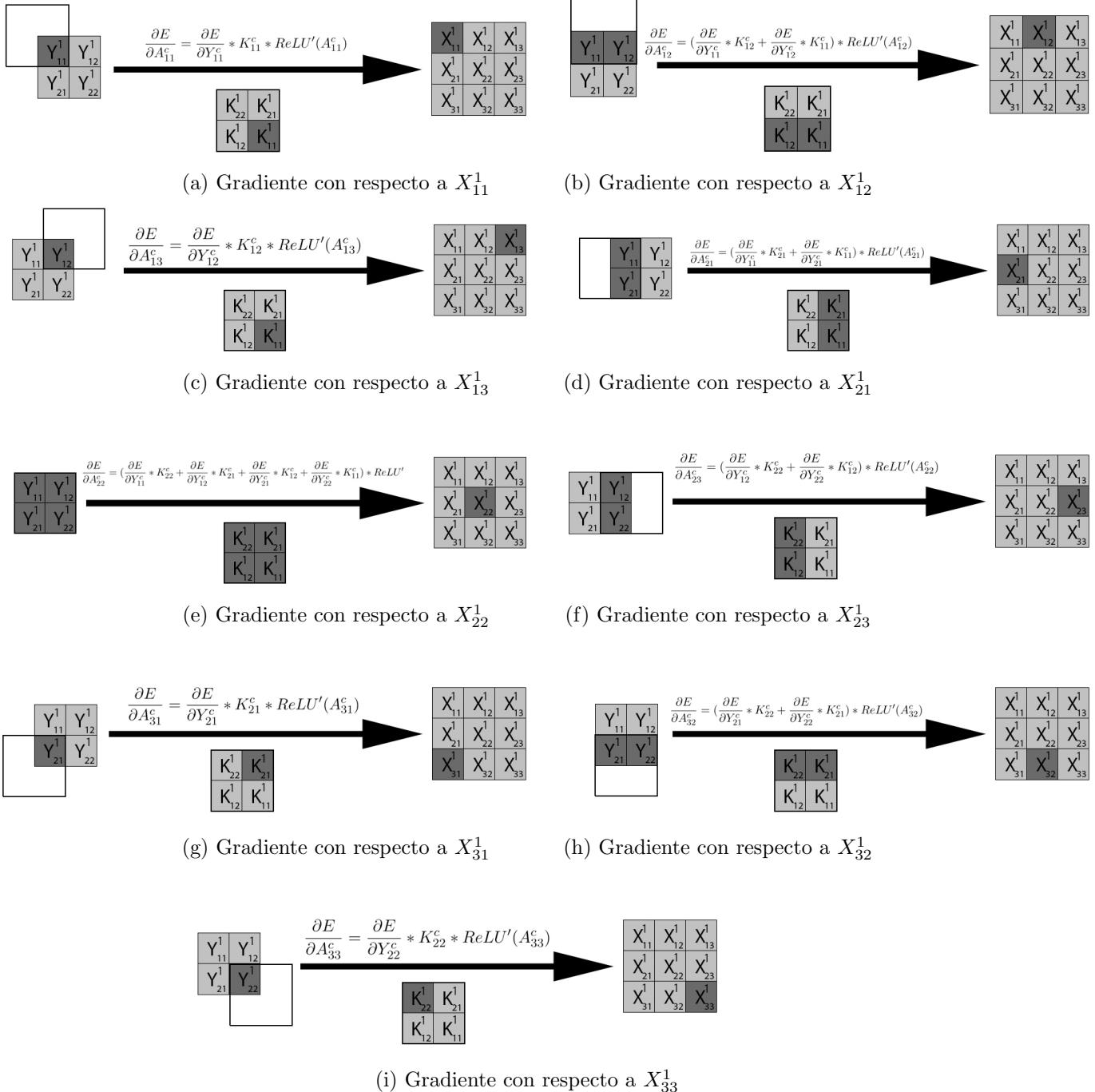
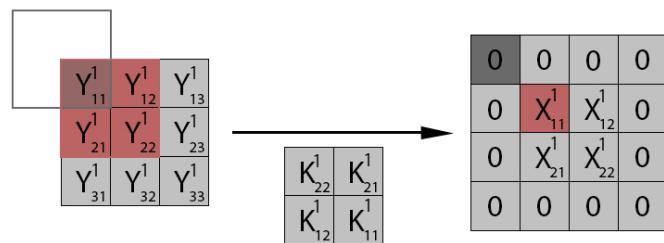


Figura 2.21: Cálculo del gradiente de la pérdida con respecto a cada valor de entrada como convolución entre los pesos K y la salida Y

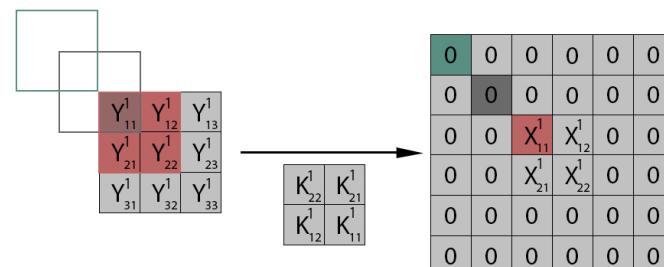
Una vez más, los cálculos presentados en la Figura 2.21 coinciden perfectamente con los obtenidos anteriormente, ya que son idénticos. La única diferencia radica en la manera de presentación, la cual ha sido adaptada para ofrecer una mejor comprensión y generalización del proceso. Esta adaptación facilita la automatización de los cálculos y permite una implementación más eficiente en el código.

2.5.5. Retropropagación en capas convolucionales con relleno

Para realizar la retropropagación en una capa convolucional sin relleno, con respecto a la entrada, se emplea una convolución completa. En contraste, para la retropropagación en una capa convolucional con relleno, con respecto a la entrada, se utiliza una convolución sin relleno. Ambos tipos de convoluciones, así como el cálculo detallado de la retropropagación en cada caso, se examinan exhaustivamente en el apéndice E.



(a) Retropropagación con un nivel de relleno



(b) Retropropagación con dos niveles de relleno

Figura 2.22: Cálculo del gradiente de la pérdida con respecto a la entrada X con uno y dos niveles de relleno

La razón detrás de esta diferencia se detalla en la figura 2.22. En el caso de una convolución con relleno completo, los gradientes se calculan comenzando desde la esquina superior izquierda de la entrada X . Sin embargo, dado que dicha entrada X incluye relleno, no es necesario calcular los gra-

dientes en las posiciones de relleno, ya que estos valores no influyen en los cálculos posteriores.

2.5.6. Capa de agrupación máxima

Componentes

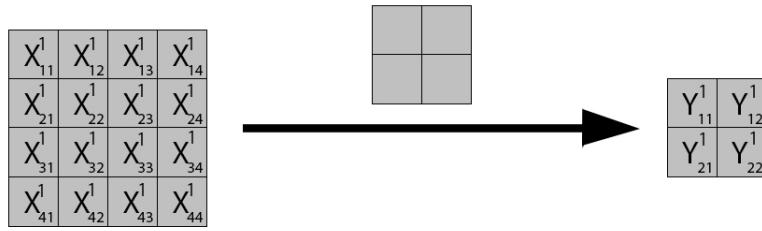


Figura 2.23: Componentes en una capa de agrupación máxima

Al igual que las capas convolucionales, las capas de agrupación máxima también presentan una “ventana” que se irá deslizando por el volumen de entrada. Sin embargo, el resultado en cada iteración viene dado por el valor máximo contenido en ella. Por tanto, no presenta parámetros asociados.

Propagación hacia delante

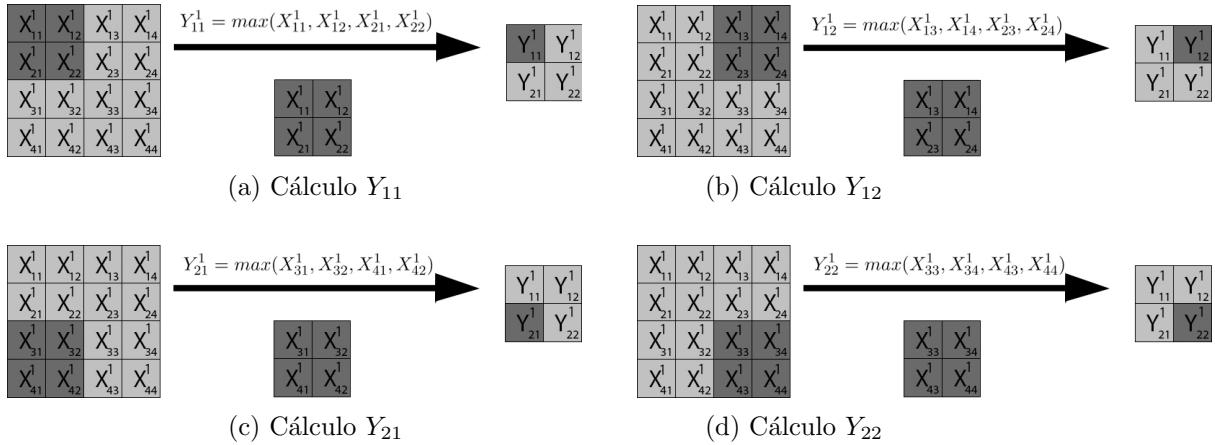


Figura 2.24: Propagación hacia delante en una capa de agrupación máxima

A diferencia de las capas convolucionales, las capas de agrupación máxima no comparten regiones del volumen de entrada entre distintas iteraciones. Este diferente comportamiento se puede comprobar en la figura 2.24 con lo que se describe en la figura 2.13.

Propagación hacia delante de X con varios canales de profundidad

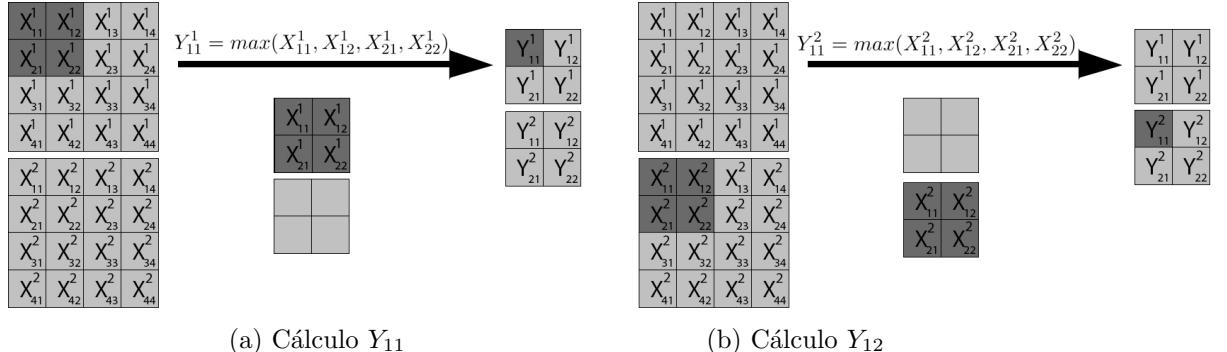


Figura 2.25: Propagación hacia delante en una capa de agrupación máxima

Tal y como se muestra en la figura 2.25, cada “ventana” se desliza sobre el volumen de entrada en un canal de profundidad distinto. Por tanto, al igual que en capas convolucionales, si el volumen de entrada X cuenta con C canales de profundidad, la ventana asociada a la capa de agrupación máxima también contará con C canales de profundidad y cada ventana solo afectará a X en su respectivo canal. Es decir, para la subventana del canal de profundidad $c \in C$, esta solo trabajará sobre la imagen 2D de X asociada al canal c .

Retropropagación en capa de agrupación máxima

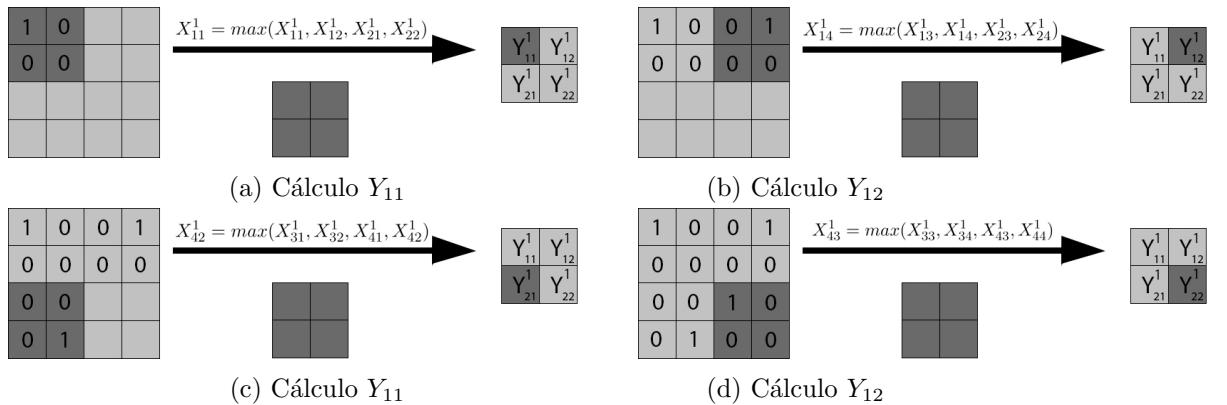


Figura 2.26: Retropropagación en capa de agrupación máxima

En la Figura 2.26 se muestra un ejemplo de retropropagación en una capa de agrupación máxima. Para calcular el gradiente respecto a la entrada (X) en una capa i de agrupación máxima, suponemos que ya se conoce el

gradiente de la pérdida respecto a la salida ($\frac{\partial E}{\partial Y}$) de dicha capa i (se muestra en detalle su cálculo en secciones posteriores). Por tanto, el volumen Y en este caso contendrá dicho gradiente.

Tomando el ejemplo de la Figura 2.26 (a), se entiende que cuando se realizó la propagación hacia delante de dicha capa i, Y_{11}^1 tomó el valor de X_{11}^1 , pues fue el máximo de entre todos los valores de la ventana (formada por X_{11}^1 , X_{12}^1 , X_{21}^1 , y X_{22}^1). Por tanto, dado que en la propagación hacia delante se obtuvo $Y_{11}^1 = X_{11}^1$, tiene sentido que el gradiente de Y_{11}^1 respecto a X_{11}^1 sea 1, pero 0 respecto al resto de valores de X, pues X_{11}^1 fue el único valor en influir sobre Y_{11}^1 . De este modo, el gradiente de la pérdida respecto a la región de X afectada por la ventana $\{X_{11}^1, X_{12}^1, X_{21}^1, X_{22}^1\}$, se puede calcular como se muestra en las fórmulas 2.26, 2.27, 2.28, y 2.29:

$$\frac{\partial E}{\partial X_{11}^1} = \frac{\partial E}{\partial Y} * \frac{\partial Y}{\partial X_{11}^1} = \frac{\partial E}{\partial Y} * 1 = \frac{\partial E}{\partial Y} \quad (2.26)$$

$$\frac{\partial E}{\partial X_{12}^1} = \frac{\partial E}{\partial Y} * \frac{\partial Y}{\partial X_{12}^1} = \frac{\partial E}{\partial Y} * 0 \quad (2.27)$$

$$\frac{\partial E}{\partial X_{21}^1} = \frac{\partial E}{\partial Y} * \frac{\partial Y}{\partial X_{21}^1} = \frac{\partial E}{\partial Y} * 0 \quad (2.28)$$

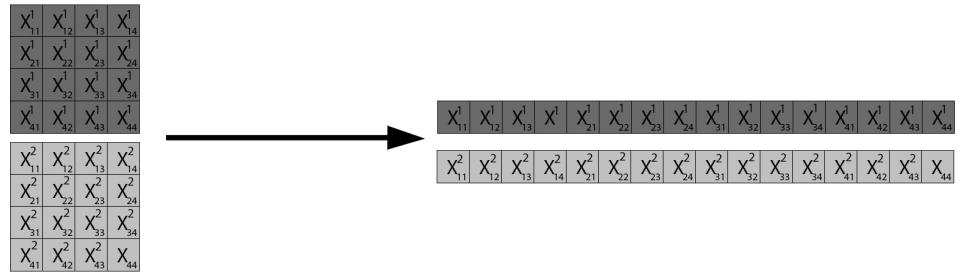
$$\frac{\partial E}{\partial X_{22}^1} = \frac{\partial E}{\partial Y} * \frac{\partial Y}{\partial X_{22}^1} = \frac{\partial E}{\partial Y} * 0 \quad (2.29)$$

Como el resultado obtenido en cada iteración solo depende del valor máximo de la ventana, tiene sentido que la derivada de la salida Y respecto a la entrada X sea igual a 1 solo en dicho caso y 0 en el resto [63] [64].

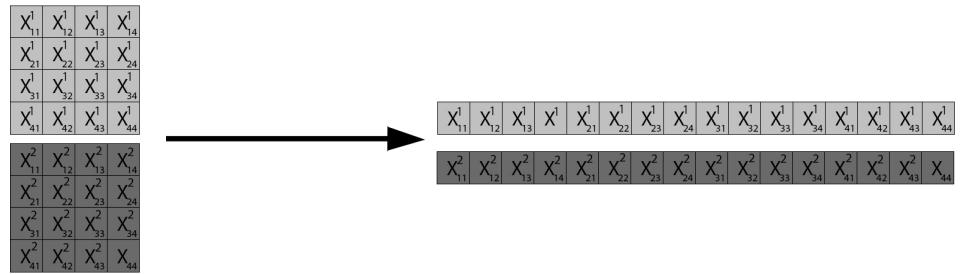
2.5.7. Capa de aplanado

La capa de aplanado tiene como objetivo la creación de un “enlace” entre las capas de convolución y agrupación máxima, con las capas totalmente conectadas. Esto se debe a que, como se mencionó anteriormente, las capas convolucionales y de agrupación máxima trabajan con volúmenes de datos 3D. Sin embargo, las capas totalmente conectadas trabajan con arrays 1D como entrada. Por tanto, la capa de aplanado se encarga de realizar esta conversión de volumen 3D a array 1D y viceversa.

Propagación hacia delante



(a) Propagación hacia delante de la capa de aplanado con la primera capa de profundidad



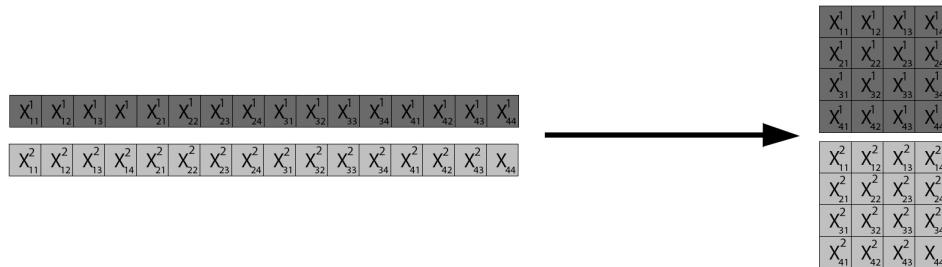
(b) Propagación hacia delante de la capa de aplanado con la segunda capa de profundidad

Figura 2.27: Propagación hacia delante en una capa de aplanado

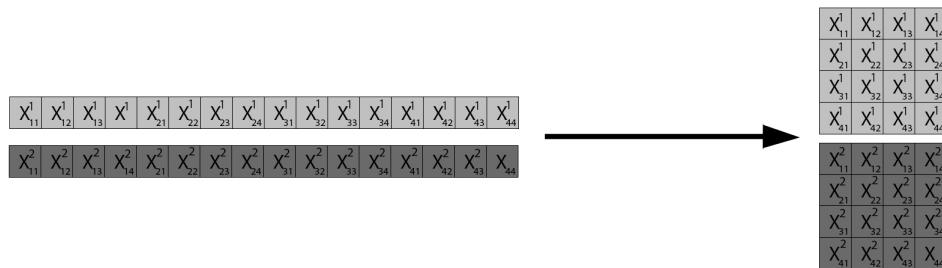
En la propagación hacia delante, se parte de un volumen de entrada 3D para, mediante un “aplanado”, convertirlo en un vector 1D que pueda ser usado como entrada para una capa totalmente conectada, tal y como se muestra en la Figura 2.27.

Como solo se modifica la forma en la que se agrupan los datos, no requiere la presencia de parámetros [65].

Retropropagación



(a) Retropropagación de la primera capa de profundidad en una capa de aplanado



(b) Retropropagación de la segunda capa de profundidad en una capa de aplanado

Figura 2.28: Retropropagación en una capa de aplanado

En la retropropagación de una capa de aplanado, se parte de un array 1D y se convierte en un volumen 3D que pueda ser usado para seguir la retropropagación en capas anteriores convolucionales o de agrupación máxima [65].

2.6. OpenMP

OpenMP [66], es una interfaz de programación de aplicaciones (API), que proporciona directivas de compilador, y rutinas de biblioteca, facilitando así la programación paralela en sistemas con memoria compartida. Diseñada para lenguajes como C, C++ y FORTRAN, OpenMP permite a los desarrolladores escribir código que se ejecute de manera concurrente en múltiples procesadores, optimizando así el rendimiento de las aplicaciones en entornos de multiprocesamiento. [66].

A continuación se presentan algunas de sus principales directivas [67]:

- **Para uso compartido de trabajo paralelo:**

- **parallel:** Define una región paralela. Es decir, el código que ejecutarán varios subprocessos en paralelo.
- **for:** Permite que el trabajo realizado en un bucle **for** dentro de una región paralela se divida entre subprocessos.
- **sections:** Identifica las secciones de código que se van a dividir entre todos los subprocessos.
- **single:** Permite especificar que se debe ejecutar una sección de código en un único subprocesso, (no necesariamente en el subprocesso principal).
- **Para el subprocesso principal y la sincronización:**
 - **maestra:** Especifica que solo el subprocesso principal debe ejecutar una sección del programa.
 - **crítica:** Especifica que el código solo se ejecuta en un subprocesso cada vez.
 - **barrier:** Sincroniza todos los subprocessos de un equipo; todos los subprocessos se pausan en la barrera hasta que todos los subprocessos ejecutan la barrera.
 - **atomic:** Especifica una ubicación de memoria que se actualizará atómicamente.

2.7. CUDA

CUDA (Compute Unified Device Architecture [21]), se define como una plataforma de cómputo paralelo de propósito general, y como un modelo de programación. CUDA se distingue, principalmente, por su capacidad para aprovechar la potencia computacional de las GPUs de NVIDIA. Esto, permite la resolución eficiente de problemas complejos, y computacionalmente intensivos. Al facilitar la programación de GPUs, y permitir la ejecución de tareas en paralelo, logra acelerar significativamente aplicaciones en áreas como la inteligencia artificial, la simulación científica, y el procesamiento de imágenes, aprovechando la capacidad masiva de cómputo de las GPUs.

2.7.1. Gestión de memoria

CUDA permite el desarrollo de aplicaciones en entornos de computación heterogéneos, diferenciando entre memoria asociada a CPU, y memoria asociada a GPU, (separadas por un bus PCI-Express). De esta manera, para ejecutar una sección de código en CPU, sus datos asociados deberán encontrarse en la memoria de la CPU, y, para ejecutar código en GPU, sus datos asociados deberán encontrarse en la memoria asociada a la GPU.

2.7.2. Kernels

CUDA C++ (el empleado en este proyecto) extiende el lenguaje C++ al permitir al programador definir funciones C++ denominadas “kernels”, que, cuando se invocan, se ejecutan N veces en paralelo mediante N hebras CUDA distintas, a diferencia de las funciones C++ tradicionales que se ejecutan una sola vez. Cuando se lanza una función kernel desde la CPU, la ejecución se traslada a la GPU. Una vez en la GPU, esta genera un gran número de hebras y cada una de ellas ejecuta las órdenes especificadas en dicho kernel [68].

2.7.3. Jerarquía de hebras

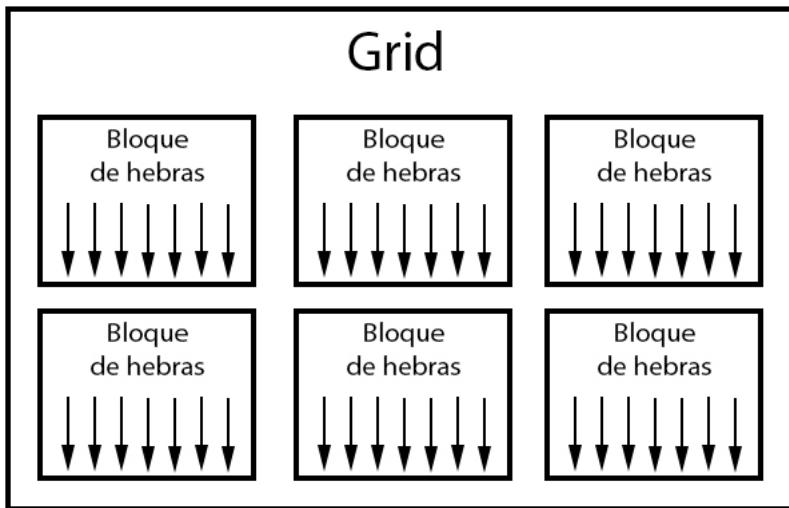


Figura 2.29: Jerarquía de hebras en un grid CUDA

Las hebras CUDA se organizan en una cuadrícula o grid compuesta por varios bloques de hebras (véase la Figura 2.29). De esta manera, cada hebra pertenece a un bloque de hebras, y cada bloque de un mismo kernel pertenece a un mismo grid. Todas las hebras de un mismo grid comparten la misma memoria global. Por tanto, hebras de distintos grids no pueden cooperar. A su vez, las hebras de un mismo bloque se pueden sincronizar y compartir memoria a nivel de bloque, siendo esta más escasa pero presentando una latencia considerablemente menor que la memoria global. CUDA organiza los grids y bloques mediante estructuras que pueden ser 1D, 2D o incluso 3D [7].

2.8. cuDNN (Deep Neural Network)

Es una librería de primitivas acelerada por GPU para redes neuronales profundas. Proporciona implementaciones altamente optimizadas para módulos como la propagación hacia delante y hacia detrás en capas convolucionales, de agrupación máxima, e incluso con funciones de activación como ReLU o sigmoide, entre otras [22].

Su meta es obtener el mejor rendimiento posible en GPUs de NVIDIA para casos importantes de aprendizaje profundo. Dados sus buenos resultados, se emplea en gran cantidad de frameworks de aprendizaje profundo, siendo algunos de ellos Caffe2 [23], Keras [24], MATLAB [25], Pytorch [26], o TensorFlow [27], entre otras [28].

Está diseñada para ser utilizada en aplicaciones de aprendizaje profundo que requieran un poder computacional intensivo, permitiendo a desarrolladores e investigadores aprovechar al máximo las prestaciones de las GPUs de NVIDIA. Entre sus puntos fuertes, destacan la compatibilidad con múltiples arquitecturas de GPU, su optimización de la memoria, y su flexibilidad y facilidad de integración. Por todo esto y más, se ha convertido en un componente esencial en el desarrollo de soluciones de inteligencia artificial, facilitando la investigación y la innovación en el campo del aprendizaje profundo.

2.8.1. Manejador

cuDNN asume que los datos necesarios se encuentran ya en GPU y accesibles desde device. Se hablará de esto con más detalle en la sección sobre CUDA y GPU.

Una aplicación que use cuDNN requiere de la inicialización de un manejador o handle. Dicho manejador será requerido por cuDNN en cada operación que se quiera realizar con dicha librería, permitiendo al usuario un control explícito sobre el funcionamiento de la misma aunque este emplee múltiples hebras o GPUs.

Por ejemplo, en el caso de múltiples GPUs, se pueden asociar diferentes dispositivos con diferentes hebras del host, de forma que cada una tenga un manejador de cuDNN distinto. Así, las llamadas a cuDNN con distinto manejador se ejecutarán en una GPU distinta [69].

2.8.2. Tensores

En cuDNN, un tensor es un vector multidimensional, empleado para representar datos. Se define a través de parámetros como el número de dimensiones, el tipo de dato (por ejemplo, punto flotante de 32 o 64 bits), el tamaño de cada dimensión, y el paso de cada dimensión (esto es, el incremento necesario para acceder al siguiente elemento en esa dimensión).

Esta definición flexible permite configuraciones de datos complejas, incluyendo dimensiones superpuestas y diversas disposiciones de datos. Por lo tanto, las operaciones en cuDNN reciben tensores como entrada y producen tensores como salida [69].

Tensor 3D

Un tensor 3D se suele emplear para representar un volumen 3D como podría ser una imagen RGB. Sus dimensiones se describen mediante 3 letras: B, M y N.

1. **B:** Tamaño del batch
2. **M:** Filas por imagen 2D
3. **N:** Columnas por imagen 2D

Tensor 4D

Suele representar conjuntos de imágenes 2D. Sus dimensiones son N, C, H, W

1. **N:** Tamaño del batch
2. **C:** Número de imágenes 2D
3. **H:** Filas por imagen 2D
4. **W:** Columnas por imagen 2D

cuDNN permite varios formatos pero usaremos el formato de tensores NCHW por compatibilidad con el resto de implementaciones desarrolladas en este proyecto.

Representación de un tensor 4D

Dimensions
 $N = 1$
 $C = 2$
 $H = 5$
 $W = 6$

$C = 1$					
1	2	3	4	5	6
7	8	9	10	11	12
13	14	15	16	17	18
19	20	21	22	23	24
25	26	27	28	29	30

$C = 2$					
31	32	33	34	35	36
37	38	39	40	41	42
43	44	45	46	47	48
49	50	51	52	53	54
55	56	57	58	59	60

Figura 2.30: Ejemplo de tensor 4D con dimensiones: $N=1$, $C=1$, $H=5$, y $W=6$

En la figura 2.30 se muestra un conjunto de imágenes 3D con las siguientes dimensiones:

1. **N**: Tamaño del batch, 1
2. **C**: Número de imágenes 2D o canales por imagen 3D, 2
3. **H**: Filas por imagen 2D, 5
4. **W**: Columnas por imagen 2D, 6

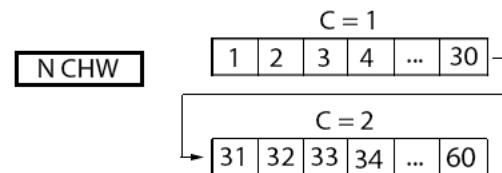


Figura 2.31: Ejemplo de tensor 4D NCHW con dimensiones: $N=1$, $C=1$, $H=5$, y $W=6$

En la figura 2.31 se muestra como se almacena en memoria el volumen de datos de la figura 2.30 según el formato NCHW. Esto es, por cada imagen 3D $n \in \{0, \dots, N-1\}$, almacenar cada canal $c \in \{0, \dots, C\}$ según una ordenación por filas.

2.8.3. Principales funciones

A continuación, se mencionarán las principales funciones de cuDNN que se han empleado en este proyecto, siendo las responsables tanto de la propagación hacia delante como de la retropropagación en capas convolucionales y de agrupación máxima, entre otras.

cudnnConvolutionForward

Dado el manejador cuDNN, el tensor de la entrada, el tensor de los pesos, y el algoritmo de convolución especificado, la función cudnnConvolutionForward genera el tensor de salida. Aunque el procedimiento puede variar, los resultados son equivalentes a los descritos en secciones anteriores. En consecuencia, cudnnConvolutionForward realiza la propagación hacia delante en una capa convolucional. Para obtener información adicional, consulte el apéndice A [70].

cudnnPoolingForward

Dado el manejador cuDNN y el tensor de la entrada, la función cudnnPoolingForward genera el tensor de salida para una capa de agrupación máxima. Aunque el procedimiento puede variar, los resultados son equivalentes a los descritos en secciones anteriores. Para obtener información adicional, consulte el apéndice A [71].

cudnnPoolingBackward

Para una capa *i* específica, dado el manejador cuDNN, el tensor de la salida, y el tensor de entrada de dicha capa *i*, la función cudnnPoolingForward genera el tensor de entrada mediante el cálculo de la retropropagación a través de la misma. Una vez más, los resultados son equivalentes a los descritos en secciones anteriores. Para obtener información adicional, consulte el apéndice A [71].

cudnnConvolutionBackwardFilter

Para una capa *i* específica, dado el manejador cuDNN, el tensor de entrada, el tensor del gradiente con respecto a la salida, y el algoritmo de convolución especificado, la función cudnnConvolutionBackwardFilter genera el tensor del gradiente con respecto a los pesos, mediante el cálculo de la retropropagación a través de la misma. Aunque el procedimiento puede variar, los resultados son equivalentes a los descritos en secciones anteriores. Para obtener información adicional, consulte el apéndice A [72].

cudnnConvolutionBackwardData

Realiza la retropropagación respecto a los datos de entrada en una capa convolucional.

Para una capa *i* específica, dado el manejador cuDNN, el tensor del gradiente con respecto a la salida, el tensor de los pesos, y el algoritmo de convolución especificado, la función cudnnConvolutionBackwardFilter genera el tensor del gradiente con respecto a la entrada, mediante el cálculo de la retropropagación a través de la misma. Aunque el procedimiento puede variar, los resultados son equivalentes a los descritos en secciones anteriores. Para obtener información adicional, consulte el apéndice A [73].

Capítulo 3

Paralelización con sistemas homogéneos y heterogéneos

Este capítulo, explora las técnicas de paralelización en sistemas homogéneos y heterogéneos. Comienza con una revisión de los Tipos de paralelismo, diferenciando el paralelismo del modelo y el paralelismo de datos, y describe cómo se aplican en las implementaciones del proyecto: OpenMP utiliza paralelismo de datos, mientras que CUDA y cuDNN se basan en paralelismo del modelo.

Luego, se detalla la Paralelización en sistemas homogéneos mediante OpenMP, con un enfoque en el paralelismo en el descenso por gradiente estocástico (SGD).

El capítulo continúa con la Paralelización en sistemas heterogéneos, que abarca desde las operaciones GEMM y su aplicación en convoluciones y capas totalmente conectadas, hasta la memoria requerida para GEMM y la retropropagación en capas convolucionales. Finalmente, se analiza la multiplicación de matrices en CUDA y el flujo de ejecución en estos sistemas.

3.1. Tipos de paralelismo

El entrenamiento de una red neuronal convolucional (CNN) se puede paralelizar de diversas maneras. Cuando el modelo se divide entre varios ordenadores que son entrenados con los mismos datos, se conoce **paralelismo del modelo** [74] (por ejemplo, asignando una capa por computador). Por otro lado, cuando se distribuyen los datos entre múltiples nodos, pero se utiliza el mismo modelo para el entrenamiento en cada uno de ellos, se denomina **paralelismo de datos** [75]. En este proyecto, la implementación con OpenMP se basará en un paralelismo de datos, mientras que las implementaciones heterogéneas, utilizando CUDA y cuDNN, se fundamentarán en el paralelismo del modelo.

50 3.2. Paralelización en sistemas homogéneos mediante OpenMP

3.2. Paralelización en sistemas homogéneos mediante OpenMP

Algorithm 2 Descenso del gradiente estocástico mediante OpenMP

Datos de entrenamiento $D = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_N, y_N)\}$.
for cada trabajador $t = 0, \dots, T - 1$ en paralelo **do**
 for época $p \in \{0, \dots, P - 1\}$ **do**
 Desordenar vector de datos D.
 for cada mini batch $m = 0, \dots, M - 1$ **do**
 Iniciarizar gradientes^t a 0.
 Reparto de datos del batch m al trabajador t
 Realizar propagación hacia delante
 Obtener error total con la función de pérdida
 Cada trabajador t realiza la propagación hacia
 detrás y obtiene el gradiente con respecto a
 cada parámetro del modelo.
 Acumular gradientes obtenidos por cada trabajador t.
 Actualizar parámetros.
 end for
 end for
end for

La naturaleza iterativa del algoritmo del descenso del gradiente estocástico, podría parecer un impedimento para la paralelización del entrenamiento del modelo, ya que, la iteración i , depende del resultado obtenido en la iteración $i-1$. Sin embargo, tal y como se expone en [76], [77], y [78], es posible implementar paralelismo en cada iteración del proceso.

En cada época el modelo, se entrena con M subconjuntos de N_m datos, los cuales son disjuntos entre sí. Dados T “trabajadores” o procesos paralelos, cada subconjunto de N_m datos (mini-batch), puede dividirse en T subconjuntos de $\frac{N_m}{T}$ datos, asignando cada uno a un trabajador diferente.

De acuerdo con este enfoque, los datos de entrenamiento se distribuyen entre los distintos trabajadores T tanto para la propagación hacia delante como para la retropropagación posterior. En el caso de la retropropagación, se debe acumular el gradiente de la pérdida con respecto a cada parámetro obtenido por cada trabajador. Una vez en posesión este gradiente ‘total’, se procede a la actualización de los parámetros del modelo.

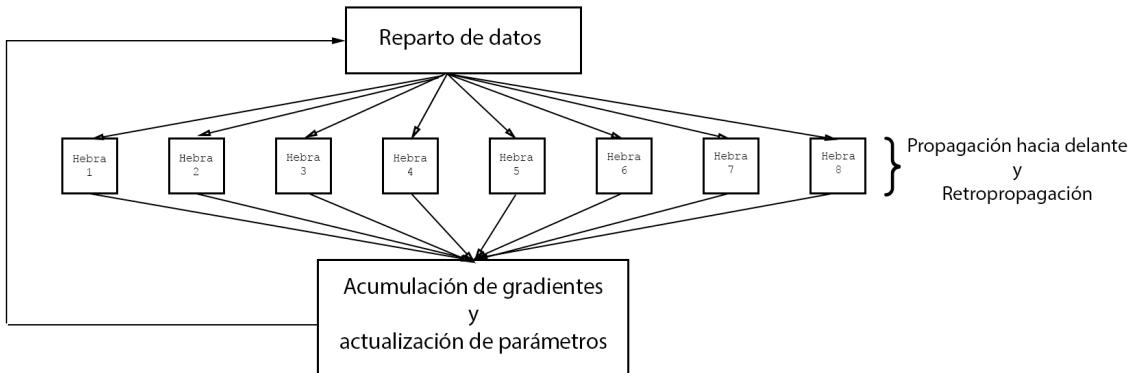


Figura 3.1: Flujo de las hebras en la implementación con OpenMP

Tal como se muestra en la Figura 3.1, aunque cada hebra realiza ciertas secciones de código en paralelo, como la propagación hacia delante o la retropropagación, existen momentos en los que estas hebras deben sincronizarse, como durante la distribución de los datos de un minibatch, o coordinarse para llevar a cabo operaciones conjuntas, como la acumulación y actualización de pesos.

3.3. Paralelización en sistemas heterogéneos

Una vez comprendidos los cálculos empleados por una CNN, en esta sección, se introducirá la metodología para llevar a cabo estos cálculos desde una perspectiva heterogénea. Es decir, mediante el uso de unidades de procesamiento gráfico (GPU) para la multiplicación matricial.

3.3.1. GEMM

El enfoque GEMM [79] (General Matrix Multiply o Multiplicación General de Matrices), es ampliamente reconocido en el campo del aprendizaje profundo, y se utiliza en numerosas bibliotecas especializadas, como Caffe, Torch-cunn, Theano-CorrMM, o incluso CuDNN [80].

En el contexto de redes neuronales convolucionales, el método GEMM facilita una reducción significativa en el tiempo de cómputo requerido. Sin embargo, esta optimización conlleva un incremento en el espacio de memoria necesario.

3.3.2. Convolución como GEMM

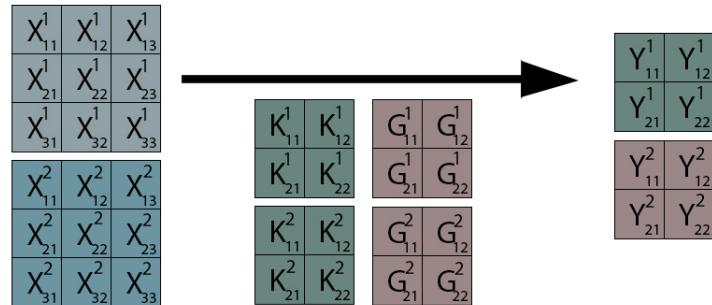
En el contexto de las capas convolucionales, la aplicación del enfoque GEMM (General Matrix Multiply), implica un proceso de “desenrollado”

tanto del volumen de entrada X , como de la matriz de filtros K . Este proceso, incluye la creación de una nueva matriz 2D, denominada X_{unroll} , donde, cada columna de dicha matriz, contiene todos los elementos de X necesarios para calcular una posición específica del volumen de salida Y . Dado que los resultados de cada convolución se suman a lo largo de cada canal de profundidad, estos pueden ser organizados en una matriz de gran tamaño. En este enfoque, cada kernel de pesos K , se transforma en una fila de una extensa matriz de pesos denominada M_K . Este procedimiento, se ilustra en la Figura 3.2, donde, los kernels K y G , se representan en colores verde y marrón, respectivamente.

Mientras que el método estándar, requiere varias iteraciones para calcular cada valor del volumen de salida Y , (como se ilustra en la Figura 2.13), el enfoque GEMM, permite que cada valor de Y se obtenga mediante la multiplicación de una fila de la matriz de pesos M_K , (ilustrada como verde y marrón en la Figura 3.2), con una columna de la matriz X_{unroll} , (representada en azul en la Figura 3.2). Esta técnica, detallada en [9], optimiza el tiempo de cómputo necesario para la operación de convolución, al transformar el problema en una multiplicación matricial que puede llevarse a cabo en GPU. De este modo, dado un conjunto de M filtros (kernels), de tamaño $K \times K$, un volumen de entrada X de dimensiones $C \times H \times W$, y un volumen de salida Y de dimensiones $M \times H_{out} \times W_{out}$, la multiplicación matricial entre la matriz de pesos M_K , que posee M filas y $K^2 * C$ columnas, y X_{unroll} que contiene $K^2 * C$ filas y $H_{out} * W_{out}$ columnas, produce el mismo volumen de salida Y que una convolución ordinaria con M kernels distintos.

Finalmente, aunque se haya omitido para simplificar la explicación del método, es necesario destacar que, una vez realizada la multiplicación matricial, se debe sumar el sesgo correspondiente, y aplicar la función de activación a cada elemento del volumen de salida Y .

ESTÁNDAR



GEMM

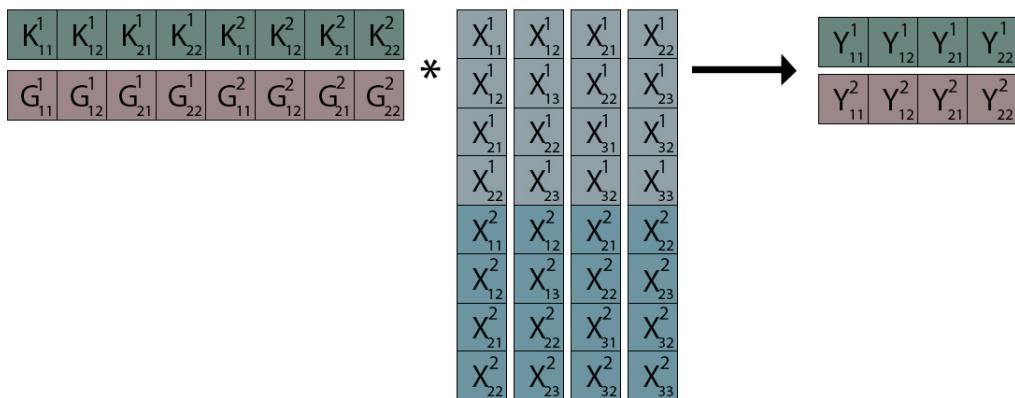


Figura 3.2: Convolución estándar frente a convolución GEMM

3.3.3. Memoria requerida al emplear GEMM

Al realizar una convolución, un mismo filtro de pesos puede aplicarse a múltiples posiciones de la matriz de entrada X . Esto, requiere duplicar los valores de la entrada X en la matriz X_{unroll} , tantas veces como sea necesario para garantizar el acceso adecuado. Por ejemplo, en una matriz de entrada X de dimensiones (3x3), y un kernel de pesos K de (2x2), (como se ilustra en la figura 3.2), el valor central de X deberá duplicarse 4 veces, mientras que los valores en las posiciones laterales centrales se dupliquan dos veces, y los valores en las esquinas no requieren duplicación, ya que solo se accede a ellos una vez. De esta forma, una matriz inicial X de (3x3) con 9 valores, se transforma en una matriz X_{unroll} con $4*1 + 2*4 + 1*4 = 16$ valores, lo que genera un factor de expansión de $16/9 = 1.8$.

Cada valor de salida Y_{ij}^m , se obtiene a partir de la convolución de un kernel de $K*K$ pesos, aplicados a la entrada X , a lo largo de sus C canales de pro-

fundidad. Por lo tanto, el número de columnas de la matriz desenrollada X_{unroll} , se define como $CxKxK$. De igual manera, dado que el resultado de la multiplicación de cada fila por cada columna de las matrices desenrolladas genera un valor Y_{ij}^m , la matriz $X_{unrolled}$ tiene tantas columnas como elementos en el volumen de salida Y , es decir, $MxH_{out}xW_{out}$.

El ratio de expansión, se calcula mediante $\frac{C*K*K*H_{out}*W_{out}}{C*H*W}$, donde H y W representan las dimensiones de la entrada X en términos de filas y columnas, respectivamente, y H_{out} y W_{out} corresponden a las filas y columnas de la salida Y . En términos generales, cuando las dimensiones de la entrada X , y, de la salida Y , son considerablemente mayores que las del filtro de pesos K , el ratio de expansión será de KxK .

Cada kernel de pesos, con dimensiones KxK , se representa como una fila dentro de la matriz total de pesos. Por lo tanto, la matriz total de pesos estará compuesta de KxK filas, y M columnas, siendo M el número de filtros de pesos aplicados sobre la entrada X .

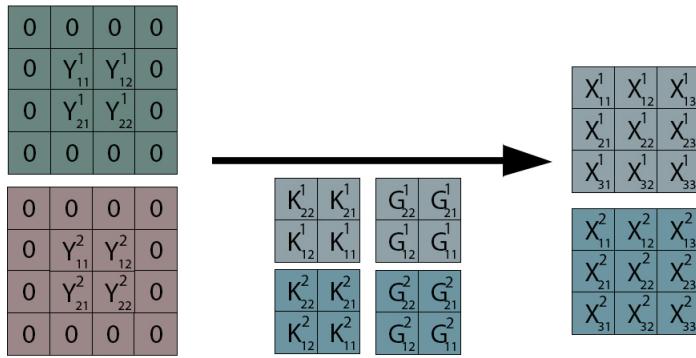
Al realizar múltiples convoluciones sobre una misma entrada X , (una por cada filtro de pesos distinto), es posible utilizar una única matriz expandida, denominada $X_{unrolled}$. Por otro lado, cuando se emplean filtros de pesos considerables, (como $5x5$ o mayores), la expansión de la matriz de entrada con un ratio de KxK , puede generar matrices de tamaño excesivo. Dado que, el almacenamiento de todas las matrices de entrada expandidas, para un minibatch completo, podría resultar en un consumo de memoria significativo, se adopta una estrategia más eficiente. Esta consiste, en reservar un único espacio de memoria, con dimensiones $CxKxKxH_{out}xW_{out}$, (es decir, una instancia de $X_{unrolled}$), que se reutiliza para procesar cada dato del minibatch, optimizando así el uso de la memoria, y evitando la sobrecarga que supondría almacenar múltiples matrices expandidas simultáneamente [9].

3.3.4. Retropropagación GEMM en capa convolucional

En la figura E.19, se observó cómo la retropropagación, con respecto a la entrada en una capa convolucional, consiste en una convolución entre los kernels de pesos, y el volumen de salida. De manera análoga, en la Figura E.18, también se mostró cómo el gradiente con respecto a los pesos, se obtiene mediante una convolución entre el volumen de entrada, y el volumen de salida.

Dado que ambos gradientes se pueden implementar como convoluciones, y, considerando que en la sección 3.3.2, se demostró cómo implementar convoluciones utilizando el enfoque GEMM, es razonable asumir que la retropropagación en una capa convolucional, también se puede llevar a cabo mediante dicho enfoque.

ESTÁNDAR



EMM

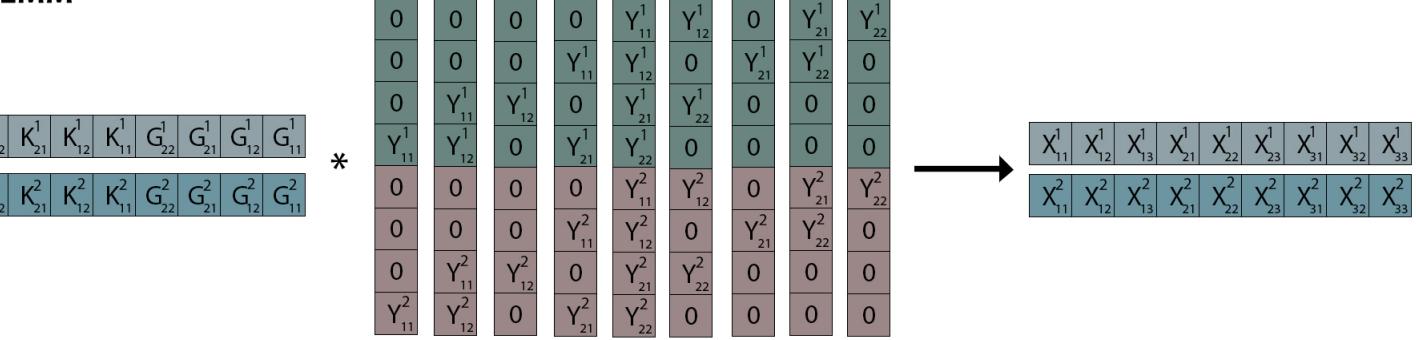
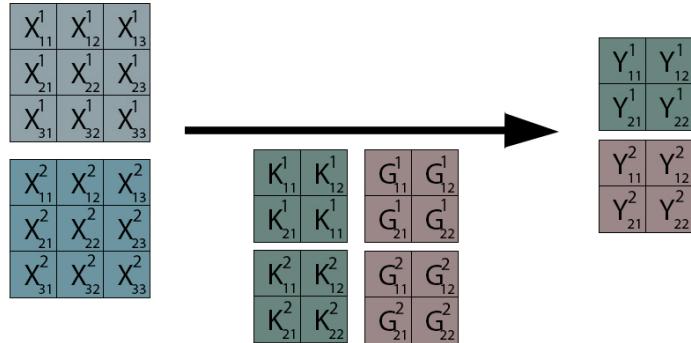


Figura 3.3: Retropropagación respecto a la entrada en una capa convolucional de forma estándar frente a GEMM

En la Figura 3.3, es importante destacar que, dado que canal de profundidad $c \in C$ de cada kernel, solo influye en el correspondiente canal c del volumen de entrada X , en la retropropagación, únicamente recibirá el gradiente proveniente de dicho canal. De esta manera, dado que cada kernel se utilizó para producir un canal $m \in M$ distinto en el volumen de salida Y , es posible concatenar los M diferentes kernels para un mismo canal de profundidad c , de modo que, cada canal c , de cada kernel m , se multiplique por su subconjunto correspondiente en el canal m de Y , e influya sobre el canal c de X , (véase la Figura 3.3).

ESTÁNDAR



GEMM

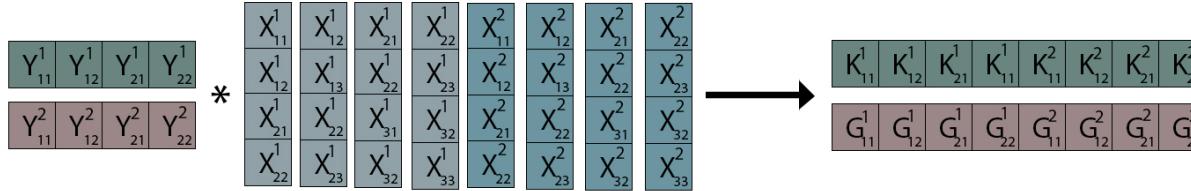


Figura 3.4: Retropropagación respecto a los pesos en una capa convolucional de forma estándar frente a GEMM

En el caso del cálculo del gradiente de la pérdida con respecto a los pesos de una capa convolucional, cabe recordar que, este proceso, se puede implementar como una convolución entre el volumen de salida Y , y el volumen de entrada X . Utilizando el enfoque GEMM, tal como se ilustra en la Figura 3.4, se observa que, para llevar a cabo esta operación, es necesario “desenrollar” tanto el volumen de entrada X como el volumen de salida Y . De este modo, al multiplicar cada fila de Y (desenrollado), por cada columna de X (desenrollado), se multiplican todos los elementos del volumen de salida Y , y del volumen de entrada X , que, previamente, en la propagación hacia delante, fueron multiplicados por un peso distinto, calculando así el gradiente de dicho peso.

3.3.5. Capa totalmente conectada como GEMM [1]

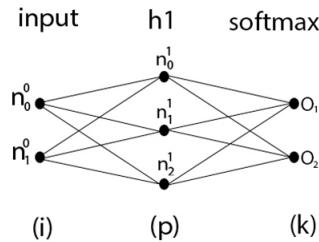
Al igual que las capas convolucionales, las capas totalmente conectadas también se pueden implementar mediante un enfoque GEMM. Para ello, analizaremos por separado cada uno de los tres casos que se presentan:

- Propagación hacia delante
- Cálculo del gradiente con respecto a la entrada

- Cálculo del gradiente con respecto a los pesos

Propagación hacia delante

ESTÁNDAR



$$a_j^1 = \sum_{i=0}^{i=1} [z_i^0 * w_{i,j}^0] + b_j^1$$

GEMM

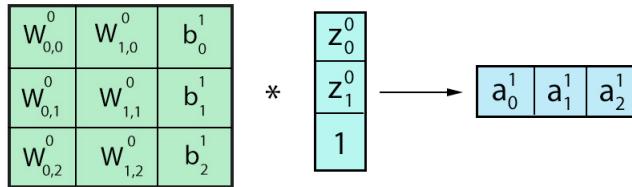


Figura 3.5: Propagación GEMM hacia delante en una capa totalmente conectada

En la Figura 3.5, se presentan dos enfoques distintos para implementar la propagación hacia delante en una capa totalmente conectada. El método **ESTÁNDAR**, se refiere al enfoque utilizado en secciones anteriores. En contraste, el método **GEMM**, ofrece una perspectiva alternativa para abordar esta tarea. Este enfoque implica, para una capa i , agrupar los pesos y sesgos de dicha capa en una matriz `M_pesos_sesgos`, y, por otro lado, utilizar una matriz `M_neuronas` de una sola columna que contiene todas las neuronas de la capa i junto con un elemento adicional con valor igual a 1, que se emplea para sumar el sesgo. La matriz `M_pesos_sesgos` y la matriz `M_neuronas` se ilustran en la Figura 3.5 mediante los colores verde y azul claro, respectivamente.

Siguiendo la estructura descrita en la Figura 3.5, cada multiplicación de una fila de la matriz `M_pesos_sesgos` por una columna de la matriz `M_neuronas` produce el valor de una neurona en la capa $i+1$. Para completar la propagación hacia delante de dicha capa, es necesario aplicar la función de activación

a los resultados obtenidos.

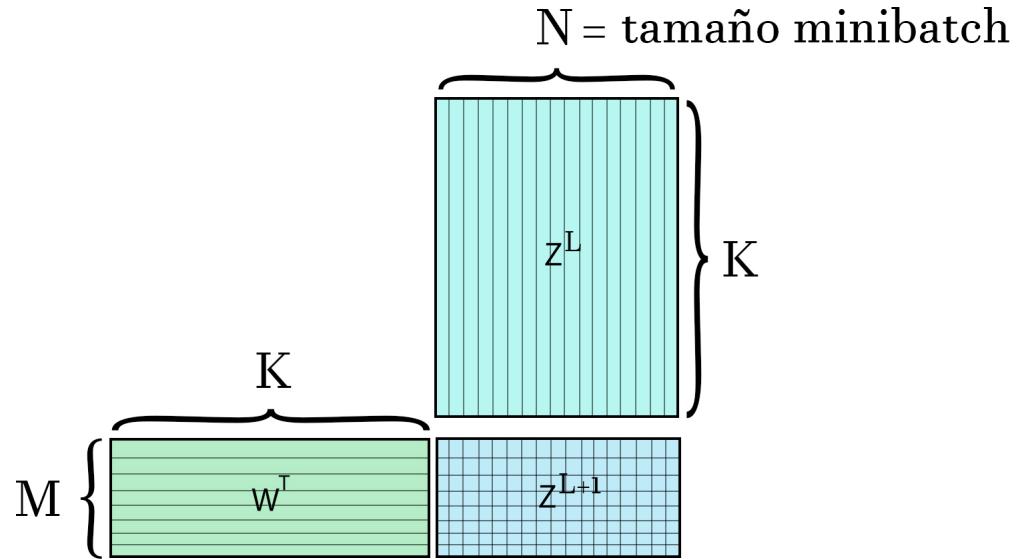


Figura 3.6: Propagación GEMM de un minibatch entero hacia delante en una capa totalmente conectada

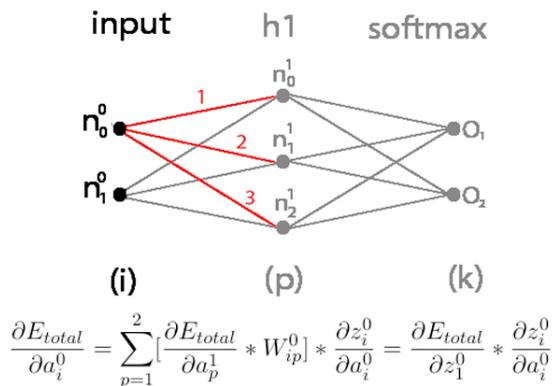
Dado que, los pesos y sesgos permanecen constantes durante todo un minibatch durante el entrenamiento, para un minibatch de tamaño N , podemos expandir la matriz M_{neuronas} definida anteriormente para que tenga N columnas, una para cada elemento del minibatch. De esta manera, mediante una simple multiplicación matricial (enfoque GEMM), es posible realizar la propagación hacia delante de un minibatch completo para una capa totalmente conectada, tal como se muestra en la Figura 3.6 [1].

Retropropagación

De manera similar a la propagación hacia delante, la retropropagación en una capa totalmente conectada también puede ser calculada utilizando un enfoque de multiplicación matricial, como es el enfoque GEMM.

Gradiente respecto a la entrada

ESTÁNDAR



GEMM

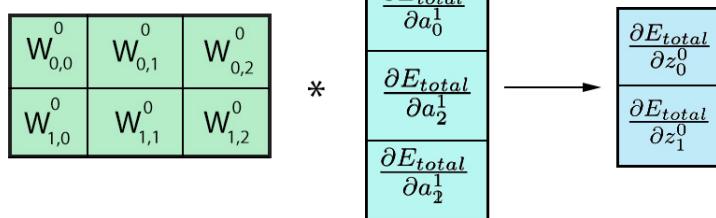


Figura 3.7: Cálculo del gradiente respecto a la entrada en una capa totalmente conectada

Supongamos que estamos en la capa i , y ya disponemos del gradiente de la pérdida con respecto a la entrada de la capa $i+1$. En este caso, podemos calcular el gradiente con respecto a la entrada de la capa i , tal como se ilustra en la Figura 3.7.

En este contexto, se considera una matriz **pesos**, en la que cada fila j , contiene los pesos que conectan la neurona j de la capa i , con todas las neuronas de la capa $i+1$. La matriz **neuronas**, por su parte, tiene una sola columna y contiene las neuronas de la capa $i+1$. Sin embargo, en esta ocasión, las neuronas de esta matriz **neuronas** contienen el gradiente de la pérdida hasta

esa capa. De este modo, cada multiplicación de una fila de **pesos**, por una columna de **neuronas**, produce el cálculo del gradiente de la pérdida con respecto a una neurona de entrada distinta.

En la Figura 3.7, se presenta tanto una representación visual de las matrices **neuronas**, y **pesos**, así como la fórmula utilizada en el método estándar. Esto, facilita una comprensión más clara, de que ambos métodos representan enfoques alternativos para lograr el mismo objetivo, produciendo así resultados equivalentes.

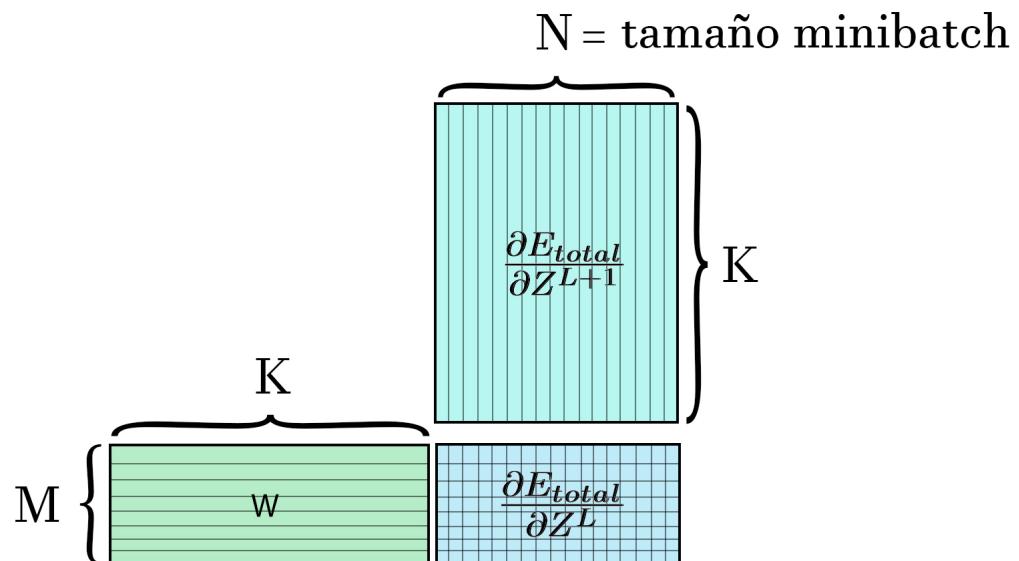
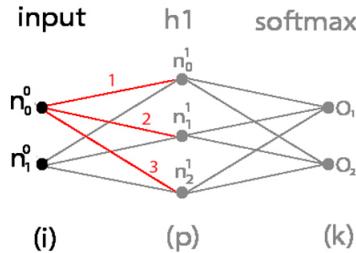


Figura 3.8: Cálculo del gradiente respecto a la entrada de todo un minibatch en una capa totalmente conectada

De manera similar al apartado anterior, para un minibatch de N elementos, es posible expandir la matriz **neuronas** para que contenga N columnas. Esto, permite calcular el gradiente de la pérdida con respecto a la entrada para una capa i , a lo largo de todo el minibatch, mediante una simple multiplicación matricial, tal como se ilustra en la Figura 3.8.

Gradiente respecto a los pesos

ESTÁNDAR



$$\frac{\partial E_{total}}{\partial W_{ip}^0} = \sum_{p=0}^2 \left[\frac{\partial E_{total}}{\partial a_p^1} * z_i^0 \right]$$

GEMM

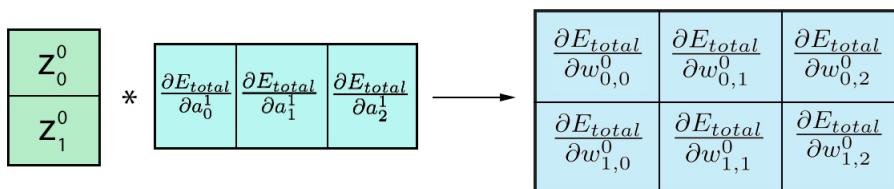


Figura 3.9: Cálculo del gradiente respecto a los pesos en una capa totalmente conectada

En este caso, para una capa i , consideramos dos matrices que denominaremos `matriz_entrada`, y `matriz_salida`. La primera matriz, `matriz_entrada`, se ilustra en color verde en la Figura 3.9, y se caracteriza por tener una sola columna que contiene las neuronas de entrada de la capa i . La segunda matriz, `matriz_salida`, se muestra en color azul claro en la Figura 3.9, y tiene una sola fila, con el gradiente de la pérdida con respecto a cada neurona de salida de la capa i . De esta manera, cada multiplicación de una fila de `matriz_entrada`, por una columna de `matriz_salida`, produce el cálculo del gradiente de la pérdida con respecto a un peso que conecta una neurona de la capa i , con una neurona de la capa $i+1$. En otras palabras, se calcula el gradiente de la pérdida con respecto a los pesos de la capa i , tal y como se muestra en la Figura 3.9.

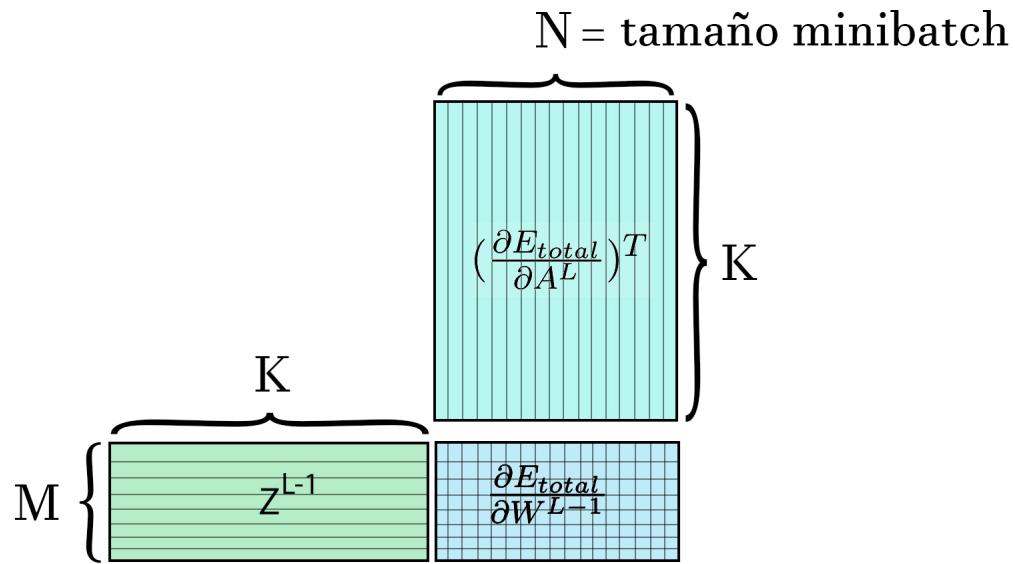


Figura 3.10: Cálculo del gradiente respecto a los pesos de todo un minibatch en una capa totalmente conectada

Para un minibatch de tamaño N , se pueden expandir ambas matrices, de manera que cada una contenga N filas o columnas, según se indica en la Figura 3.10. Esto, permite calcular el gradiente de la pérdida con respecto a los pesos para una capa i , en todo un minibatch, mediante una multiplicación matricial.

3.3.6. Multiplicación de matrices en CUDA

Dadas dos matrices A de tamaño $M \times K$, y B de tamaño $K \times N$, el producto de la multiplicación AB produce una matriz C de tamaño $M \times N$. Basándome en mi experiencia, una primera aproximación para realizar esta operación en CUDA, consiste en crear un bloque de tamaño $K \times N$, de manera que, cada hebra, calcule una posición de la matriz resultado C . Dada la simplicidad extrema de esta implementación, el desarrollador que la llevó a cabo, buscará formas de reducir el tiempo de cómputo requerido, optando en la mayoría de los casos por emplear memoria compartida de bloque. Tras desarrollar esta “segunda versión”, el siguiente paso es comparar ambas implementaciones para verificar si realmente se obtiene una mejora significativa en el redimensionamiento.

En el proceso, se observa que, para matrices de tamaño reducido, ambas implementaciones parecen funcionar adecuadamente. Sin embargo, a medida que aumenta el tamaño de las matrices, se detecta un claro “tope”, debido a un defecto compartido por ambas: el tamaño de bloque. Por ejemplo, para calcular $C(50 \times 50) = A(50 \times 10) \times B(10 \times 50)$, ambas implementaciones requerirían un bloque de $50 \times 50 = 2500$ hebras, lo cual excede el límite permitido

por CUDA (1024 hebras por bloque).

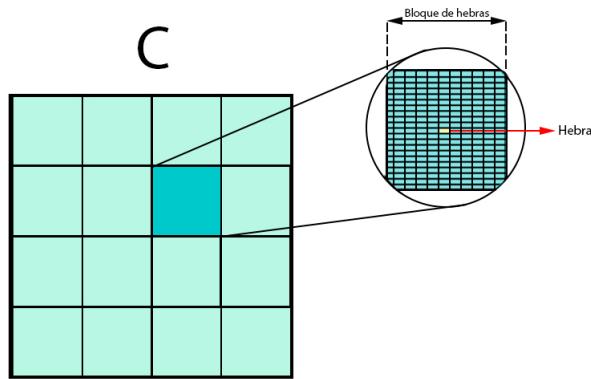


Figura 3.11: Tercera implementación de multiplicación matricial con CUDA

Por lo tanto, resulta evidente la necesidad de una “tercera” implementación que carezca de este importante defecto. Esta, se caracteriza por dividir la matriz C en submatrices o **tiles**, de manera que, cada tile, corresponda a un bloque CUDA. A partir de las implementaciones anteriores, el cambio es inmediato, y los resultados son extraordinarios, ya que, esta solución, permite multiplicación matricial sin limitaciones de tamaño para A y B , además de ofrecer mejoras significativas en el rendimiento [81]. Sin embargo, esta última implementación carece de los beneficios que ofrece la memoria compartida a nivel de bloque, lo que sugiere, una vez más, la posible existencia de una mejora adicional sobre la misma.

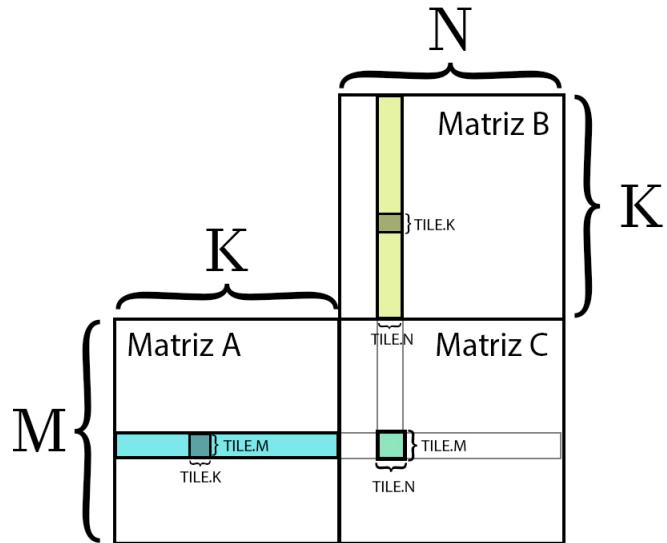


Figura 3.12: Cuarta implementación de multiplicación matricial con CUDA

Para calcular cada valor de la matriz resultado C , es necesario multiplicar una fila de A , por una columna de B . Es decir, multiplicar dos vectores de K elementos. Una idea inicial, consiste en cargar $2K$ elementos en memoria compartida para su posterior uso. Sin embargo, si cada hebra de cada bloque, requiere $2K$ elementos, esta estrategia no es viable, debido a la limitada y escasa memoria compartida disponible. Un enfoque más eficiente consiste en, dado un bloque 2D de dimensiones $TILE \times TILE$, almacenar $2 \times TILE \times TILE$ elementos, siendo $TILE$ el tamaño de cada tile. El objetivo, es dividir el cálculo de cada valor de la matriz resultado C , en iteraciones, y, en cada una de ellas, cada hebra multiplica $TILE$ elementos de A , por $TILE$ elementos de B , acumulando y sumando los resultados obtenidos en cada iteración. De este modo, este será el método utilizado en el presente proyecto para realizar multiplicaciones matriciales en entornos heterogéneos, siguiendo las recomendaciones de NVIDIA en [82].

3.3.7. Flujo de ejecución

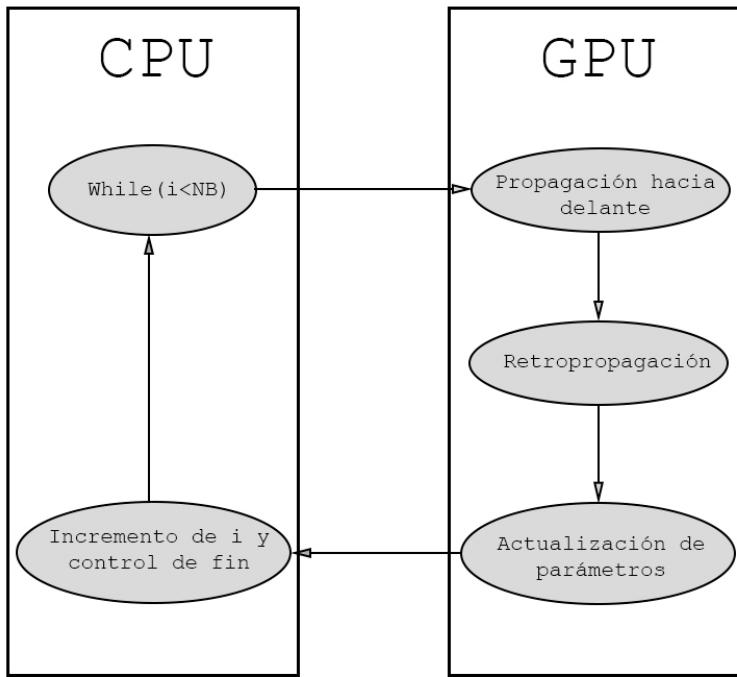


Figura 3.13: Flujo de las hebras en la implementación con CUDA

La Figura 3.13 ilustra el flujo de ejecución para cada época de entrenamiento en la implementación con CUDA. Tal como se mencionó anteriormente, cada época se divide en `NB` minibatches. Durante cada uno de estos minibatches, la CPU se encarga de gestionar el inicio y la finalización, mientras que la GPU se ocupa del cómputo intensivo, que abarca la propagación hacia adelante, y la retropropagación, además de llevar a cabo la actualización de los parámetros.

De este modo, la CPU controla la mayor parte del flujo de control del programa. Por ejemplo, cuando es necesario realizar la propagación hacia delante o la retropropagación, la CPU invoca un kernel CUDA que se ejecuta en GPU, delegando a esta última todo el cómputo intensivo, como en el caso de la multiplicación matricial. Una vez finalizado dicho cómputo, el control regresa a la CPU, que se encarga de gestionar la invocación del siguiente kernel CUDA, así como de iniciar o finalizar cada minibatch. De esta manera, la implementación con cuDNN es muy similar a la implementación con CUDA. Sin embargo, en la implementación con CUDA, la CPU invoca kernels que se ejecutan en la GPU, mientras que en la implementación con cuDNN, la CPU llama a funciones de cuDNN, las cuales se encargan de todo el cómputo intensivo.

Capítulo 4

Comparación entre distintas implementaciones

En este capítulo, se compara el rendimiento de diversas implementaciones de redes neuronales convolucionales (CNN). Primero, se presentan cinco modelos diferentes con configuraciones variadas en cuanto al tamaño de las imágenes de entrada, el número de capas convolucionales, de agrupación máxima, y neuronas en las capas totalmente conectadas, junto con diferencias en los hiperparámetros como el learning rate y el tamaño del mini-batch.

Luego, se utilizan dos bases de datos, CIFAR10 [83] y 10 Big Cats Of The Wild [84], para entrenar y evaluar estos modelos. Los resultados muestran que el entrenamiento con el Modelo 1 en ambas bases de datos presenta una disminución en la entropía cruzada y un aumento en la precisión, confirmando la efectividad del modelo.

Finalmente, se realiza una comparación detallada de los tiempos de cómputo de las distintas implementaciones. En cuanto a las implementaciones en CPU, se observa una mejora significativa en el rendimiento al utilizar OpenMP en comparación con la implementación secuencial. En el caso de las implementaciones en GPU, aunque CUDA muestra una ligera mejora de rendimiento en modelos de menor complejidad, cuDNN ofrece un rendimiento superior en modelos más complejos. Por último, se presentan gráficos y una tabla que detallan los tiempos de ejecución de las operaciones en cada implementación.

4.0.1. Modelos a emplear

A continuación, se presenta la arquitectura general de algunos de los modelos que se utilizarán para medir el rendimiento y comparar las distintas implementaciones de redes neuronales convolucionales (CNN) desarrolladas a lo largo de este proyecto.

1. Modelo 0

- Tamaño imágenes de entrada: 3x12x12
- Capas convolucionales
 - 16 kernels de tamaño 3x3, padding=1
 - 32 kernels de tamaño 3x3, padding=1
- Capas de Agrupación Máxima
 - Kernel de tamaño 2x2
 - Kernel de tamaño 2x2
- Capas totalmente conectadas
 - n_neuronas_tras_flatten
 - 100 neuronas
 - 10 neuronas
- learning rate = 0.01
- 1000 imágenes de entrenamiento
- Tamaño de mini batch = 32

2. Modelo 1

- Tamaño imágenes de entrada: 3x32x32
- Capas convolucionales
 - 16 kernels de tamaño 3x3, padding=1
 - 32 kernels de tamaño 3x3, padding=1
- Capas de Agrupación Máxima
 - Kernel de tamaño 2x2
 - Kernel de tamaño 2x2
- Capas totalmente conectadas
 - n_neuronas_tras_flatten
 - 100 neuronas
 - 10 neuronas
- learning rate = 0.01
- 1000 imágenes de entrenamiento
- Tamaño de mini batch = 32

3. Modelo 2

- Tamaño imágenes de entrada: 3x40x40
- Capas convolucionales
 - 16 kernels de tamaño 3x3, padding=1
 - 32 kernels de tamaño 3x3, padding=1
- Capas de Agrupación Máxima
 - Kernel de tamaño 2x2
 - Kernel de tamaño 2x2
- Capas totalmente conectadas
 - n_neuronas_tras_flatten
 - 100 neuronas
 - 10 neuronas

- learning rate = 0.001
- 1000 imágenes de entrenamiento
- Tamaño de mini batch = 32

4. Modelo 3

- Tamaño imágenes de entrada: 3x40x40
- Capas convolucionales
 - 16 kernels de tamaño 3x3, padding=1
 - 32 kernels de tamaño 3x3, padding=1
 - 32 kernels de tamaño 3x3, padding=1
- Capas de Agrupación Máxima
 - Kernel de tamaño 2x2
 - Kernel de tamaño 2x2
 - Kernel de tamaño 2x2
- Capas totalmente conectadas
 - n_neuronas_tras_flatten
 - 128 neuronas
 - 50 neuronas
 - 10 neuronas
- learning rate = 0.00001
- 2000 imágenes de entrenamiento
- Tamaño de mini batch = 32

5. Modelo 4

- Tamaño imágenes de entrada: 3x50x50
- Capas convolucionales
 - 32 kernels de tamaño 3x3, padding=1
 - 32 kernels de tamaño 3x3, padding=1
 - 32 kernels de tamaño 3x3, padding=1
- Capas de Agrupación Máxima
 - Kernel de tamaño 2x2
 - Kernel de tamaño 2x2
 - Kernel de tamaño 2x2
- Capas totalmente conectadas
 - n_neuronas_tras_flatten
 - 200 neuronas
 - 50 neuronas
 - 10 neuronas
- learning rate = 0.00001
- 2500 imágenes de entrenamiento
- Tamaño de mini batch = 32

4.0.2. Bases de datos

Se utilizará una variedad de bases de datos en el presente estudio. Entre ellas, se incluyen los resultados obtenidos durante el entrenamiento con las bases de datos CIFAR10 [83], y 10 Big Cats Of The Wild [84], ambas caracterizadas por ser problemas de clasificación multiclasa con 10 clases distintas. En CIFAR10, las 10 clases representan aviones, automóviles, pájaros, gatos, ciervos, perros, ranas, caballos, barcos y camiones. Por otro lado, en 10 Big Cats, las 10 clases representan el leopardo africano, caracal, guepardo, leopardo nublado, jaguar, leones, ocelote, puma, leopardo de las nieves y tigre. Además, para cada clase se utilizará el mismo número de imágenes.

4.0.3. Resultados en entrenamiento

En esta sección, se utiliza el *Modelo 1* previamente definido, para su entrenamiento en diversos conjuntos de datos, y se analizan los resultados obtenidos. La evaluación de los resultados se realiza mediante el uso de la entropía cruzada como función de error, y la precisión como métrica de efectividad. En relación con los resultados de las distintas implementaciones, todas ellas producen los mismos resultados. Esto es consistente con el hecho de que cada implementación se basa en la anterior y le incorpora algún tipo de mejora. Asimismo, se han llevado a cabo diversas pruebas, como fijar los valores iniciales de los pesos, así como los datos de entrada, y la estructura de una red neuronal convolucional (CNN) específica. Con estos tres aspectos establecidos, se ha procedido a realizar la propagación hacia delante de los mismos datos a lo largo de cada CNN (una por cada implementación), observando que todas las implementaciones producen resultados idénticos, tanto en cada capa como en la predicción final. Además, los gradientes calculados para cada parámetro de la red en cada capa también coinciden. En consecuencia, se puede concluir que todas las implementaciones producen resultados equivalentes en términos de entropía cruzada y precisión.

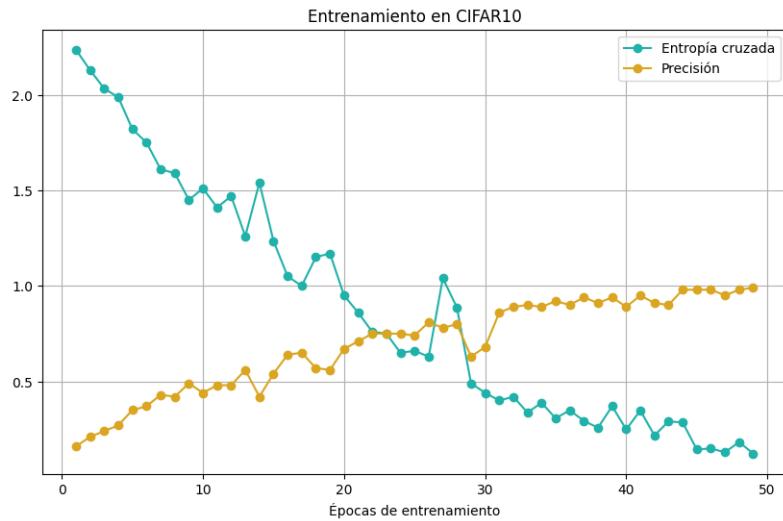


Figura 4.1: Entrenamiento con CIFAR10

En la Figura 4.1, se presentan los resultados obtenidos durante el entrenamiento del **Modelo 1**, utilizando los datos del conjunto **CIFAR10** [83]. En dicha figura, el eje X representa las épocas de entrenamiento, mientras que el eje Y muestra la entropía cruzada o la precisión alcanzada en cada época, correspondientes a las gráficas azul y naranja, respectivamente. Se observa que, a medida que avanza el entrenamiento, la entropía cruzada disminuye progresivamente, mientras que la precisión aumenta. Este comportamiento es coherente con lo discutido en secciones anteriores, y refleja cómo el modelo mejora su capacidad para aprender las relaciones presentes en los datos de entrenamiento, incrementando gradualmente su precisión en las predicciones.

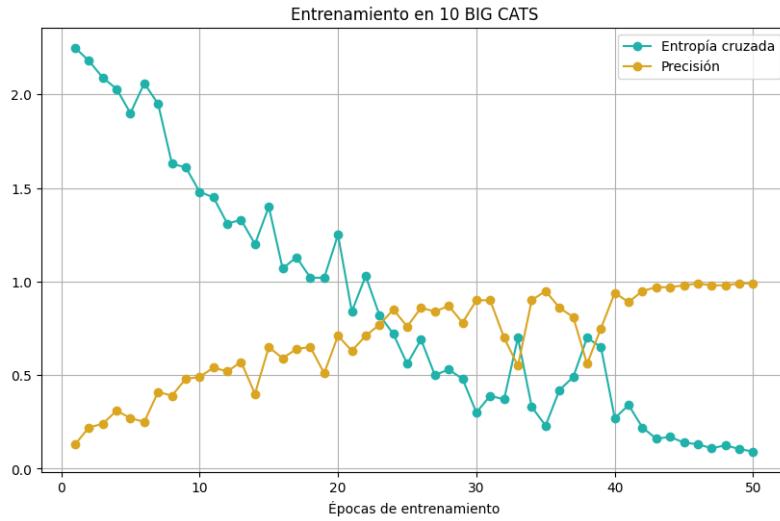


Figura 4.2: Entrenamiento con 10 Big Cats

De manera similar, la Figura 4.2 ilustra los resultados obtenidos durante el proceso de entrenamiento del **Modelo 1**, utilizando los datos del conjunto **10 Big Cats Of The Wild** [84]. En esta figura, se puede observar el rendimiento del modelo a lo largo de las diferentes épocas de entrenamiento, destacándose la evolución tanto de la entropía cruzada como de la precisión a lo largo del tiempo. El comportamiento observado en esta figura proporciona información valiosa sobre la capacidad del modelo para aprender patrones y relaciones específicas dentro de este conjunto de datos, lo cual es fundamental para evaluar su efectividad en tareas de clasificación relacionadas con la base de datos **10 Big Cats**.

4.0.4. Comparación de rendimiento

En esta sección, se compararán las prestaciones de cada implementación. Dado que todas producen los mismos resultados (una vez eliminados factores aleatorios como inicialización de pesos, entre otros), la comparación se centrará en el tiempo de cómputo requerido por cada una.

Se inicia el análisis con las implementaciones que requieren mayor tiempo de cómputo. Es decir, aquellas que emplean exclusivamente CPU, (Secuencial y OpenMP). Posteriormente, el análisis se enfocará en el rendimiento de los sistemas heterogéneos que emplean tanto CPU como GPU (CUDA y cuDNN).

Además, se presentan figuras que facilitan la comprensión de los análisis de rendimiento, junto con una tabla que detalla los tiempos exactos empleados por cada capa de una misma arquitectura, desarrollada en distintas implementaciones.

Implementaciones CPU

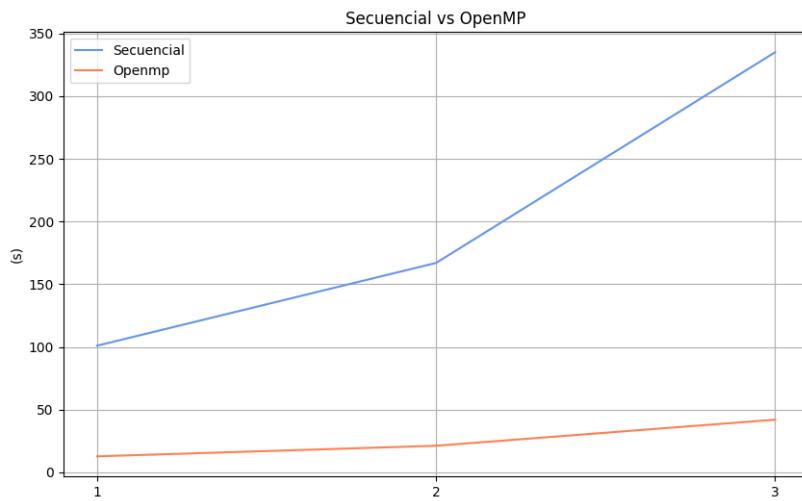


Figura 4.3: Secuencial vs OpenMP

En la Figura 4.3 se presenta una comparación de rendimiento entre la implementación secuencial y la implementación en OpenMP. El eje Y muestra el tiempo requerido en el entrenamiento de una época, mientras que el eje X indica el modelo empleado para dicho entrenamiento. De esta manera, el punto $p_1(100, 0)$ señala que el modelo 0 requiere 101 segundos para entrenar una época con la implementación secuencial, mientras que solo necesita 12.76 segundos con la implementación en OpenMP.

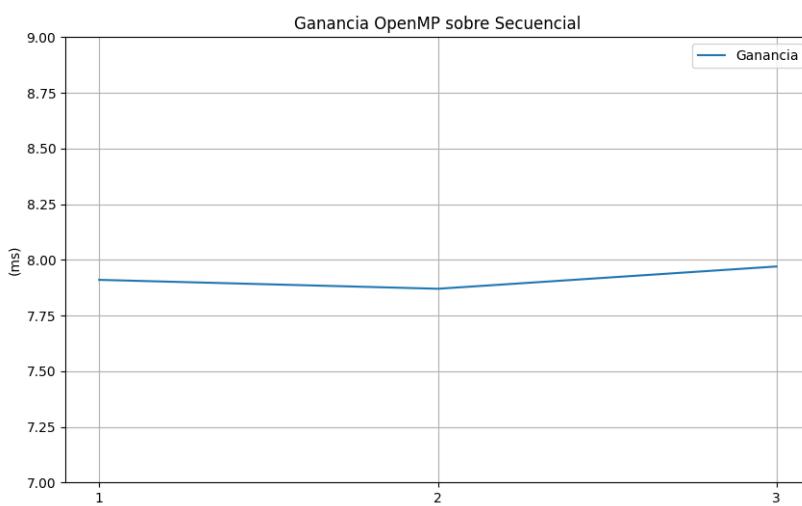


Figura 4.4: Ganancia de OpenMP respecto a secuencial

La implementación utilizando OpenMP está diseñada para explotar el paralelismo a nivel de CPU mediante el uso de 8 hilos. Por lo tanto, se anticipa una mejora de rendimiento cercana a un factor de 8 en comparación con la implementación secuencial, como se muestra en la Figura 4.4.

Implementaciones GPU

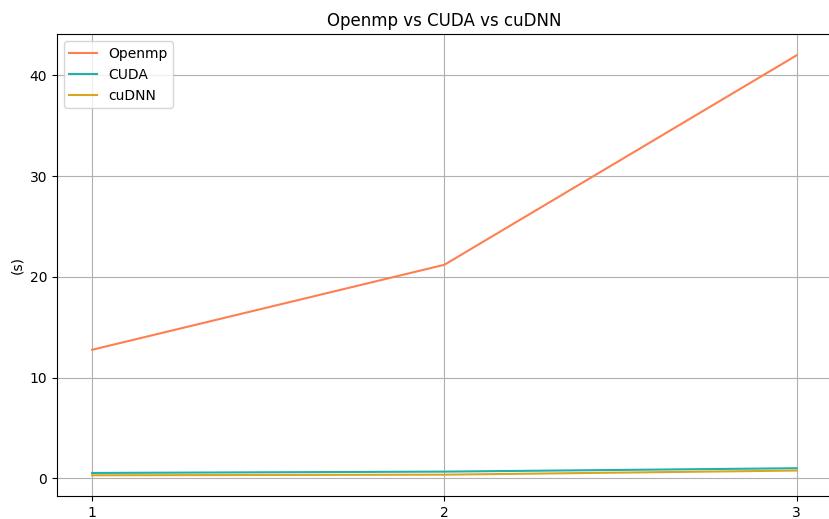


Figura 4.5: OpenMP vs CUDA vs CUDNN

En la Figura 4.5, se utiliza los mismos modelos que se emplearon en las Figuras 4.3 y 4.4. De manera similar a cómo la implementación en OpenMP presenta una mejora notable respecto a la implementación secuencial, también se espera una diferencia significativa entre las implementaciones heterogéneas que combinan CPU y GPU y aquellas que se basan exclusivamente en el uso de CPU, como es el caso de OpenMP. Esta diferencia de rendimiento es particularmente evidente en las Figuras 4.5 y 4.6, donde las variaciones observadas en el rendimiento son incluso más pronunciadas que las reportadas en el apartado anterior.

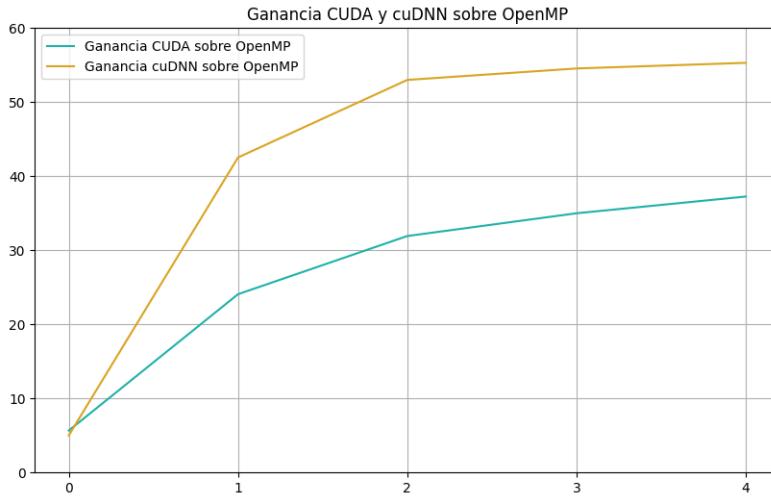


Figura 4.6: Ganancia de CUDA y cuDNN sobre OpenMP

Para comparar las implementaciones en GPU, se han añadido dos modelos adicionales: uno de menor complejidad, **Modelo 0**, y otro de mayor complejidad, **Modelo 4**, en relación con los modelos previamente evaluados. Al igual que en el experimento anterior, estos modelos están dispuestos en las figuras de izquierda a derecha, organizados de menor a mayor complejidad. Este orden tiene como objetivo facilitar la comparación entre las distintas implementaciones en función de la complejidad creciente de los modelos.

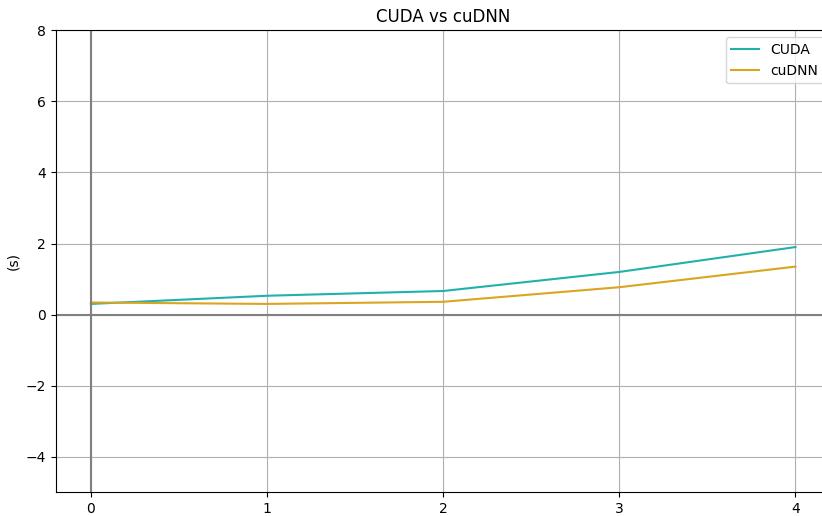


Figura 4.7: CUDA vs CUDNN

Como se ilustra en la Figura 4.7, la implementación CUDA muestra un rendimiento ligeramente superior en modelos menos complejos. Sin embar-

go, a medida que aumenta la complejidad de los modelos, la implementación cuDNN comienza a superar a CUDA. Esta característica distintiva ha llevado a que cuDNN sea utilizada en numerosas librerías de alto nivel y prestigio, como Caffe2, MATLAB, PyTorch y TensorFlow, entre otras.

Operación	CuDNN (ms)	CUDA (ms)
Conv_fwd_0	0.005	0.009
Conv_back_0	0.032	0.044
Pool_fwd_0	0.003	0.005
Pool_back_0	0.01	0.023
<hr/>		
Conv_fwd_1	0.02	0.022
Conv_back_1	0.065	0.16
Pool_fwd_1	0.0029	0.0039
Pool_back_1	0.014	0.025
<hr/>		
Conv_fwd_2	0.023	0.018
Conv_back_2	0.047	0.018
Pool_fwd_2	0.032	0.023
Pool_back_2	0.0057	0.023

Cuadro 4.1: Comparación rendimiento CuDNN vs CUDA

Utilizando el modelo con la mayor complejidad mostrado en la Figura 4.7, **Modelo 4**, se ha generado la Tabla 4.1, la cual detalla el tiempo requerido para llevar a cabo tanto la propagación hacia delante como la retropropagación en cada capa del modelo. En dicha tabla, la notación Conv_fwd_i representa el tiempo de propagación hacia adelante en la capa convolucional i, Conv_back_i denota el tiempo de retropropagación en la capa convolucional i, Pool_fwd_i indica el tiempo de propagación hacia delante en la capa de agrupación máxima i, y Pool_back_0 indica el tiempo de retropropagación en la capa de agrupación máxima i. Se observa en la tabla que, a medida que los datos avanzan a través de las distintas capas de la red neuronal convolucional (CNN), la ventaja inicial que cuDNN tenía sobre CUDA tiende a disminuir. Este comportamiento es coherente con la observación anterior, ya que en cada capa el coste computacional tiende a reducirse, (aunque no siempre es el caso, en el contexto específico de este modelo sí se cumple).

Capítulo 5

Conclusiones y trabajo futuro

Tras la comparación de las distintas implementaciones para redes neuronales convolucionales realizada a lo largo de este proyecto, se concluye que la implementación que utiliza cuDNN es la más eficiente. Aunque todas las implementaciones producen resultados equivalentes y logran el aprendizaje esperado, cuDNN destaca por su capacidad para reducir los tiempos de cómputo en comparación con las demás opciones. Esta eficiencia es una de las razones por las que cuDNN se emplea en numerosas librerías de alto nivel, como TensorFlow o Caffe2, entre otras. Además, se han cumplido los objetivos planteados al inicio del proyecto de manera satisfactoria.

Con respecto al trabajo futuro que se podría realizar, se destacan las siguientes áreas de mejora

- **Optimización de la implementación en CUDA:** Mejora de la implementación en CUDA para reducir la brecha en los tiempos de cómputo en comparación con la implementación que usa cuDNN.
- **Evaluación de librerías de alto nivel:** Realizar implementaciones adicionales de redes neuronales convolucionales utilizando librerías de alto nivel y comparar los resultados con las implementaciones existentes en este proyecto.
- **Investigación de cuDNN a bajo nivel:** Explorar el funcionamiento interno de cuDNN y tratar de optimizarlo en casos específicos para mejorar su rendimiento.
- **Comparación con librerías de alto nivel que emplean cuDNN:** Analizar el rendimiento de cuDNN en comparación con las librerías de alto nivel que lo utilizan como componente subyacente.
- **Desarrollo de sistemas heterogéneos optimizados:** Utilizar librerías de bajo nivel, como cuDNN, para desarrollar sistemas hete-

rogéneos optimizados en algoritmos de aprendizaje profundo más complejos que las redes neuronales convolucionales.

Apéndice A

cuDNN, Principales funciones

A continuación se mencionarán las principales funciones de cuDNN que se han empleado en este proyecto, siendo las responsables tanto de la propagación hacia delante como de la retropropagación en capas convolucionales y de agrupación máxima, entre otras.

cudnnConvolutionForward

Realiza la propagación hacia delante en una capa convolucional.

```
cudnnStatus_t cudnnConvolutionForward(
    cudnnHandle_t                  handle,
    const void                      *alpha,
    const cudnnTensorDescriptor_t   xDesc,
    const void                      *x,
    const cudnnFilterDescriptor_t   wDesc,
    const void                      *w,
    const cudnnConvolutionDescriptor_t convDesc,
    cudnnConvolutionFwdAlgo_t       algo,
    void                            *workSpace,
    size_t                           workSpaceSizeInBytes,
    const void                      *beta,
    const cudnnTensorDescriptor_t   yDesc,
    void                            *y)
```

1. **handle:** Manejador.
2. **alpha, beta:** Punteros a escalares empleados para combinar los resultados con valores anteriores tal que $\text{valor_final} = \text{alpha} * \text{result} + \text{beta} * \text{valor_anterior}$.

3. **xDesc**: Descriptor asociado al tensor de entrada.
4. **x**: Puntero a los datos de entrada en GPU asociados con el descriptor de tensor xDesc.
5. **wDesc**: Descriptor asociado al tensor de pesos.
6. **w**: Puntero a los pesos en GPU asociados con el descriptor de tensor wDesc.
7. **convDesc**: Descriptor de convolución.
8. **algo**: Especifica qué algoritmo de convolución aplicar.
9. **workSpace**: Puntero a un espacio de trabajo en memoria de GPU.
10. **workSpaceSizeInBytes**: Especifica el tamaño en bytes de workSpace.
11. **yDesc**: Descriptor asociado al tensor de salida.
12. **y**: Puntero a los datos de salida en GPU asociados con el descriptor de tensor yDesc.

[70]

cudnnPoolingForward

Se encarga de la propagación hacia delante en una capa de agrupación máxima.

```
cudnnStatus_t cudnnPoolingForward(  
    cudnnHandle_t                  handle,  
    const cudnnPoolingDescriptor_t  poolingDesc,  
    const void                      *alpha,  
    const cudnnTensorDescriptor_t   xDesc,  
    const void                      *x,  
    const void                      *beta,  
    const cudnnTensorDescriptor_t   yDesc,  
    void                           *y)
```

1. **handle**: Manejador.
2. **poolingDesc**: Descriptor de la operación de agrupación.
3. **alpha, beta**: Punteros a escalares empleados para combinar los resultados con valores anteriores tal que $\text{valor_final} = \text{alpha} * \text{result} + \text{beta} * \text{valor_anterior}$.

4. **xDesc:** Descriptor asociado al tensor de entrada.
5. **x:** Puntero a los datos de entrada en GPU asociados con el descriptor de tensor xDesc.
6. **yDesc:** Descriptor asociado al tensor de salida.
7. **y:** Puntero a los datos de salida en GPU asociados con el descriptor de tensor yDesc.

[71]

cudnnPoolingBackward

Realiza la retropropagación en una capa de agrupación máxima.

```
cudnnStatus_t cudnnPoolingBackward(
    cudnnHandle_t                  handle,
    const cudnnPoolingDescriptor_t  poolingDesc,
    const void*                     *alpha,
    const cudnnTensorDescriptor_t   yDesc,
    const void*                     *y,
    const cudnnTensorDescriptor_t   dyDesc,
    const void*                     *dy,
    const cudnnTensorDescriptor_t   xDesc,
    const void*                     *xData,
    const void*                     *beta,
    const cudnnTensorDescriptor_t   dxDesc,
    void*                          *dx)
```

1. **handle:** Manejador.
2. **poolingDesc:** Descriptor de la operación de agrupación.
3. **alpha, beta:** Punteros a escalares empleados para combinar los resultados con valores anteriores tal que $\text{valor_final} = \text{alpha} * \text{result} + \text{beta} * \text{valor_anterior}$.
4. **yDesc:** Descriptor asociado al tensor de salida.
5. **y:** Puntero a los datos de salida en GPU asociados con el descriptor de tensor yDesc.
6. **dyDesc:** Descriptor asociado al tensor que almacena el gradiente de la pérdida respecto a los datos de salida.
7. **dy:** Puntero al gradiente de la pérdida respecto a los datos de salida en GPU asociados con el descriptor de tensor dyDesc.

8. **xDesc**: Descriptor asociado al tensor de entrada.
9. **x**: Puntero a los datos de entrada en GPU asociados con el descriptor de tensor xDesc.
10. **dxDesc**: Descriptor asociado al tensor que almacena el gradiente de la pérdida respecto a los datos de entrada.
11. **dx**: Puntero al gradiente de la pérdida respecto a los datos de entrada en GPU asociados con el descriptor de tensor dxDesc.

[71]

cudnnConvolutionBackwardFilter

Realiza la retropropagación respecto a los pesos en una capa convolucional.

```
cudnnStatus_t cudnnConvolutionBackwardFilter(  
    cudnnHandle_t                  handle,  
    const void                     *alpha,  
    const cudnnTensorDescriptor_t   xDesc,  
    const void                     *x,  
    const cudnnTensorDescriptor_t   dyDesc,  
    const void                     *dy,  
    const cudnnConvolutionDescriptor_t convDesc,  
    cudnnConvolutionBwdFilterAlgo_t algo,  
    void                           *workSpace,  
    size_t                          workSpaceSizeInBytes,  
    const void                     *beta,  
    const cudnnFilterDescriptor_t   dwDesc,  
    void                           *dw)
```

1. **handle**: Manejador.
2. **alpha, beta**: Punteros a escalares empleados para combinar los resultados con valores anteriores tal que $\text{valor_final} = \text{alpha} * \text{result} + \text{beta} * \text{valor_anterior}$.
3. **xDesc**: Descriptor asociado al tensor de entrada.
4. **x**: Puntero a los datos de entrada en GPU asociados con el descriptor de tensor xDesc.
5. **dyDesc**: Descriptor asociado al tensor que almacena el gradiente de la pérdida respecto a los datos de salida.

6. **dy**: Puntero al gradiente de la pérdida respecto a los datos de salida en GPU asociados con el descriptor de tensor dyDesc.
7. **convDesc**: Descriptor de convolución.
8. **algo**: Especifica qué algoritmo de convolución aplicar.
9. **workSpace**: Puntero a un espacio de trabajo en memoria de GPU.
10. **workSpaceSizeInBytes**: Especifica el tamaño en bytes de workSpace.
11. **dwDesc**: Descriptor del tensor asociado al gradiente de la pérdida respecto a los pesos.
12. **dw**: Puntero al gradiente de los pesos en GPU asociados con el descriptor de tensor dwDesc.

[72]

cudnnConvolutionBackwardData

Realiza la retropropagación respecto a los datos de entrada en una capa convolucional.

```
cudnnStatus_t cudnnConvolutionBackwardData(
    cudnnHandle_t                      handle,
    const void*                         *alpha,
    const cudnnFilterDescriptor_t       wDesc,
    const void*                         *w,
    const cudnnTensorDescriptor_t       dyDesc,
    const void*                         *dy,
    const cudnnConvolutionDescriptor_t convDesc,
    cudnnConvolutionBwdDataAlgo_t      algo,
    void*                               *workSpace,
    size_t                             workSpaceSizeInBytes,
    const void*                         *beta,
    const cudnnTensorDescriptor_t       dxDesc,
    void*                               *dx)
```

1. **handle**: Manejador.
2. **alpha, beta**: Punteros a escalares empleados para combinar los resultados con valores anteriores tal que $\text{valor_final} = \text{alpha} * \text{result} + \text{beta} * \text{valor_anterior}$.
3. **wDesc**: Descriptor asociado al tensor de pesos.

4. **w**: Puntero a los pesos en GPU asociados con el descriptor de tensor wDesc.
5. **dyDesc**: Descriptor asociado al tensor que almacena el gradiente de la pérdida respecto a los datos de salida.
6. **dy**: Puntero al gradiente de la pérdida respecto a los datos de salida en GPU asociados con el descriptor de tensor dyDesc.
7. **convDesc**: Descriptor de convolución.
8. **algo**: Especifica qué algoritmo de convolución aplicar.
9. **workSpace**: Puntero a un espacio de trabajo en memoria de GPU.
10. **workSpaceSizeInBytes**: Especifica el tamaño en bytes de workSpace.
11. **dxDesc**: Descriptor asociado al tensor que almacena el gradiente de la pérdida respecto a los datos de entrada.
12. **dx**: Puntero al gradiente de la pérdida respecto a los datos de entrada en GPU asociados con el descriptor de tensor dxDesc.

[73]

Apéndice B

Planificación detallada

Para el desarrollo de este proyecto, se ha requerido llevar a cabo una serie de tareas con diferentes dificultades e importancias. A continuación, se muestra una planificación general del mismo en la tabla B.1, junto con las fases que componen su desarrollo, y una planificación temporal de cada apartado por separado. Cabe destacar que, cada apartado, se basa en los conocimientos adquiridos en los apartados anteriores, a la vez que introduce conceptos nuevos y mejora las prestaciones del modelo. De esta manera, cada apartado supondrá retos nuevos nunca antes vistos y, si un apartado anterior presenta algún fallo desconocido en el momento, se deberá volver a la etapa anterior y arreglarlo. Tras solventarlo, se podrá proseguir con la etapa posterior. Además, dada la naturaleza de ‘caja oscura’ de las redes neuronales, estas presentan cierta dificultad a la hora de depurar el código. Por tanto, esto supondrá un tiempo de depuración considerable en todas y cada una de las implementaciones, tal y como se mostrará a continuación.

- **Estudio previo:** Consiste en el estudio y comprensión de cuestiones generales, dentro del campo de aprendizaje automático y visión por computador, comunes a redes neuronales totalmente conectadas, y redes neuronales convolucionales.
 - Investigación, comprensión y selección de funciones de activación a emplear (4 horas)
 - Investigación y comprensión sobre el algoritmo del descenso del gradiente (3 horas)
 - Investigación y comprensión sobre el entrenamiento una red neuronal (2 horas)
 - Investigación y comprensión de sistemas heterogéneos y sistemas homogéneos (3 horas)
 - Investigación y comprensión de sistemas heterogéneos aplicados a CNNs (4 horas)

- **Investigación y desarrollo de redes neuronales totalmente conectadas:** En este periodo, me centré en la investigación y comprensión sobre las redes neuronales totalmente conectadas a bajo nivel. De esta manera, sabía que podría generar cualquier tipo de red totalmente conectada de manera dinámica, sin necesidad de realizar ningún tipo de cálculo posterior, independientemente del lenguaje de programación empleado, así como del uso o no de librerías que faciliten el proceso.
 - Investigación y desarrollo teórico de la retropropagación en una red totalmente conectada con 1 capa oculta (40 horas)
 - Investigación y desarrollo teórico de la retropropagación en una red totalmente conectada con 2 capas ocultas (9 horas)
 - Desarrollo teórico de la retropropagación en una red totalmente conectada con N capas ocultas (5 horas)
 - Investigación y desarrollo teórico sobre la retropropagación en una capa SoftMax (7 horas)
 - Implementación en C++ sobre la retropropagación en una capa softmax (8 horas)
 - Investigación y desarrollo del algoritmo del descenso del gradiente en una red totalmente conectada en C++ (2 horas)
 - Investigación sobre distintas inicializaciones de pesos e implementación de la inicialización de pesos HE (2 horas)
 - Realización de pruebas prácticas de funcionamiento con distintas bases de datos y arquitecturas de modelos (10 horas)
 - Implementación en C++ sobre cuestiones generales de una red neuronal totalmente conectada como entrenamiento, lectura de imágenes, creación, gestión y actualización de pesos y sesgos, evaluación del modelo sobre un conjunto de datos, creación de estructura general, etc (60 horas).
- **Investigación y desarrollo de redes neuronales convolucionales:** Una vez familiarizado con redes neuronales totalmente conectadas, se trató de comprender de igual forma las redes neuronales convolucionales, pues se encuentran ampliamente relacionadas.
 - Investigación y desarrollo teórico de la propagación hacia delante en una capa convolucional de una red neuronal convolucional (5 horas)
 - Investigación y desarrollo teórico de la retropropagación en una capa convolucional con y sin relleno en una red neuronal convolucional (21 horas)
 - Investigación y desarrollo teórico sobre el relleno en una red neuronal convolucional (12 horas)

- Desarrollo de conclusiones teóricas con respecto a retropropagación en capa convolucional con y sin relleno (4 horas)
 - Investigación y desarrollo teórico sobre una capa de agrupación máxima en una red neuronal convolucional (8 horas)
 - Investigación y desarrollo teórico sobre una capa de aplanado en una red neuronal convolucional (1 hora)
 - Implementación en C++ sobre la propagación hacia delante en una capa convolucional de una red neuronal convolucional (8 horas).
 - Implementación en C++ sobre la retropropagación en una capa convolucional de una red neuronal convolucional (12 horas).
 - Implementación en C++ sobre la propagación hacia delante en una capa de agrupación máxima de una red neuronal convolucional (4 horas).
 - Implementación en C++ sobre la retropropagación en una capa de agrupación máxima de una red neuronal convolucional (6 horas).
 - Implementación en C++ sobre una capa de aplanado de una red neuronal convolucional (1 hora).
 - Implementación en C++ sobre cuestiones generales de una CNN como entrenamiento, lectura de imágenes, evaluación del modelo sobre un conjunto de datos, creación de estructura general, etc (70 horas).
- **Investigación y desarrollo de sistemas homogéneos con OpenMP:** Una vez, comprendido el funcionamiento tanto de las redes neuronales totalmente conectadas, como de las redes neuronales convolucionales, me centré en reducir los tiempos de cómputo requeridos en ellas, mediante un paralelismo orientado a datos con OpenMP, (se analizará en detalle en secciones posteriores).
- Investigación sobre tipos de paralelismo con OpenMP orientados tanto a redes neuronales totalmente conectadas como a redes neuronales convolucionales (4 horas)
 - Investigación y desarrollo teórico sobre paralelismo a nivel de datos con OpenMP en el algoritmo del descenso del gradiente (3 horas).
 - Implementación en C++ y OpenMP sobre el algoritmo del descenso del gradiente en la red neuronal totalmente conectada (10 horas).
 - Implementación en C++ y OpenMP sobre el algoritmo del descenso del gradiente en la red neuronal convolucional (30 horas).

- Implementación en C++ y OpenMP sobre aspectos generales de una red neuronal totalmente conectada (20 horas).
 - Implementación en C++ y OpenMP sobre cuestiones generales de una red neuronal convolucional (30 horas).
 - Realización de pruebas finales para verificar un correcto entrenamiento y aprendizaje (6 horas)
- **Investigación y desarrollo de sistemas heterogéneos con CUDA y cuDNN:** Con el conocimiento teórico y práctico ya adquirido sobre sistemas homogéneos, aplicados tanto a redes neuronales totalmente conectadas como a redes neuronales convolucionales, se avanza ahora hacia la exploración de sistemas heterogéneos, aplicados a estas mismas arquitecturas de redes neuronales.
 - Investigación y desarrollo teórico sobre la propagación hacia delante y retropropagación en una capa convolucional como GEMM (8 horas)
 - Investigación y desarrollo teórico sobre la propagación hacia delante y retropropagación en una capa de agrupación máxima con CUDA (5 horas)
 - Investigación y comprensión de la librería cuBLAS (5 horas)
 - Implementación en C++ sobre la propagación hacia delante en una capa convolucional como GEMM con cuBLAS (6 horas)
 - Implementación en C++ sobre la retropropagación en una capa convolucional como GEMM con cuBLAS (26 horas)
 - Investigación y desarrollo teórico y práctico sobre el algoritmo de multiplicación matricial con CUDA empleado (30 horas)
 - Implementación en C++ y CUDA sobre la capa de agrupación máxima con CUDA (14 horas)
 - Investigación y desarrollo teórico y práctico sobre la capa totalmente conectada como GEMM (31 horas)
 - Investigación y desarrollo teórico sobre el consumo de memoria con GEMM (5 horas)
 - Implementación de aspectos generales de una red neuronal convolucional con CUDA (71 horas).
 - Sustitución de la clase Vector de la STL en todo el proyecto por punteros necesarios para emplear CUDA (30 horas).
 - Investigación teórica y adaptación práctica de la implementación con CUDA a cuDNN (51 horas).

Apartado	Tiempo (Horas)
Estudio previo	16
Investigación y desarrollo de redes neuronales totalmente conectadas	143
Investigación y desarrollo de redes neuronales convolucionales	152
Investigación y desarrollo de sistemas homogéneos con OpenMP	103
Investigación y desarrollo de sistemas heterogéneos con CUDA y cuDNN	282
Tiempo total:	696

Cuadro B.1: Planificación del proyecto

Apéndice C

Retropropagación en capa SoftMax

Tal y como se comentó en secciones anteriores, se empleará SoftMax en la última capa totalmente conectada. De este modo, se definen los valores de entrada a la misma como Z , y los de salida como O , tal y como se muestra en la Figura C.1.

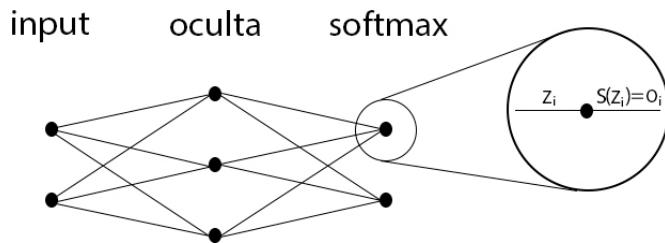


Figura C.1: Estructura de una red totalmente conectada con softmax en la última capa

$$E = - \sum_{i=1}^N [y_i * \ln(O_i)] \quad (\text{C.1})$$

Según esta notación, la función de error 2.3 se convierte en la fórmula C.1.

C.1. Cálculo del gradiente de la función de error

Para comenzar la retropropagación, empezaremos por calcular el gradiente de la función de pérdida con respecto a cada parámetro de entrada

de la capa en la cual se aplicó SoftMax, esto se muestra en la fórmula C.2.

$$\frac{\partial E}{\partial Z_k} = \frac{\partial(-\sum_{i=1}^H [y_i * \ln(O_i)])}{\partial Z_k} = -\sum_{i=1}^H \left[\frac{\partial(y_i * \ln(O_i))}{\partial Z_k} \right] \quad (\text{C.2})$$

Como y_i (etiqueta real), es independiente con respecto a Z_k (neurona artificial de entrada), en la fórmula C.2, esta se trata como una constante.

$$\frac{\partial E}{\partial Z_k} = -\sum_{i=1}^H \left[y_i * \frac{\partial(\ln(O_i))}{\partial Z_k} \right]$$

Por simplificar los cálculos y eliminar el logaritmo de la ecuación, se aplica la regla de la cadena, y, como resultado, se obtienen las fórmulas C.3 y C.4.

$$\frac{\partial E}{\partial Z_k} = -\sum_{i=1}^H \left[y_i * \frac{\partial(\ln(O_i))}{\partial O_i} * \frac{\partial O_i}{\partial Z_k} \right] \quad (\text{C.3})$$

$$\frac{\partial E}{\partial Z_k} = -\sum_{i=1}^H \left[\frac{y_i}{O_i} * \frac{\partial O_i}{\partial Z_k} \right] \quad (\text{C.4})$$

C.2. Derivada de softmax con respecto a su entra- da, $\frac{\partial O_i}{\partial Z_k}$

Una vez obtenida la fórmula C.4, nos disponemos a calcular la derivada de O_i con respecto a Z_i .

Sin embargo, hay que contemplar 2 casos posibles, siendo estos $\frac{\partial S(Z_i)}{\partial Z_i}$ y $\frac{\partial S(Z_i)}{\partial Z_j}$, donde $i \neq j$.

C.3. Caso $\frac{\partial S(Z_i)}{\partial Z_i}$

$$\frac{\partial f(x)}{\partial g(x)} = \frac{f'(x) * g(x) - g'(x) * f(x)}{g(x)^2} \quad (\text{C.5})$$

$$S(z_i) = \frac{e^{Z_i}}{e^{Z_1} + \dots + e^{Z_H}}$$

$$\frac{\partial S(Z_1)}{\partial Z_1} = \frac{[\frac{\partial e^{Z_1}}{\partial Z_1} * (e^{Z_1} + \dots + e^{Z_H})] - [\frac{\partial(e^{Z_1} + \dots + e^{Z_H})}{\partial Z_1} * e^{Z_1}]}{(e^{Z_1} + \dots + e^{Z_H})^2}$$

Se aplica $\frac{\partial e^{Z_1}}{\partial Z_1} = e^{Z_1}$

$$\frac{\partial S(Z_1)}{\partial Z_1} = \frac{[e^{Z_1} * \sum_{i=1}^H e^{Z_i}] - [e^{Z_1} * e^{Z_1}]}{(\sum_{i=1}^H e^{Z_i})^2} \quad (\text{C.6})$$

Se saca factor común e^{Z_1}

$$\begin{aligned} \frac{\partial S(Z_1)}{\partial Z_1} &= \frac{e^{Z_1}([\sum_{i=1}^H e^{Z_i}] - e^{Z_1})}{(\sum_{i=1}^H e^{Z_i})^2} \\ \frac{\partial S(Z_1)}{\partial Z_1} &= \frac{e^{Z_1}}{\sum_{i=1}^H e^{Z_i}} * \frac{[\sum_{i=1}^H e^{Z_i}] - e^{Z_1}}{\sum_{i=1}^H e^{Z_i}} \end{aligned}$$

Se recuerda que $\frac{\sum_{i=1}^H e^{Z_i}}{\sum_{i=1}^H e^{Z_i}} = 1$ y que $S(Z_1) = \frac{e^{Z_1}}{\sum_{i=1}^H e^{Z_i}}$

$$\frac{\partial S(Z_1)}{\partial Z_1} = S(Z_1) * (1 - S(Z_1)) \quad (\text{C.7})$$

C.3.1. Caso $\frac{\partial S(Z_i)}{\partial Z_j}$, con $i \neq j$

$$\begin{aligned} \frac{\partial S(Z_2)}{\partial Z_1} &= \frac{[\frac{\partial e^{Z_2}}{\partial Z_1} * (e^{Z_1} + \dots + e^{Z_H})] - [\frac{\partial(e^{Z_1} + \dots + e^{Z_H})}{\partial Z_1} * e^{Z_2}]}{(e^{Z_1} + \dots + e^{Z_H})^2} \\ \frac{\partial S(Z_2)}{\partial Z_1} &= \frac{[0 * [\sum_{i=1}^H e^{Z_i}]] - [e^{Z_1} * e^{Z_2}]}{(\sum_{i=1}^H e^{Z_i})^2} \\ \frac{\partial S(Z_2)}{\partial Z_1} &= \frac{-e^{Z_1} * e^{Z_2}}{(\sum_{i=1}^H e^{Z_i})^2} \\ \frac{\partial S(Z_2)}{\partial Z_1} &= \frac{-e^{Z_1}}{\sum_{i=1}^H e^{Z_i}} * \frac{e^{Z_2}}{\sum_{i=1}^H e^{Z_i}} \\ \frac{\partial S(Z_2)}{\partial Z_1} &= -S(Z_1) * S(Z_2) \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

C.4. Combinación de casos

De esta forma, tendremos que dividir el proceso en 2 partes, cuando i sea igual a j, y cuando $i \neq j$.

Como todos los casos menos uno pertenecen al caso $i \neq k$, en la fórmula C.9 se aprecia como la “parte izquierda” hace referencia al caso $i \neq k$, mientras que la “parte derecha” a $i = k$.

Retomamos la fórmula C.4, aplicando C.8 en la parte izquierda, y C.7 en la derecha.

$$\frac{\partial E}{\partial Z_k} = -\left[\sum_{i=k}^H \left[\frac{y_i}{O_i} * -O_i * O_k \right] + \frac{y_k}{O_k} * O_k * (1 - O_k) \right] \quad (\text{C.9})$$

Una vez obtenida la fórmula C.9, se simplifica O_i en la parte izquierda y O_k en la derecha.

$$\frac{\partial E}{\partial Z_k} = -\left[\sum_{i=k}^H \left[-y_i * O_k \right] + \left[y_k * (1 - O_k) \right] \right] \quad (\text{C.10})$$

Se extrae O_k de la suma en la fórmula C.10, pues es independiente con respecto al índice i y se obtiene la fórmula C.11.

$$\frac{\partial E}{\partial Z_k} = -\left[-O_k \sum_{i=k}^H \left[-y_i \right] + \left[y_k * (1 - O_k) \right] \right] \quad (\text{C.11})$$

C.5. Simplificación One-Hot

Al emplear la codificación one-hot en Y , se sabe que la suma de sus elementos es igual a 1, pues para un ejemplo de entrada $x_i \in X$, su etiqueta asociada $y_i \in Y$ presenta todos sus valores iguales a 0 menos uno de ellos con el valor de 1.

Con estos datos, se calculan las fórmulas C.12 y C.13.

$$\sum_{i=1}^H y_i = 1 \quad (\text{C.12})$$

$$\sum_{i=k}^H y_i = \sum_{i=1}^H [y_i] - y_k = 1 - y_k \quad (\text{C.13})$$

Una vez obtenidas dichas fórmulas, se emplea C.13 para simplificar la suma anterior obtenida en C.11, y, como resultado, se obtienen las fórmulas C.14 y C.15.

$$\frac{\partial E}{\partial Z_k} = [O_k * (1 - y_k)] - [y_k * (1 - O_k)] \quad (\text{C.14})$$

$$\frac{\partial E}{\partial Z_k} = O_k - O_k * y_k - y_k + O_k * y_k \quad (\text{C.15})$$

Por último, en la fórmula C.15, se simplifica $O_k * y_k$, y se obtiene la fórmula final C.16 [54] [55].

$$\frac{\partial E}{\partial Z_k} = O_k - y_k = \text{gradiente_}Z_k \quad (\text{C.16})$$

Apéndice D

Retropropagación en redes neuronales totalmente conectadas

En esta sección, se analizará en profundidad el cálculo del gradiente de la pérdida con respecto a cada parámetro entrenable de una red totalmente conectada, así como con respecto a la entrada y salida de cada capa. Primero, se presentarán los cálculos para ejemplos concretos, y, una vez comprendidas las bases, se mostrará cómo aplicarlos a cualquier tipo de red totalmente conectada.

D.1. Retropropagación con 1 capa oculta [2] [3]

En esta sección, se tratará de calcular el gradiente de la pérdida con respecto a cada parámetro de la red totalmente conectada, mostrada en la Figura D.1. Para no repetir cálculos, en esta y secciones posteriores, no se volverá a calcular la retropropagación a través de la capa SoftMax, pues los cálculos son siempre los mismos por ser la última capa de la arquitectura.

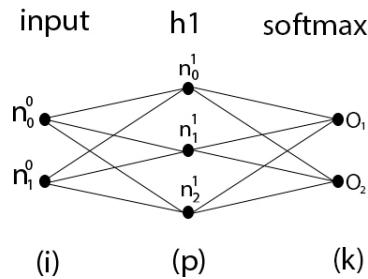


Figura D.1: Red Neuronal totalmente conectada con 1 capa oculta

La Figura D.1 se compone de 'puntos' interconectados mediante líneas,

representando estos neuronas y pesos que las conectan respectivamente. Cada punto corresponde a una neurona, y cada línea a un peso.

La Figura D.1 presenta 3 capas (input, h_1 , softmax), que corresponden a la capa de entrada, la capa oculta h_1 , y la capa de salida, respectivamente. El superíndice indica la capa a la que pertenece una neurona o peso, mientras que el subíndice indica el número del mismo en su respectiva capa. En el caso de los pesos, se requieren 2 subíndices para identificar a cada uno, (cada peso une 2 neuronas).

De esta manera, la capa de entrada se compone de 2 neuronas (n_0^0 y n_1^0), la capa oculta h_1 tiene 3 neuronas (n_0^1 , n_1^1 , y n_2^1), y el peso W_{jk}^i referencia al peso que une las neuronas n_j^i y n_k^{i+1} .

De forma adicional, se recuerda que Z_i representa la entrada i de la capa SoftMax, y, O_i , su salida.

D.1.1. Capa SoftMax

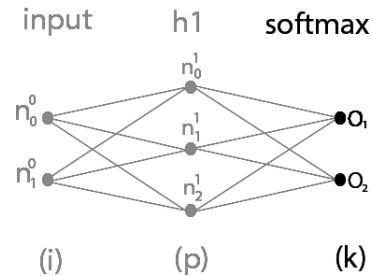


Figura D.2: Retropropagación en la capa softmax

Sea la neurona n_j^i , se define como a_j^i el valor de dicha neurona antes de aplicar sobre ella su función de activación asociada, y, z_j^i , el obtenido tras aplicarla.

Tal y como se calculó previamente, el gradiente de la función de pérdida con respecto a cada Z_i viene dado por la fórmula 2.10.

D.1.2. Pesos capas h1-SoftMax

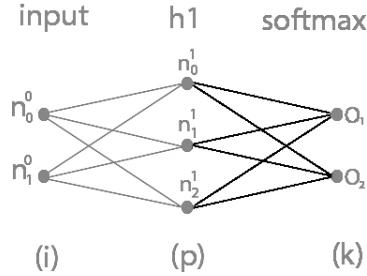


Figura D.3: Retropropagación con respecto a pesos entre la capa oculta y la capa SoftMax

Una vez obtenido el gradiente hasta la entrada de la capa softmax, se puede calcular el gradiente con respecto a cada peso W_{pk}^1 , pues se encuentra conectado a esta desde la capa anterior. Es decir, para cada $n_p^1 \in h_1$, se calcula $\frac{dE(x)}{dW_{pk}^1}$. Usando la regla de la cadena, equivale a realizar lo ilustrado en las fórmulas D.1 y D.2.

$$\frac{\partial Z_k}{\partial W_{pk}^1} = \frac{\partial(z_p^1 * W_{pk}^1 + b_k^2)}{\partial W_{pk}^1} = z_p^1 \quad (\text{D.1})$$

$$\frac{\partial E(x)}{\partial W_{pk}^1} = \text{gradiente_}Z_k * \frac{\partial Z_k}{\partial W_{pk}^1} = \text{gradiente_}Z_k * z_p^1 \quad (\text{D.2})$$

D.1.3. Sesgos capa softmax

Del mismo modo, se calcula el gradiente de la pérdida con respecto a cada sesgo de las neuronas de la capa softmax, tal y como se muestra en las fórmulas D.3, D.4 y D.5.

$$\frac{\partial E}{\partial b_k^2} = \frac{\partial E}{\partial Z_k} * \frac{\partial Z_k}{\partial b_k^2} \quad (\text{D.3})$$

$$\frac{\partial Z_k}{\partial b_k^2} = \frac{\partial([\sum_{c=1}^P z_c^1 * W_{pk}^1] + b_k^2)}{\partial b_k^2} = 1 \quad (\text{D.4})$$

$$\frac{\partial E}{\partial b_k^2} = \text{gradiente_}Z_k \quad (\text{D.5})$$

D.1.4. Capa oculta h1

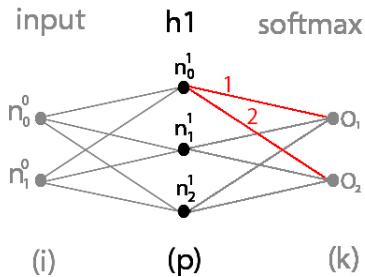


Figura D.4: Imagen de los 'caminos' desde la capa softmax hasta la neurona n_p^1

En la figura D.4, se muestra como hay más de un 'camino' desde la capa softmax hasta la neurona n_p^1 . Por lo tanto, para obtener el gradiente de la pérdida con respecto a n_p^1 , es necesario calcular la suma de todos los 'caminos' hacia este, tal y como se presenta en las fórmulas D.6 y D.7.

$$\frac{\partial E_{total}}{\partial a_p^1} = \sum_{k=1}^K \frac{\partial E_k}{\partial a_p^1} = \sum_{k=1}^K \text{gradiente}_Z k * \frac{\partial Z_k}{\partial z_p^1} * \frac{\partial z_p^1}{\partial a_p^1} \quad (\text{D.6})$$

$$\frac{\partial Z_k}{\partial z_p^1} = \frac{\partial([\sum_{c=1}^P z_c^1 * W_{ck}^1] + b_k^2)}{\partial z_p^1} = W_{pk}^1 \quad (\text{D.7})$$

Para calcular dichos gradientes, se requiere calcular $\frac{\partial z_p^1}{\partial a_p^1}$. Como se mencionó anteriormente, “a”, se refiere al valor de una neurona antes de aplicar su función de activación asociada, y, “z”, al valor obtenido tras su aplicación. Por lo tanto, para calcular $\frac{\partial z_p^1}{\partial a_p^1}$, se requiere conocer dicha función de activación.

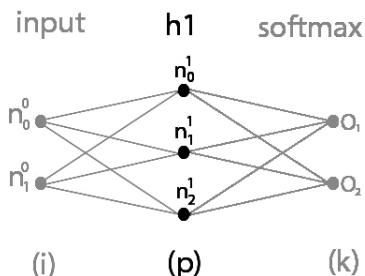


Figura D.5: Retropropagación con respecto a neuronas de la capa oculta h1

En este ejemplo, en la capa oculta h1 se emplea la función de activación sigmoide, y su derivada viene dada por las fórmulas D.8 y D.9.

$$sigmoide(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (D.8)$$

$$sigmoide'(x) = \frac{sigmoide(x)}{1 - sigmoide(x)} \quad (D.9)$$

De este modo, ahora sí se puede calcular $\frac{\partial z_p^1}{\partial a_p^1}$, y se muestra en la fórmula D.10.

$$\frac{\partial z_p^1}{\partial a_p^1} = \frac{\partial sigmoide(a_p^1)}{\partial a_p^1} = sigmoide(a_p^1) * (1 - sigmoide(a_p^1)) \quad (D.10)$$

Así, se retoma la fórmula D.6 mediante la aplicación de D.7 y D.10, y se obtiene D.11.

$$\frac{\partial E_{total}}{\partial a_p^1} = \sum_{k=1}^K gradiente_Z_k * W_{pk}^1 * sigmoide(a_p^1) * (1 - sigmoide(a_p^1)) \quad (D.11)$$

$$\frac{\partial E_{total}}{\partial a_p^1} = gradiente_h1_p$$

D.1.5. Pesos capas entrada-h1

Una vez realizada la retropropagación hasta las neuronas de entrada de la capa oculta h1, se puede continuar con el proceso hacia la capa anterior, es decir, la capa de entrada.

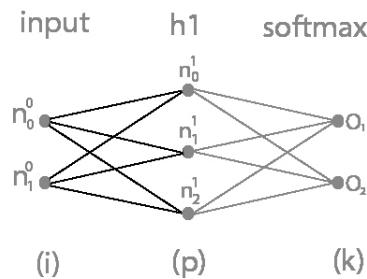


Figura D.6: Retropropagación con respecto a los pesos entre la capa de entrada y la capa oculta h1

$$\frac{\partial a_p^1}{\partial W_{ip}^0} = \frac{\partial [\sum_{c=1}^I z_c^0 * W_{cp}^0 + b_p^1]}{\partial W_{ip}^0} = z_i^0 \quad (\text{D.12})$$

$$\frac{\partial E}{\partial W_{ip}^0} = \frac{\partial E_{total}}{\partial a_p^1} * \frac{\partial a_p^1}{\partial W_{ip}^0} \quad (\text{D.13})$$

$$\frac{\partial E(x)}{\partial W_{ip}^0} = \text{gradiente_}h1_p * \frac{\partial a_p^1}{\partial W_{ip}^0} = \text{gradiente_}h1_p * z_i^0 \quad (\text{D.14})$$

De manera similar a como se calcularon los gradientes de la pérdida con respecto a los pesos entre la capa oculta h_1 y la capa softmax, se calcula el gradiente de la pérdida con respecto a los pesos entre la capa de entrada y la capa oculta h_1 . Este proceso se detalla en las fórmulas D.12, D.13, y D.14.

D.1.6. Sesgos capa h_1

$$\frac{\partial E}{\partial b_p^1} = \frac{\partial E_{total}}{\partial a_p^1} * \frac{\partial a_p^1}{\partial b_p^1} \quad (\text{D.15})$$

$$\frac{\partial a_p^1}{\partial b_p^1} = \frac{\partial ([\sum_{c=1}^I z_c^0 * W_{ip}^0 + b_p^1])}{\partial b_p^1} = 1 \quad (\text{D.16})$$

$$\frac{\partial E}{\partial b_p^1} = \text{gradiente_}h1_p \quad (\text{D.17})$$

De manera similar, las figuras D.15, D.16, y D.17 ilustran el cálculo del gradiente con respecto a los sesgos de la capa oculta h_1 .

D.1.7. Capa de entrada

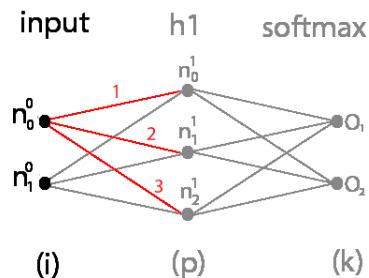


Figura D.7: Imagen de los 'caminos' desde la capa oculta h_1 hasta n_0^0

Por último, en esta sección se calcula el gradiente con respecto a las neuronas de entrada de la capa de entrada. Aunque, en general, no sería

necesario calcular estos gradientes, dado que el objetivo es construir una red neuronal convolucional (CNN), es imprescindible hacerlo. Esto se debe a que la red totalmente conectada estará integrada con capas convolucionales y de agrupación máxima, por lo que es necesario calcular estos gradientes para poder continuar con el proceso de retropropagación en las capas anteriores a esta.

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_{total}}{\partial a_i^0} &= \sum_{p=1}^P \frac{\partial E_{total}}{\partial a_p^1} * \frac{\partial a_p^1}{\partial z_i^0} * \frac{\partial z_i^0}{\partial a_i^0} \\ \frac{\partial a_p^1}{\partial z_i^0} &= \frac{\partial([\sum_{c=1}^I z_c^0 * W_{ip}^0] + b_p^1)}{\partial z_i^0} = W_{ip}^0 \end{aligned} \quad (\text{D.18})$$

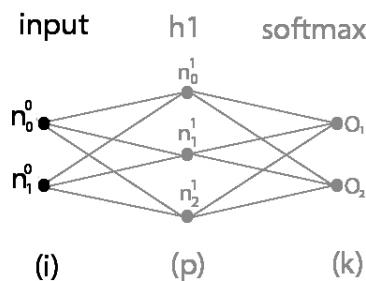


Figura D.8: Retropropagación en la capa input

Como la capa input no presenta ninguna función de activación asociada, se tiene que z_i^0 es igual a_i^0 .

$$\frac{\partial z_i^0}{\partial a_i^0} = 1 \quad (\text{D.19})$$

$$\frac{\partial E_{total}}{\partial a_i^0} = \sum_{p=1}^P \text{gradiente_h1}_p \quad (\text{D.20})$$

D.2. Retropropagación con 2 capas ocultas

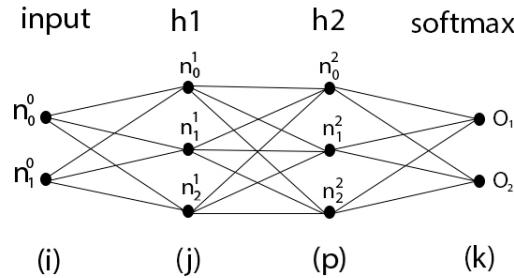


Figura D.9: Red Neuronal totalmente conectada con 2 capas ocultas

A diferencia del apartado anterior, en este caso se utiliza una red totalmente conectada con 2 capas ocultas (h1 y h2), tal y como se muestra en la Figura D.9.

D.2.1. Capa SoftMax

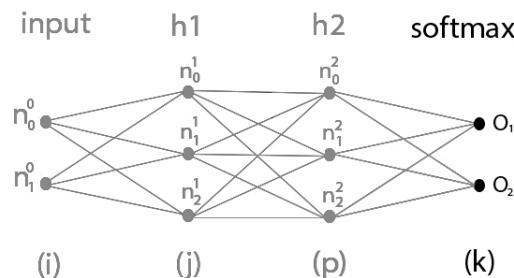


Figura D.10: Retropropagación en la capa softmax

De manera similar a los casos anteriores, el gradiente de la función de pérdida con respecto a cada Z_i , se determina mediante la fórmula 2.10. En consecuencia, no se repetirá el cálculo.

D.2.2. Pesos capas h2-SoftMax

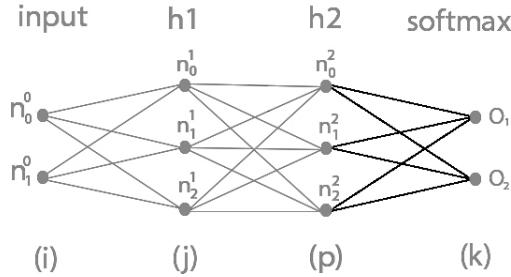


Figura D.11: Retropropagación respecto a los pesos entre la capa oculta h2 y la capa SoftMax

Se lleva a cabo el cálculo del gradiente de la función de pérdida con respecto a cada peso W_{pk}^2 que conecta las neuronas de la capa oculta h2 con las de la capa softmax (véase la figura D.11).

$$\frac{\partial Z_k}{\partial W_{pk}^2} = \frac{\partial(z_p^2 * W_{pk}^2 + b_k^3)}{\partial W_{pk}^2} = z_p^2 \quad (\text{D.21})$$

$$\frac{\partial E(x)}{\partial W_{pk}^2} = \text{gradiente_}Z_k * \frac{\partial Z_k}{\partial W_{pk}^2} = \text{gradiente_}Z_k * z_p^2 \quad (\text{D.22})$$

Como era de esperar, las fórmulas D.21 y D.22 son prácticamente idénticas a las fórmulas D.1 y D.2, respectivamente, con la única diferencia del superíndice empleado ($1 \neq 2$). Esto resulta lógico, ya que esta parte del cálculo es también común al apartado anterior.

D.2.3. Sesgos capa softmax

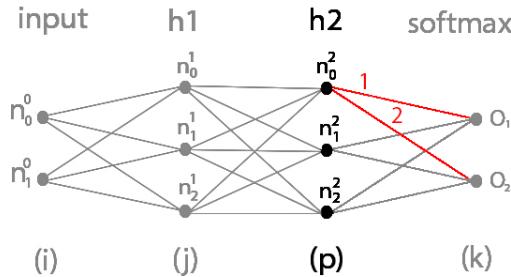
$$\frac{\partial E}{\partial b_k^3} = \frac{\partial E}{\partial Z_k} * \frac{\partial Z_k}{\partial b_k^3} \quad (\text{D.23})$$

$$\frac{\partial Z_k}{\partial b_k^3} = \frac{\partial([\sum_{c=1}^P z_c^2 * W_{pk}^2] + b_k^3)}{\partial b_k^3} = 1 \quad (\text{D.24})$$

$$\frac{\partial E}{\partial b_k^3} = \text{gradiente_}Z_k \quad (\text{D.25})$$

De manera similar, el cálculo del gradiente de la pérdida con respecto a los sesgos de la capa softmax también se mantiene inalterado. Por consiguiente, la única diferencia entre las fórmulas {D.23, D.24, D.25} y {D.3, D.4, D.5} radica en los superíndices utilizados.

D.2.4. Capa oculta h2

Figura D.12: Imagen de los 'caminos' desde la capa softmax hasta n_p^2

Tal y como se comentó anteriormente, existen múltiples 'caminos' desde la capa softmax hasta n_p^2 . Por lo tanto, para obtener el gradiente de la pérdida con respecto a cada n_p^2 , es necesario calcular la suma de todos ellos, tal y como se detalla en las fórmulas D.26 y D.27.

$$\frac{\partial E_{total}}{\partial a_p^2} = \sum_{k=1}^K \frac{\partial E_k}{\partial a_p^2} = \sum_{k=1}^K \text{gradiente_} Z_k * \frac{\partial Z_k}{\partial z_p^2} * \frac{\partial z_p^2}{\partial a_p^2} \quad (\text{D.26})$$

$$\frac{\partial Z_k}{\partial z_p^2} = \frac{\partial([\sum_{c=1}^P z_c^2 * W_{ck}^2] + b_k^3)}{\partial z_p^2} = W_{pk}^2 \quad (\text{D.27})$$

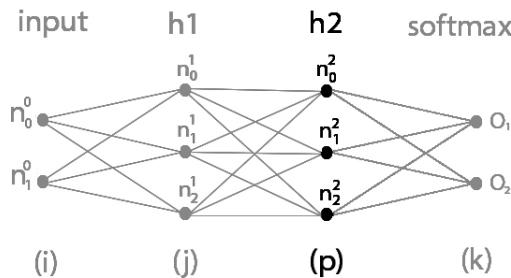


Figura D.13: Retropropagación en la capa oculta h2

Dado que coincide con el ejemplo anterior, en la última capa oculta (en este caso, h2), se utiliza nuevamente la función de activación sigmoide. Por lo tanto, se reitera la derivada de esta función en las fórmulas D.28 y D.29 para facilitar la comprensión del lector.

$$sigmoide(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (\text{D.28})$$

$$sigmoide'(x) = \frac{sigmoide(x)}{1 - sigmoide(x)} \quad (\text{D.29})$$

Empleando la derivada de sigmoide, se obtiene la fórmula D.30.

$$\frac{\partial z_p^2}{\partial a_p^2} = \frac{\partial sigmoide(a_p^2)}{\partial a_p^2} = sigmoide(a_p^2) * (1 - sigmoide(a_p^2)) \quad (\text{D.30})$$

A continuación, se retoma la fórmula D.26 mediante la aplicación de D.27 y D.30 para obtener D.31.

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_{total}}{\partial a_p^2} &= \sum_{k=1}^K \text{gradiente_}Z_k * W_{pk}^2 * sigmoide(a_p^2) * (1 - sigmoide(a_p^2)) \\ &\quad (\text{D.31}) \\ \frac{\partial E_{total}}{\partial a_p^2} &= \text{gradiente_}h2_p \end{aligned}$$

Una vez más, la fórmula obtenida (D.31) coindice con la calculada previamente (D.11), salvo por los superíndices empleados.

D.2.5. Pesos capas h1-h2

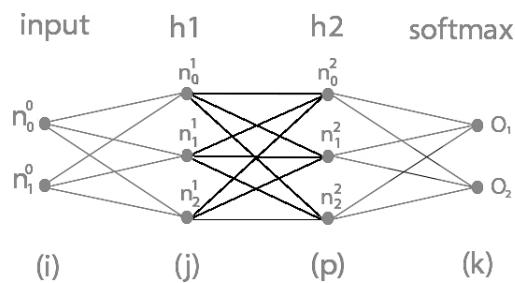


Figura D.14: Retropropagación respecto a los pesos entre las capas ocultas h1 y h2

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial a_p^2}{\partial W_{jp}^1} &= \frac{\partial [\sum_{c=1}^J z_c^1 * W_{cp}^1] + b_p^2}{\partial W_{jp}^1} = z_j^1 \\
 \frac{\partial E}{\partial W_{jp}^1} &= \frac{\partial E_{total}}{\partial a_p^2} * \frac{\partial a_p^2}{\partial W_{jp}^1} \\
 \frac{\partial E(x)}{\partial W_{jp}^1} &= \text{gradiente_h2}_p * \frac{\partial a_p^2}{\partial W_{jp}^1} = \text{gradiente_h2}_p * z_j^1 \quad (\text{D.32})
 \end{aligned}$$

Dado que esta parte también es común al caso anterior, la fórmula D.32 coincide nuevamente con la fórmula D.14.

D.2.6. Sesgos capa h2

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial E}{\partial b_p^2} &= \frac{\partial E_{total}}{\partial a_p^2} * \frac{\partial a_p^2}{\partial b_p^2} \\
 \frac{\partial a_p^2}{\partial b_p^2} &= \frac{\partial ([\sum_{c=1}^J z_c^1 * W_{jp}^1] + b_p^2)}{\partial b_p^2} = 1 \\
 \frac{\partial E}{\partial b_p^2} &= \text{gradiente_h2}_p \quad (\text{D.33})
 \end{aligned}$$

Una vez más, la fórmula D.33 coincide con D.17. Es fundamental reconocer las partes comunes entre ambos casos, ya que esto facilita la generalización del modelo y la automatización de los cálculos correspondientes.

D.2.7. Capa oculta h1

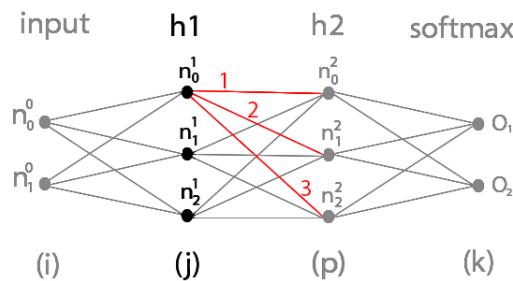


Figura D.15: 'Caminos' desde la capa softmax hasta n_0^1

De manera similar a lo realizado en la capa h2, se calcula la suma de todos los 'caminos' hacia cada neurona n_j^1 .

$$\frac{\partial E_{total}}{\partial a_j^1} = \sum_{k=1}^K \frac{\partial E_k}{\partial a_j^1} = \sum_{p=1}^P \text{gradiente_h2}_p * \frac{\partial a_p^2}{\partial z_j^1} * \frac{\partial z_j^1}{\partial a_j^1}$$

$$\frac{\partial a_p^2}{\partial z_j^1} = \frac{\partial([\sum_{c=1}^J z_c^1 * W_{cp}^1] + b_p^2)}{\partial z_j^1} = W_{jp}^1$$

Como era de esperar, se calcula el gradiente con respecto a cada neurona de la capa h1 considerando cada ‘camino’ del gradiente proveniente la capa siguiente (h2).

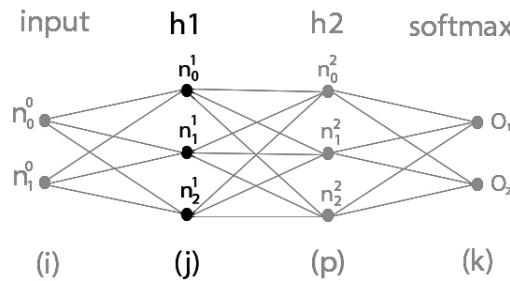


Figura D.16: Retropropagación en la capa oculta h1

En este caso, en la capa oculta h1 se utiliza la función de activación ReLU, cuya derivada viene dada por la fórmula D.35.

$$\text{ReLU}(x) = \max(0, x) \quad (\text{D.34})$$

$$\text{ReLU}'(x) = 1 \text{ si } x > 0, 0 \text{ en caso contrario} \quad (\text{D.35})$$

La derivada la función de activación ReLU (fórmula D.34), se emplea para obtener el gradiente $\frac{\partial z_j^1}{\partial a_j^1}$, y para continuar con la retropropagación a través de la capa, tal y como se detalla en las fórmulas (D.36, D.37, y D.38).

$$\frac{\partial z_j^1}{\partial a_j^1} = 1 \text{ si } x > 0, 0 \text{ en caso contrario} \quad (\text{D.36})$$

$$\frac{\partial E_{total}}{\partial a_j^1} = \sum_{p=1}^P \text{gradiente_h2}_p * W_{jp}^1 * \text{ReLU}'(a_j^1) \quad (\text{D.37})$$

$$\frac{\partial E_{total}}{\partial a_j^1} = \text{gradiente_h1}_j \quad (\text{D.38})$$

Una vez más, el proceso para obtener de la fórmula D.37 es muy similar al utilizado en casos anteriores, a pesar de que pueda parecer relativamente nueva en comparación con la sección anterior.

D.2.8. Pesos capa input-h1

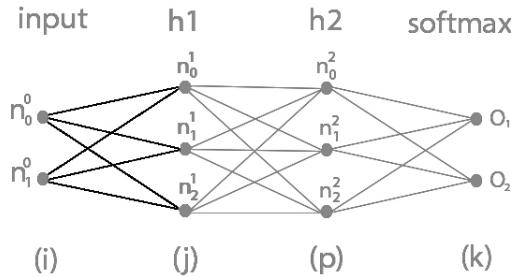


Figura D.17: Retropropagación respecto a los pesos entre la capa de entrada y la capa oculta h1

$$\frac{\partial a_j^1}{\partial W_{ij}^0} = \frac{\partial([\sum_{c=1}^I z_c^0 * W_{cj}^0] + b_j^1)}{\partial W_{ij}^0} = z_i^0 \quad (\text{D.39})$$

$$\frac{\partial E}{\partial W_{ij}^0} = \frac{\partial E_{total}}{\partial a_j^1} * \frac{\partial a_j^1}{\partial W_{ij}^0} \quad (\text{D.40})$$

$$\frac{\partial E(x)}{\partial W_{ij}^0} = \text{gradiente_h1}_j * \frac{\partial a_j^1}{\partial W_{ij}^0} = \text{gradiente_h1}_j * z_i^0 \quad (\text{D.41})$$

Aquí se observa que las fórmulas {D.39, D.40, D.41 } son idénticas a {D.12, D.13, D.14 }, excepto por el subíndice empleado ($j \neq p$). Aunque los valores analíticos puedan diferir debido a las diferencias en las arquitecturas, la notación utilizada se ha diseñado para facilitar la visualización y comprensión de la capacidad de automatización en las capas totalmente conectadas.

D.2.9. Sesgos capa h1

$$\frac{\partial E}{\partial b_j^1} = \frac{\partial E_{total}}{\partial a_j^1} * \frac{\partial a_j^1}{\partial b_j^1} \quad (\text{D.42})$$

$$\frac{\partial a_j^1}{\partial b_j^1} = \frac{\partial([\sum_{c=1}^I z_c^0 * W_{ij}^0] + b_j^1)}{\partial b_j^1} = 1 \quad (\text{D.43})$$

$$\frac{\partial E}{\partial b_j^1} = \text{gradiente_h1}_j \quad (\text{D.44})$$

De este modo, las fórmulas {D.42, D.43, D.44 } y {D.15, D.16, D.17 } coinciden en todo los aspectos, excepto en el subíndice ($j \neq p$).

D.2.10. Capa input

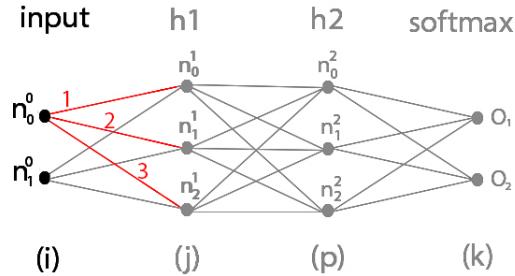


Figura D.18: 'Caminos' desde la capa oculta h1 hasta n_0^0

$$\frac{\partial E_{total}}{\partial a_i^0} = \sum_{j=1}^J \frac{\partial E_{total}}{\partial a_j^1} * \frac{\partial a_j^1}{\partial z_i^0} * \frac{\partial z_i^0}{\partial a_i^0} \quad (\text{D.45})$$

$$\frac{\partial a_j^1}{\partial z_i^0} = \frac{\partial([\sum_{c=1}^I z_c^0 * W_{ij}^0] + b_j^1)}{\partial z_i^0} = W_{ij}^0 \quad (\text{D.46})$$

Aquí también se observa que, a pesar de las diferencias en los subíndices utilizados, las fórmulas {D.45, D.46 } y {??, D.18} son idénticas.

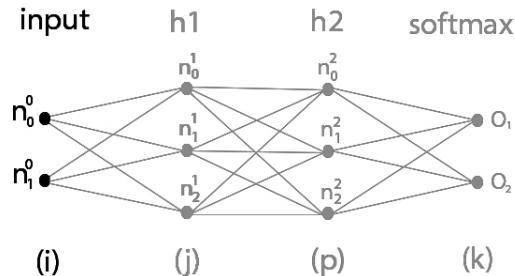


Figura D.19: Retropropagación en la capa input

Dado que la capa de entrada no tiene ninguna función de activación asociada, z_i^0 es igual a a_i^0 , al igual que en el caso anterior.

$$\begin{aligned} \frac{\partial z_i^0}{\partial a_i^0} &= 1 \\ \frac{\partial E_{total}}{\partial a_i^0} &= \sum_{p=1}^P \text{gradiente_h1}_p \end{aligned}$$

D.3. Conclusiones

Se definen como capas ocultas “intermedias” todas las capas, exceptuando la última de ellas. Tal y como se ha demostrado anteriormente, estas capas comparten la mayoría de los cálculos asociados a la retropropagación. En consecuencia, una red neuronal totalmente conectada puede dividirse en 4 grupos {capa de entrada, capas ocultas intermedias, última capa oculta, capa de salida o capa softmax}.

A continuación se realiza el cálculo necesario para la retropropagación de una capa de neuronas l específica. Suponemos que la capa $l+1$ tiene Q neuronas, la capa $l-1$ tiene K neuronas, y que todas las capas ocultas intermedias usan ReLU como función de activación.

D.3.1. Gradiente respecto a la entrada de la capa

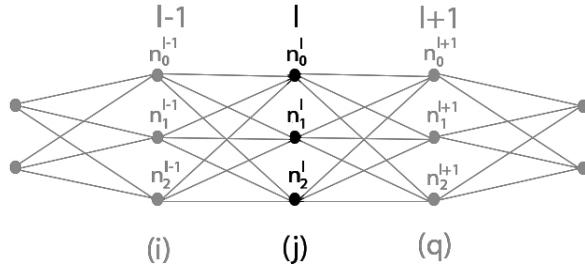


Figura D.20: Retropropagación en la capa l

$$\frac{\partial E_{total}}{\partial a_j^l} = \sum_{q=1}^Q \frac{\partial E_{total}}{\partial a_q^{l+1}} * \frac{\partial a_q^{l+1}}{\partial z_j^l} * \frac{\partial z_j^l}{\partial a_j^l} \quad (\text{D.47})$$

$$\frac{\partial a_j^{l+1}}{\partial z_j^l} = \frac{\partial([\sum_{c=1}^K z_c^l * W_{ij}^l] + b_j^{l+1})}{\partial z_j^l} = W_{ij}^l \quad (\text{D.48})$$

$$\frac{\partial z_j^l}{\partial a_j^l} = \text{ReLU}'(a_j^l) \quad (\text{D.49})$$

$$\frac{\partial E_{total}}{\partial a_j^l} = \sum_{q=1}^Q \text{gradiente_} h_{l+1_q} * W_{ij}^l * \text{ReLU}'(a_j^l) \quad (\text{D.50})$$

$$\frac{\partial E_{total}}{\partial a_j^l} = \text{gradiente_} h_{l_j} \quad (\text{D.51})$$

Las fórmulas D.47, D.48, D.49, D.50, y D.51, ilustran el cálculo genérico necesario para obtener el gradiente de la pérdida con respecto a la entrada de una capa oculta intermedia l .

D.3.2. Gradiente respecto a los pesos

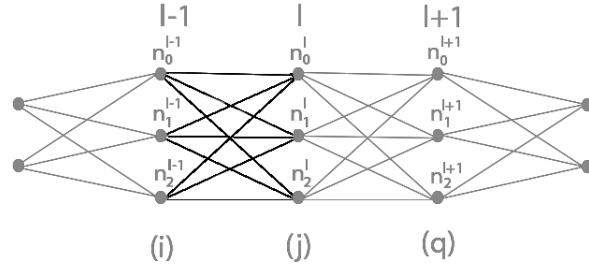


Figura D.21: Retropropagación respecto a los pesos entre la capa $l-1$ y l

$$\frac{\partial E}{\partial W_{ij}^{l-1}} = \frac{\partial E_{total}}{\partial a_j^l} * \frac{\partial a_j^l}{W_{ij}^{l-1}} \quad (\text{D.52})$$

$$\frac{\partial a_j^l}{\partial W_{ij}^{l-1}} = \frac{\partial([\sum_{c=1}^K z_c^{l-1} * W_{cj}^{l-1}] + b_j^l)}{\partial W_{ij}^{l-1}} = z_i^{l-1} \quad (\text{D.53})$$

$$\frac{\partial E(x)}{\partial W_{ij}^{l-1}} = \text{gradiente_}h_{l_j} * \frac{\partial a_j^l}{\partial W_{ij}^{l-1}} = \text{gradiente_}h_{l_j} * z_i^{l-1} \quad (\text{D.54})$$

Las fórmulas D.52, D.53, y D.54 detallan el cálculo necesario para determinar el gradiente de la pérdida con respecto a los pesos entre las capas ocultas l y $l-1$.

D.3.3. Gradiente respecto a sesgos

$$\frac{\partial E}{\partial b_j^l} = \frac{\partial E_{total}}{\partial a_j^l} * \frac{\partial a_j^l}{b_j^l} \quad (\text{D.55})$$

$$\frac{\partial a_j^l}{\partial b_j^l} = \frac{\partial([\sum_{c=1}^K z_c^{l-1} * W_{ij}^{l-1}] + b_j^l)}{\partial b_j^l} = 1 \quad (\text{D.56})$$

$$\frac{\partial E}{\partial b_j^l} = \text{gradiente_}h_{l_j} \quad (\text{D.57})$$

Las fórmulas D.55, D.56, y D.57 presentan el cálculo necesario para obtener el gradiente de la pérdida con respecto a los sesgos de la capa oculta l .

Apéndice E

Retropropagación en capas convolucionales

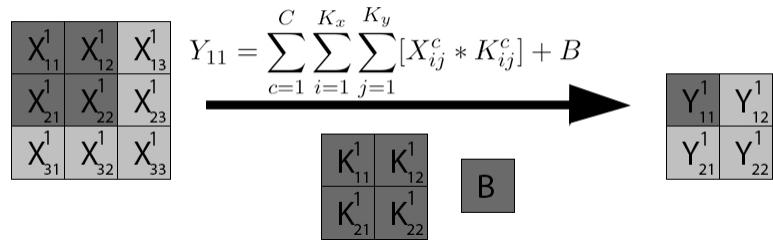


Figura E.1: Ejemplo de propagación hacia delante en una capa convolucional

La figura E.1 ilustra el ejemplo de propagación hacia delante que se utilizará en esta sección. En dicha figura, C representa el número de canales de profundidad del volumen de entrada X , mientras que K_x y K_y se refieren al número de filas y columnas del kernel K utilizado, respectivamente. Siguiendo la notación empleada en secciones anteriores, se denotará por A_{ij}^c al valor de X_{ij}^c antes de aplicar la función de activación correspondiente, y por Z_{ij}^c , al valor resultante después de aplicar dicha función.

E.1. Sumatoria de gradientes

$$\frac{\partial E}{\partial K_{11}^c} = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \left[\frac{\partial E}{\partial Y_{ij}^c} * \frac{\partial Y_{ij}^c}{\partial K_{11}^c} \right] \quad (\text{E.1})$$

$$\frac{\partial E}{\partial X_{11}^c} = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \left[\frac{\partial E}{\partial Y_{ij}^c} * \frac{\partial Y_{ij}^c}{\partial Z_{11}^c} * \frac{\partial Z_{11}^c}{\partial A_{11}^c} \right] \quad (\text{E.2})$$

Para calcular el gradiente de la función de error con respecto a cada peso K_{xy} o entrada X_{xy} , se debe realizar una sumatoria del gradiente correspondiente sobre cada valor de salida producido por la convolución. En el caso de los pesos asociados a un canal de profundidad $c \in C$, cada peso K_{xy} se empleó en el cálculo de cada valor Y_{ij}^c . Por otro lado, los valores de la entrada X_{xy} contribuyen al cálculo de varios valores de salida $\{Y_1, Y_2\} \in Y$. Este proceso fue detallado anteriormente en la sección 2.5.1.

E.1.1. Gradiente de Y_{11}^c

$$Y_{11}^c = Z_{11}^c * K_{11}^c + Z_{12}^c * K_{12}^c + Z_{21}^c * K_{21}^c + Z_{22}^c * K_{22}^c \quad (\text{E.3})$$

$$\frac{\partial Y_{11}^c}{\partial K_{xy}^c} = \frac{\partial(Z_{11}^c * K_{11}^c + Z_{12}^c * K_{12}^c + Z_{21}^c * K_{21}^c + Z_{22}^c * K_{22}^c)}{\partial K_{xy}^c} \quad (\text{E.4})$$

$$\frac{\partial Y_{11}^c}{\partial K_{11}^c} = Z_{11}^c, \quad \frac{\partial Y_{11}^c}{\partial K_{12}^c} = Z_{12}^c \quad (\text{E.5})$$

$$\frac{\partial Y_{11}^c}{\partial K_{21}^c} = Z_{21}^c, \quad \frac{\partial Y_{11}^c}{\partial K_{22}^c} = Z_{22}^c \quad (\text{E.6})$$

$$\frac{\partial Y_{11}^c}{\partial Z_{11}^c} = K_{11}^c, \quad \frac{\partial Y_{11}^c}{\partial Z_{12}^c} = K_{12}^c, \quad \frac{\partial Y_{11}^c}{\partial Z_{13}^c} = 0 \quad (\text{E.7})$$

$$\frac{\partial Y_{11}^c}{\partial Z_{21}^c} = K_{21}^c, \quad \frac{\partial Y_{11}^c}{\partial Z_{22}^c} = K_{22}^c, \quad \frac{\partial Y_{11}^c}{\partial Z_{23}^c} = 0 \quad (\text{E.8})$$

$$\frac{\partial Y_{11}^c}{\partial Z_{31}^c} = 0, \quad \frac{\partial Y_{11}^c}{\partial Z_{32}^c} = 0, \quad \frac{\partial Y_{11}^c}{\partial Z_{33}^c} = 0 \quad (\text{E.9})$$

La fórmula E.3, presenta una descomposición de Y_{11}^c en términos de Z y K . Esto, es esencial para el cálculo del gradiente, tanto con respecto a Z , (como se detalla en las fórmulas E.7, E.8, E.9), como con respecto a K , (como se muestra en las fórmulas E.4, E.5, E.6). Esta descomposición, permite calcular el gradiente de Y_{11}^c con respecto a cada parámetro de la capa convolucional.

Cabe destacar que, para calcular el gradiente con respecto a cada valor del volumen de entrada (X), también debe calcularse la derivada de la función de activación asociada a dicha capa. Es decir, $\frac{\partial Z}{\partial A}$. Sin embargo, dado que este proceso ha sido abordado en secciones anteriores, se omitirá en esta ocasión, al igual que el cálculo del gradiente con respecto al sesgo de cada capa. El propósito de esta omisión es evitar cálculos redundantes y concentrar la atención en los aspectos más relevantes e innovadores. No obstante, es importante señalar que todos los cálculos discutidos en esta documentación, y más, están implementados en el código correspondiente, lo que garantiza que este conocimiento se ha aplicado y verificado en la práctica.

Además, dado que todo ha sido realizado manualmente por la misma persona, la mayoría de las variables e índices utilizados en la documentación coinciden perfectamente o son muy similares a los empleados en el código. Esto asegura que cualquier lector con conocimientos básicos de programación pueda comprender gran parte de las implementaciones desarrolladas en este proyecto.

E.1.2. Gradiente de Y_{12}^c

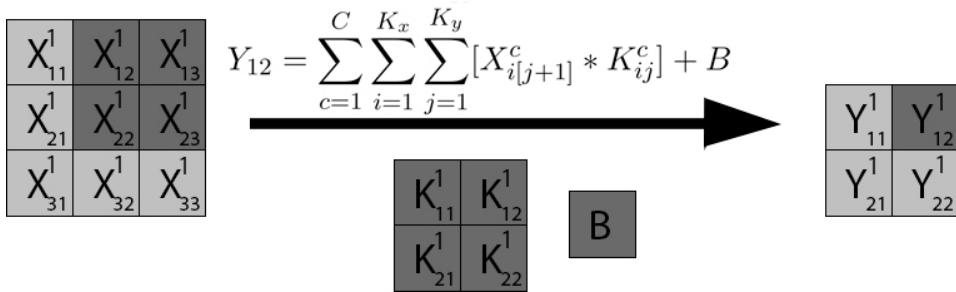


Figura E.2: Cálculo de Y_{12}^c mediante propagación hacia delante en una capa convolucional

Del mismo modo, se calcula el gradiente de Y_{12}^c con respecto a cada peso, como se muestra en las fórmulas E.12 y E.13.

$$Y_{12}^c = Z_{12}^c * K_{11}^c + Z_{13}^c * K_{12}^c + Z_{22}^c * K_{21}^c + Z_{23}^c * K_{22}^c \quad (\text{E.10})$$

$$\frac{\partial Y_{12}^c}{\partial K_{xy}^c} = \frac{\partial (Z_{11}^c * K_{11}^c + Z_{12}^c * K_{12}^c + Z_{21}^c * K_{21}^c + Z_{22}^c * K_{22}^c)}{\partial K_{xy}^c} \quad (\text{E.11})$$

$$\frac{\partial Y_{12}^c}{\partial K_{11}^c} = Z_{12}^c, \quad \frac{\partial Y_{12}^c}{\partial K_{12}^c} = Z_{13}^c \quad (\text{E.12})$$

$$\frac{\partial Y_{12}^c}{\partial K_{21}^c} = Z_{22}^c, \quad \frac{\partial Y_{12}^c}{\partial K_{22}^c} = Z_{23}^c \quad (\text{E.13})$$

Asimismo, se calcula el gradiente de Y_{12}^c con respecto a cada valor de entrada, como se detalla en las fórmulas E.14, E.15 y E.16.

$$\frac{\partial Y_{12}^c}{\partial Z_{11}^c} = 0, \quad \frac{\partial Y_{12}^c}{\partial Z_{12}^c} = K_{11}^c, \quad \frac{\partial Y_{12}^c}{\partial Z_{13}^c} = K_{12}^c \quad (\text{E.14})$$

$$\frac{\partial Y_{12}^c}{\partial Z_{21}^c} = 0, \quad \frac{\partial Y_{12}^c}{\partial Z_{22}^c} = K_{21}^c, \quad \frac{\partial Y_{12}^c}{\partial Z_{23}^c} = K_{22}^c \quad (\text{E.15})$$

$$\frac{\partial Y_{12}^c}{\partial Z_{31}^c} = 0, \quad \frac{\partial Y_{12}^c}{\partial Z_{32}^c} = 0, \quad \frac{\partial Y_{12}^c}{\partial Z_{33}^c} = 0 \quad (\text{E.16})$$

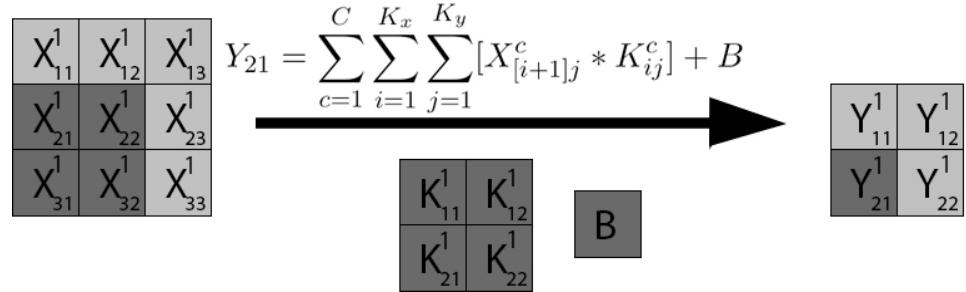
E.1.3. Gradiente de Y_{21}^c 

Figura E.3: Cálculo de Y_{21}^c mediante propagación hacia delante en una capa convolucional

Se calcula el gradiente de Y_{21}^c con respecto a cada peso, tal y como se muestra en las ecuaciones E.19 y E.20.

$$Y_{21}^c = Z_{21}^c * K_{11}^c + Z_{22}^c * K_{12}^c + Z_{31}^c * K_{21}^c + Z_{32}^c * K_{22}^c \quad (\text{E.17})$$

$$\frac{\partial Y_{21}^c}{\partial K_{xy}^c} = \frac{\partial(Z_{21}^c * K_{11}^c + Z_{22}^c * K_{12}^c + Z_{31}^c * K_{21}^c + Z_{32}^c * K_{22}^c)}{\partial K_{xy}^c} \quad (\text{E.18})$$

$$\frac{\partial Y_{21}^c}{\partial K_{11}^c} = Z_{21}^c, \quad \frac{\partial Y_{21}^c}{\partial K_{12}^c} = Z_{22}^c \quad (\text{E.19})$$

$$\frac{\partial Y_{21}^c}{\partial K_{21}^c} = Z_{31}^c, \quad \frac{\partial Y_{21}^c}{\partial K_{22}^c} = Z_{32}^c \quad (\text{E.20})$$

Asimismo, se calcula el gradiente de Y_{21}^c con respecto a cada valor de entrada, según se detalla en las ecuaciones E.21, E.22 y E.23.

$$\frac{\partial Y_{21}^c}{\partial Z_{11}^c} = 0, \quad \frac{\partial Y_{21}^c}{\partial Z_{12}^c} = 0, \quad \frac{\partial Y_{21}^c}{\partial Z_{13}^c} = 0 \quad (\text{E.21})$$

$$\frac{\partial Y_{21}^c}{\partial Z_{21}^c} = K_{11}^c, \quad \frac{\partial Y_{21}^c}{\partial Z_{22}^c} = K_{12}^c, \quad \frac{\partial Y_{21}^c}{\partial Z_{23}^c} = 0 \quad (\text{E.22})$$

$$\frac{\partial Y_{21}^c}{\partial Z_{31}^c} = K_{21}^c, \quad \frac{\partial Y_{21}^c}{\partial Z_{32}^c} = K_{22}^c, \quad \frac{\partial Y_{21}^c}{\partial Z_{33}^c} = 0 \quad (\text{E.23})$$

E.1.4. Gradiente de Y_{22}^c

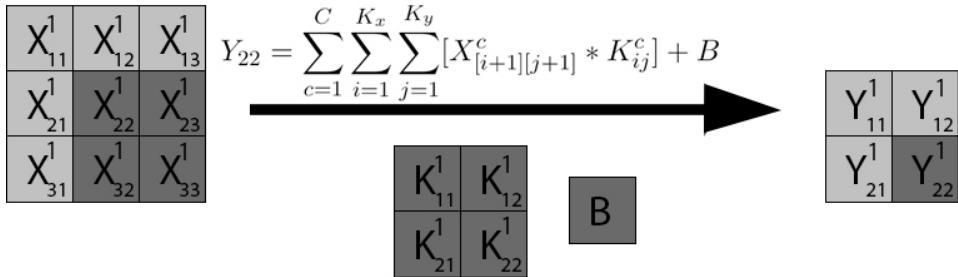


Figura E.4: Cálculo de Y_{22}^c mediante propagación hacia delante en una capa convolucional

El gradiente de Y_{22}^c se calcula con respecto a cada peso, como se muestra en las fórmulas E.26 y E.27.

$$Y_{22}^c = Z_{22}^c * K_{11}^c + Z_{23}^c * K_{12}^c + Z_{32}^c * K_{21}^c + Z_{33}^c * K_{22}^c \quad (\text{E.24})$$

$$\frac{\partial Y_{22}^c}{\partial K_{xy}^c} = \frac{\partial (Z_{11}^c * K_{11}^c + Z_{12}^c * K_{12}^c + Z_{21}^c * K_{21}^c + Z_{22}^c * K_{22}^c)}{\partial K_{xy}^c} \quad (\text{E.25})$$

$$\frac{\partial Y_{22}^c}{\partial K_{11}^c} = Z_{22}^c, \quad \frac{\partial Y_{22}^c}{\partial K_{12}^c} = Z_{23}^c \quad (\text{E.26})$$

$$\frac{\partial Y_{22}^c}{\partial K_{21}^c} = Z_{32}^c, \quad \frac{\partial Y_{22}^c}{\partial K_{22}^c} = Z_{33}^c \quad (\text{E.27})$$

Se calcula el gradiente de Y_{22}^c respecto a cada valor del volumen de entrada, como se muestra en las fórmulas E.28, E.29, y E.30.

$$\frac{\partial Y_{22}^c}{\partial Z_{11}^c} = 0, \quad \frac{\partial Y_{22}^c}{\partial Z_{12}^c} = 0, \quad \frac{\partial Y_{22}^c}{\partial Z_{13}^c} = 0 \quad (\text{E.28})$$

$$\frac{\partial Y_{22}^c}{\partial Z_{21}^c} = 0, \quad \frac{\partial Y_{22}^c}{\partial Z_{22}^c} = K_{11}^c, \quad \frac{\partial Y_{22}^c}{\partial Z_{23}^c} = K_{12}^c \quad (\text{E.29})$$

$$\frac{\partial Y_{22}^c}{\partial Z_{31}^c} = 0, \quad \frac{\partial Y_{22}^c}{\partial Z_{32}^c} = K_{21}^c, \quad \frac{\partial Y_{22}^c}{\partial Z_{33}^c} = K_{22}^c \quad (\text{E.30})$$

E.1.5. Gradiente respecto a pesos como convolución

Finalmente, se procede al cálculo de la suma total de gradientes con respecto a cada peso de la capa, conforme a las fórmulas E.31, E.32, E.33, y E.34. Se observa un patrón claro en los gradientes resultantes, que refleja la contribución de cada peso en el cálculo del error total.

$$\frac{\partial E}{\partial K_{11}^c} = \frac{\partial E}{\partial Y_{11}^c} * Z_{11}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{12}^c} * Z_{12}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{21}^c} * Z_{21}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{22}^c} * Z_{22}^c \quad (\text{E.31})$$

$$\frac{\partial E}{\partial K_{12}^c} = \frac{\partial E}{\partial Y_{11}^c} * Z_{12}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{12}^c} * Z_{13}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{21}^c} * Z_{22}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{22}^c} * Z_{23}^c \quad (\text{E.32})$$

$$\frac{\partial E}{\partial K_{21}^c} = \frac{\partial E}{\partial Y_{11}^c} * Z_{21}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{12}^c} * Z_{22}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{31}^c} * Z_{31}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{22}^c} * Z_{32}^c \quad (\text{E.33})$$

$$\frac{\partial E}{\partial K_{22}^c} = \frac{\partial E}{\partial Y_{11}^c} * Z_{22}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{12}^c} * Z_{23}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{31}^c} * Z_{32}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{22}^c} * Z_{33}^c \quad (\text{E.34})$$

Como se observa en los cálculos realizados, estos coinciden con una operación de convolución entre la entrada X y el gradiente respecto a la capa de salida Y . Este procedimiento se detalla en la Figura E.5 [62].

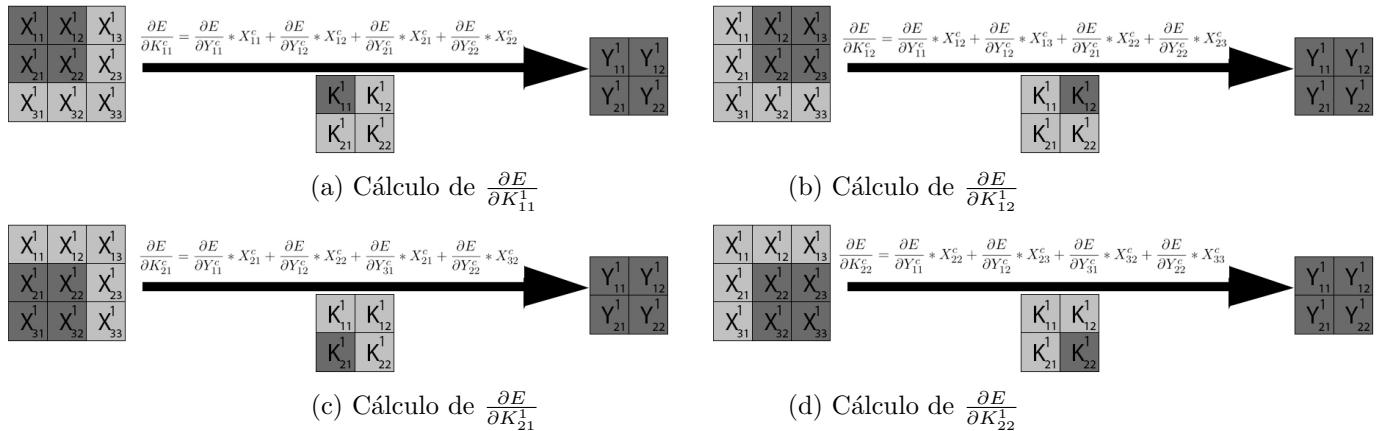


Figura E.5: Cálculo del gradiente de la pérdida con respecto a cada filtro como convolución entre X e Y

En la figura E.5, cada subfigura $\{(a), (b), (c), (d)\}$ representa el cálculo del gradiente con respecto a un peso específico. Aunque la representación puede parecer algo diferente a simple vista, los cálculos son esencialmente los mismos que los obtenidos anteriormente, con la única diferencia en la forma en que se visualizan.

E.1.6. Gradiente respecto a entrada como convolución

Por razones de simplicidad, y en consonancia con las recomendaciones de expertos, y la experiencia personal, se empleará ReLU como función de activación en las capas convolucionales. Dado que, la derivada de esta función ya ha sido previamente calculada, (véase la fórmula D.35), se considerará esta información para los cálculos subsiguientes.

$$\frac{\partial E}{\partial A_{11}^c} = \frac{\partial E}{\partial Y_{11}^c} * K_{11}^c * \text{ReLU}'(A_{11}^c) \quad (\text{E.35})$$

$$\frac{\partial E}{\partial A_{12}^c} = \left(\frac{\partial E}{\partial Y_{11}^c} * K_{12}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{12}^c} * K_{11}^c \right) * \text{ReLU}'(A_{12}^c) \quad (\text{E.36})$$

$$\frac{\partial E}{\partial A_{13}^c} = \frac{\partial E}{\partial Y_{12}^c} * K_{12}^c * \text{ReLU}'(A_{13}^c) \quad (\text{E.37})$$

(E.38)

$$\frac{\partial E}{\partial A_{21}^c} = \left(\frac{\partial E}{\partial Y_{11}^c} * K_{21}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{21}^c} * K_{11}^c \right) * \text{ReLU}'(A_{21}^c) \quad (\text{E.39})$$

$$\frac{\partial E}{\partial A_{22}^c} = \left(\frac{\partial E}{\partial Y_{11}^c} * K_{22}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{12}^c} * K_{21}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{21}^c} * K_{12}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{22}^c} * K_{11}^c \right) * \text{ReLU}'(A_{22}^c) \quad (\text{E.40})$$

$$\frac{\partial E}{\partial A_{23}^c} = \left(\frac{\partial E}{\partial Y_{12}^c} * K_{22}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{22}^c} * K_{12}^c \right) * \text{ReLU}'(A_{23}^c) \quad (\text{E.41})$$

(E.42)

$$\frac{\partial E}{\partial A_{31}^c} = \frac{\partial E}{\partial Y_{21}^c} * K_{21}^c * \text{ReLU}'(A_{31}^c) \quad (\text{E.43})$$

$$\frac{\partial E}{\partial A_{32}^c} = \left(\frac{\partial E}{\partial Y_{21}^c} * K_{22}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{22}^c} * K_{21}^c \right) * \text{ReLU}'(A_{32}^c) \quad (\text{E.44})$$

$$\frac{\partial E}{\partial A_{33}^c} = \frac{\partial E}{\partial Y_{22}^c} * K_{22}^c * \text{ReLU}'(A_{33}^c) \quad (\text{E.45})$$

Tal y como se observa en los cálculos obtenidos, estos corresponden a una convolución de tipo “full” (completa) entre el gradiente con respecto a la capa de salida (Y) y los pesos (K), invertidos tanto horizontal como verticalmente. El proceso de cálculo del gradiente con respecto a cada valor $x \in X$ se presenta en detalle en la figura E.7, mientras que la manera de invertir los pesos se ilustra en la figura E.6 [62].

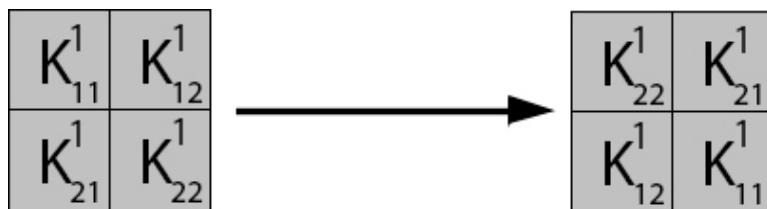


Figura E.6: Inversión de los pesos en K tanto horizontal como verticalmente

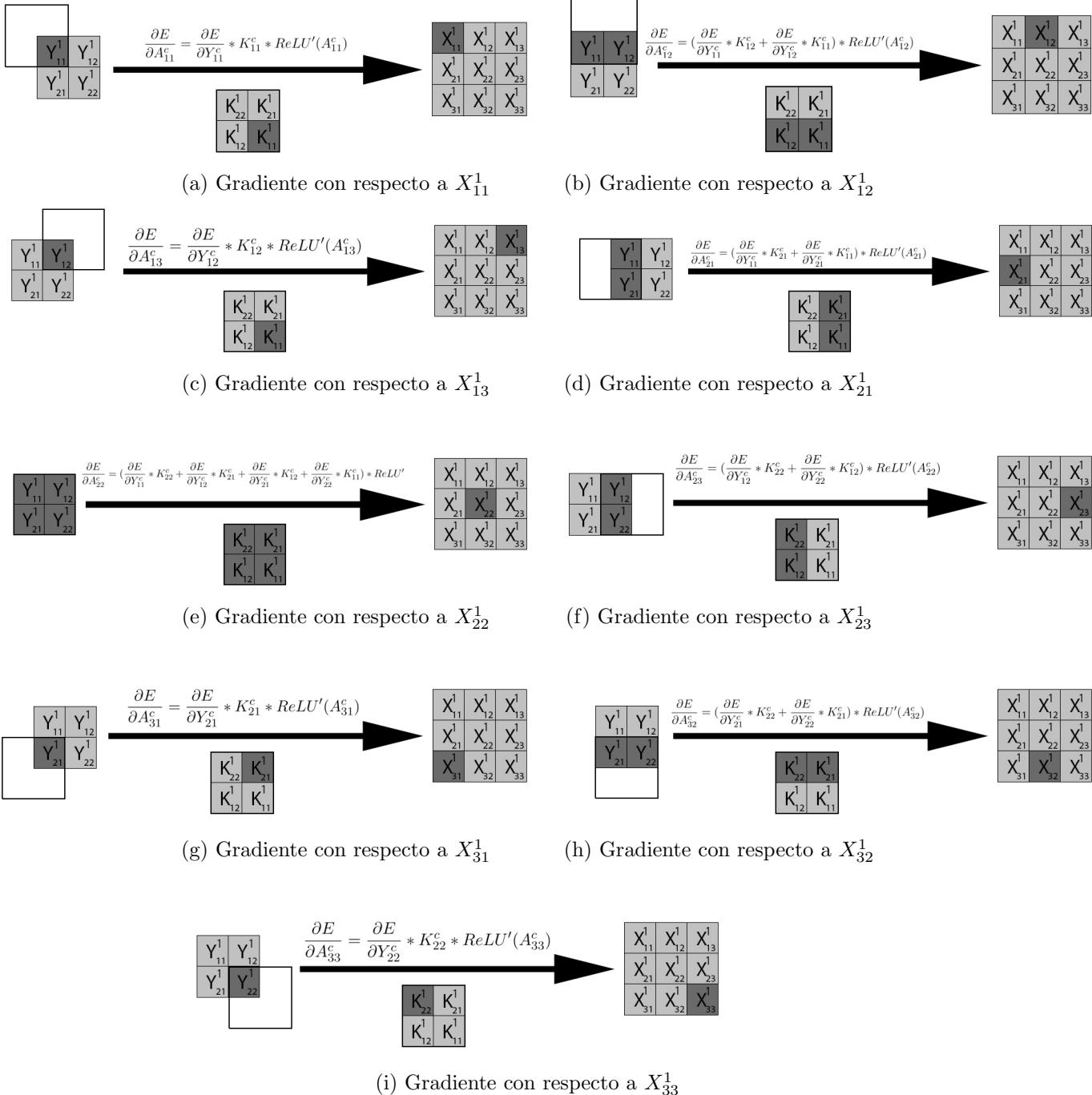


Figura E.7: Cálculo del gradiente de la pérdida con respecto a cada valor de entrada como convolución entre K e Y

Una vez más, los cálculos presentados en la Figura 2.21 coinciden perfectamente con los obtenidos anteriormente, ya que son idénticos. La única diferencia radica en la manera de presentación, la cual ha sido adaptada para ofrecer una comprensión más y generalizada del proceso. Esta adaptación facilita la automatización de los cálculos y permite una implementación más eficiente en el código.

E.2. Retropropagación con relleno

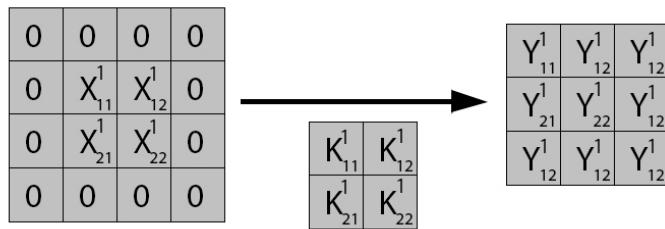


Figura E.8: Ejemplo de retropropagación en una capa convolucional con relleno

De manera similar al apartado anterior, se realizará y presentará el cálculo de la retropropagación para una capa convolucional. La diferencia principal en este caso radica en la inclusión de relleno en la capa, como se ilustra en el ejemplo proporcionado en la Figura E.8. En consecuencia, se procederá a calcular el gradiente de la función de error con respecto a los pesos y a los valores de entrada de la capa.

E.2.1. Gradiente de Y_{11}^c

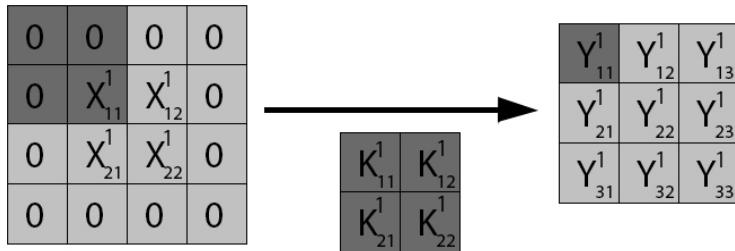


Figura E.9: Retropropagación de Y_{11}^c

Para facilitar la compresión del lector, se conservará la misma estructura y notación empleadas en el apartado anterior. Así, se procederá al cálculo

del gradiente de Y_{11}^c con respecto a cada peso utilizando las fórmulas E.48 y E.48.

$$Y_{11}^c = Z_{11}^c * K_{22}^c \quad (\text{E.46})$$

$$\frac{\partial Y_{11}^c}{\partial K_{xy}^c} = \frac{\partial (Z_{11}^c * K_{22}^c)}{\partial K_{xy}^c} \quad (\text{E.47})$$

$$\frac{\partial Y_{11}^c}{\partial K_{11}^c} = 0, \quad \frac{\partial Y_{11}^c}{\partial K_{12}^c} = 0 \quad (\text{E.48})$$

$$\frac{\partial Y_{11}^c}{\partial K_{21}^c} = 0, \quad \frac{\partial Y_{11}^c}{\partial K_{22}^c} = Z_{11}^c \quad (\text{E.49})$$

Para mantener la coherencia con el apartado anterior, también se calculará el gradiente de Y_{11}^c con respecto a cada valor del volumen de entrada utilizando las fórmulas E.50 y E.51.

$$\frac{\partial Y_{11}^c}{\partial Z_{11}^c} = K_{22}^c, \quad \frac{\partial Y_{11}^c}{\partial Z_{12}^c} = 0 \quad (\text{E.50})$$

$$\frac{\partial Y_{11}^c}{\partial Z_{21}^c} = 0, \quad \frac{\partial Y_{11}^c}{\partial Z_{22}^c} = 0 \quad (\text{E.51})$$

E.2.2. Gradiente de Y_{12}^c

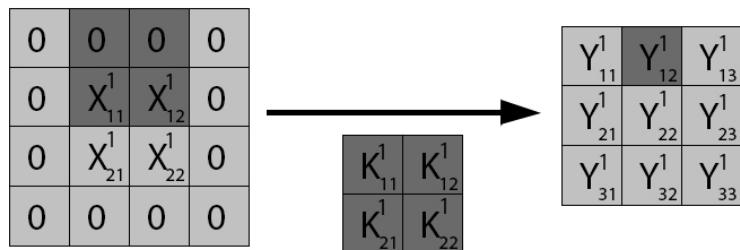


Figura E.10: Retropropagación de Y_{12}^c

Se calculará el gradiente de Y_{12}^c con respecto a cada peso utilizando las fórmulas E.54 y E.55.

$$Y_{12}^c = Z_{11}^c * K_{21}^c + Z_{12}^c * K_{22}^c \quad (\text{E.52})$$

$$\frac{\partial Y_{12}^c}{\partial K_{xy}^c} = \frac{\partial(Z_{11}^c * K_{21}^c + Z_{12}^c * K_{22}^c)}{\partial K_{xy}^c} \quad (\text{E.53})$$

$$\frac{\partial Y_{12}^c}{\partial K_{11}^c} = 0, \quad \frac{\partial Y_{12}^c}{\partial K_{12}^c} = 0 \quad (\text{E.54})$$

$$\frac{\partial Y_{12}^c}{\partial K_{21}^c} = Z_{11}^c, \quad \frac{\partial Y_{12}^c}{\partial K_{22}^c} = Z_{12}^c \quad (\text{E.55})$$

Asimismo, se calculará el gradiente de Y_{12}^c con respecto a cada valor del volumen de entrada utilizando las fórmulas E.56 y E.57.

$$\frac{\partial Y_{12}^c}{\partial Z_{11}^c} = K_{21}^c, \quad \frac{\partial Y_{12}^c}{\partial Z_{12}^c} = K_{22}^c \quad (\text{E.56})$$

$$\frac{\partial Y_{12}^c}{\partial Z_{21}^c} = 0, \quad \frac{\partial Y_{12}^c}{\partial Z_{22}^c} = 0 \quad (\text{E.57})$$

E.2.3. Gradiente de Y_{13}^c

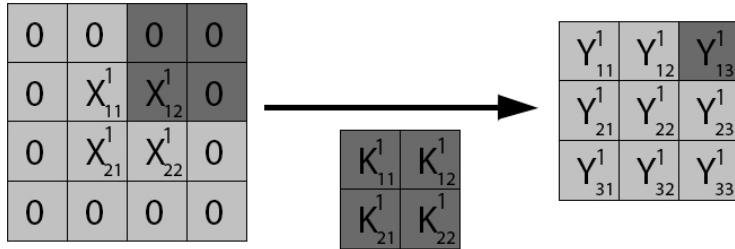


Figura E.11: Retropropagación de Y_{13}^c

Se calculará el gradiente de Y_{13}^c con respecto a cada peso mediante las fórmulas E.60 y E.2.3.

$$Y_{13}^c = Z_{12}^c * K_{21}^c \quad (\text{E.58})$$

$$\frac{\partial Y_{13}^c}{\partial K_{xy}^c} = \frac{\partial(Z_{12}^c * K_{21}^c)}{\partial K_{xy}^c} \quad (\text{E.59})$$

$$\frac{\partial Y_{13}^c}{\partial K_{11}^c} = 0, \quad \frac{\partial Y_{13}^c}{\partial K_{12}^c} = 0 \quad (\text{E.60})$$

$$\frac{\partial Y_{13}^c}{\partial K_{21}^c} = Z_{12}^c, \quad \frac{\partial Y_{13}^c}{\partial K_{22}^c} = 0 \quad (\text{E.61})$$

Además, se calculará el gradiente de Y_{13}^c con respecto a cada valor del volumen de entrada mediante las fórmulas E.62 y E.63.

$$\frac{\partial Y_{13}^c}{\partial Z_{11}^c} = 0, \quad \frac{\partial Y_{13}^c}{\partial Z_{12}^c} = K_{21}^c \quad (\text{E.62})$$

$$\frac{\partial Y_{13}^c}{\partial Z_{21}^c} = 0, \quad \frac{\partial Y_{13}^c}{\partial Z_{22}^c} = 0 \quad (\text{E.63})$$

E.2.4. Gradiente de Y_{21}^c

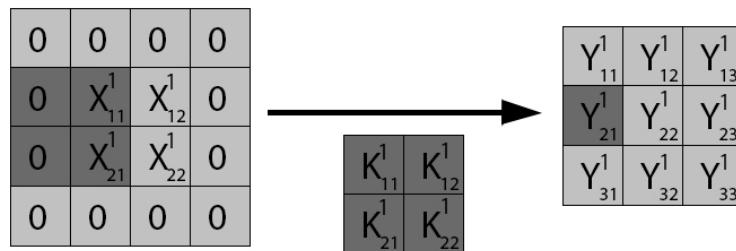


Figura E.12: Retropropagación de Y_{21}^c

Se calculará el gradiente de Y_{21}^c con respecto a cada peso utilizando las fórmulas E.66 y E.67.

$$Y_{21}^c = Z_{11}^c * K_{12}^c + Z_{21}^c * K_{22}^c \quad (\text{E.64})$$

$$\frac{\partial Y_{21}^c}{\partial K_{xy}^c} = \frac{\partial (Z_{11}^c * K_{12}^c + Z_{21}^c * K_{22}^c)}{\partial K_{xy}^c} \quad (\text{E.65})$$

$$\frac{\partial Y_{21}^c}{\partial K_{11}^c} = 0, \quad \frac{\partial Y_{21}^c}{\partial K_{12}^c} = Z_{11}^c \quad (\text{E.66})$$

$$\frac{\partial Y_{21}^c}{\partial K_{21}^c} = 0, \quad \frac{\partial Y_{21}^c}{\partial K_{22}^c} = Z_{21}^c \quad (\text{E.67})$$

Además, se calculará el gradiente de Y_{21}^c con respecto a cada valor del volumen de entrada utilizando las fórmulas E.68 y E.2.4.

$$\frac{\partial Y_{21}^c}{\partial Z_{11}^c} = K_{12}^c, \quad \frac{\partial Y_{21}^c}{\partial Z_{12}^c} = 0 \quad (\text{E.68})$$

$$\frac{\partial Y_{21}^c}{\partial Z_{21}^c} = K_{22}^c, \quad \frac{\partial Y_{21}^c}{\partial Z_{22}^c} = 0 \quad (\text{E.69})$$

E.2.5. Gradiente de Y_{22}^c

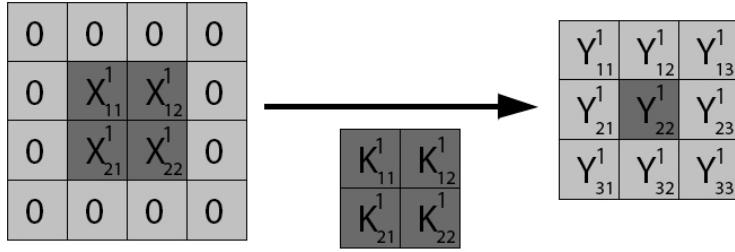


Figura E.13: Retropropagación de Y_{22}^c

Se calculará el gradiente de Y_{22}^c con respecto a cada peso utilizando las fórmulas E.72 y E.73.

$$Y_{22}^c = Z_{11}^c * K_{11}^c + Z_{12}^c * K_{12}^c + Z_{21}^c * K_{21}^c + Z_{22}^c * K_{22}^c \quad (\text{E.70})$$

$$\frac{\partial Y_{22}^c}{\partial K_{xy}^c} = \frac{\partial (Z_{11}^c * K_{11}^c + Z_{12}^c * K_{12}^c + Z_{21}^c * K_{21}^c + Z_{22}^c * K_{22}^c)}{\partial K_{xy}^c} \quad (\text{E.71})$$

$$\frac{\partial Y_{22}^c}{\partial K_{11}^c} = Z_{11}^c, \quad \frac{\partial Y_{22}^c}{\partial K_{12}^c} = Z_{12}^c \quad (\text{E.72})$$

$$\frac{\partial Y_{22}^c}{\partial K_{21}^c} = Z_{21}^c, \quad \frac{\partial Y_{22}^c}{\partial K_{22}^c} = Z_{22}^c \quad (\text{E.73})$$

Asimismo, se calculará el gradiente de Y_{22}^c con respecto a cada valor del volumen de entrada mediante las fórmulas E.74 y E.75.

$$\frac{\partial Y_{22}^c}{\partial Z_{11}^c} = K_{11}^c, \quad \frac{\partial Y_{22}^c}{\partial Z_{12}^c} = K_{12}^c \quad (\text{E.74})$$

$$\frac{\partial Y_{22}^c}{\partial Z_{21}^c} = K_{21}^c, \quad \frac{\partial Y_{22}^c}{\partial Z_{22}^c} = K_{22}^c. \quad (\text{E.75})$$

E.2.6. Gradiente de Y_{23}^c

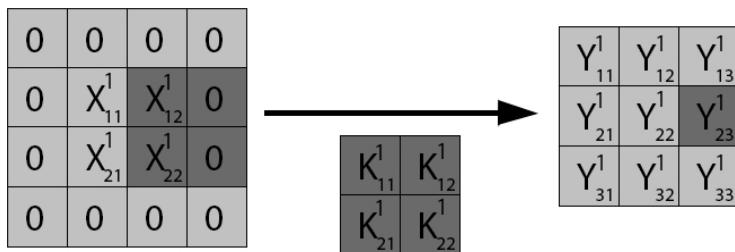


Figura E.14: Retropropagación de Y_{23}^c

Se calculará el gradiente de Y_{23}^c con respecto a cada peso utilizando las fórmulas E.78 y E.79.

$$Y_{23}^c = Z_{12}^c * K_{11}^c + Z_{22}^c * K_{21}^c \quad (\text{E.76})$$

$$\frac{\partial Y_{23}^c}{\partial K_{xy}^c} = \frac{\partial(Z_{12}^c * K_{11}^c + Z_{22}^c * K_{21}^c)}{\partial K_{xy}^c} \quad (\text{E.77})$$

$$\frac{\partial Y_{23}^c}{\partial K_{11}^c} = Z_{12}^c, \quad \frac{\partial Y_{23}^c}{\partial K_{12}^c} = 0 \quad (\text{E.78})$$

$$\frac{\partial Y_{23}^c}{\partial K_{21}^c} = Z_{22}^c, \quad \frac{\partial Y_{23}^c}{\partial K_{22}^c} = 0 \quad (\text{E.79})$$

De igual manera, se calculará el gradiente de Y_{23}^c con respecto a cada valor del volumen de entrada mediante las fórmulas E.74 y E.75.

$$\frac{\partial Y_{23}^c}{\partial Z_{11}^c} = 0, \quad \frac{\partial Y_{23}^c}{\partial Z_{12}^c} = K_{11}^c \quad (\text{E.80})$$

$$\frac{\partial Y_{23}^c}{\partial Z_{21}^c} = 0, \quad \frac{\partial Y_{23}^c}{\partial Z_{22}^c} = K_{21}^c \quad (\text{E.81})$$

E.2.7. Gradiente de Y_{31}^c

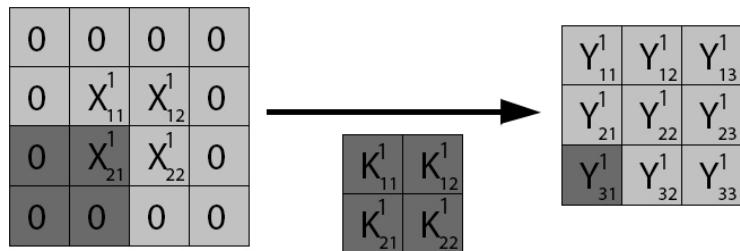


Figura E.15: Retropropagación de Y_{31}^c

Se calculará el gradiente de Y_{31}^c con respecto a cada peso utilizando las fórmulas E.84 y E.85.

$$Y_{31}^c = Z_{21}^c * K_{12}^c \quad (\text{E.82})$$

$$\frac{\partial Y_{31}^c}{\partial K_{xy}^c} = \frac{\partial(Z_{21}^c * K_{12}^c)}{\partial K_{xy}^c} \quad (\text{E.83})$$

$$\frac{\partial Y_{31}^c}{\partial K_{11}^c} = 0, \quad \frac{\partial Y_{31}^c}{\partial K_{12}^c} = Z_{21}^c \quad (\text{E.84})$$

$$\frac{\partial Y_{31}^c}{\partial K_{21}^c} = 0, \quad \frac{\partial Y_{31}^c}{\partial K_{22}^c} = 0 \quad (\text{E.85})$$

Asimismo, se calculará el gradiente de Y_{31}^c con respecto a cada valor del volumen de entrada mediante las fórmulas E.86 y E.87.

$$\frac{\partial Y_{31}^c}{\partial Z_{11}^c} = 0, \quad \frac{\partial Y_{31}^c}{\partial Z_{12}^c} = 0 \quad (\text{E.86})$$

$$\frac{\partial Y_{31}^c}{\partial Z_{21}^c} = K_{12}^c, \quad \frac{\partial Y_{31}^c}{\partial Z_{22}^c} = 0 \quad (\text{E.87})$$

E.2.8. Gradiente de Y_{32}^c

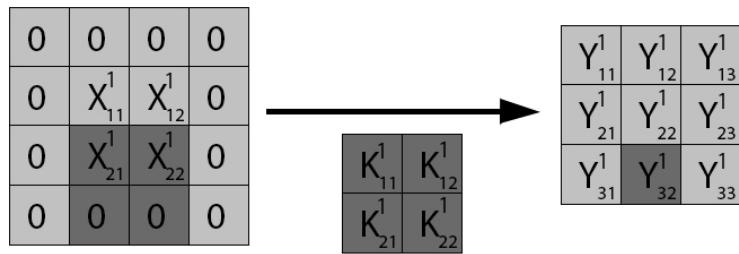


Figura E.16: Retropropagación de Y_{32}^c

Se calculará el gradiente de Y_{32}^c con respecto a cada peso utilizando las fórmulas E.90 y E.91.

$$Y_{32}^c = Z_{21}^c * K_{11}^c + Z_{22}^c * K_{12}^c \quad (\text{E.88})$$

$$\frac{\partial Y_{32}^c}{\partial K_{xy}^c} = \frac{\partial(Z_{21}^c * K_{11}^c + Z_{22}^c * K_{12}^c)}{\partial K_{xy}^c} \quad (\text{E.89})$$

$$\frac{\partial Y_{32}^c}{\partial K_{11}^c} = Z_{21}^c, \quad \frac{\partial Y_{32}^c}{\partial K_{12}^c} = Z_{22}^c \quad (\text{E.90})$$

$$\frac{\partial Y_{32}^c}{\partial K_{21}^c} = 0, \quad \frac{\partial Y_{32}^c}{\partial K_{22}^c} = 0 \quad (\text{E.91})$$

Además, se calculará el gradiente de Y_{32}^c con respecto a cada valor del volumen de entrada mediante las fórmulas E.92 y E.93.

$$\frac{\partial Y_{32}^c}{\partial Z_{11}^c} = 0, \quad \frac{\partial Y_{32}^c}{\partial Z_{12}^c} = 0 \quad (\text{E.92})$$

$$\frac{\partial Y_{32}^c}{\partial Z_{21}^c} = K_{11}^c, \quad \frac{\partial Y_{32}^c}{\partial Z_{22}^c} = K_{12}^c \quad (\text{E.93})$$

E.2.9. Gradiente de Y_{33}^c

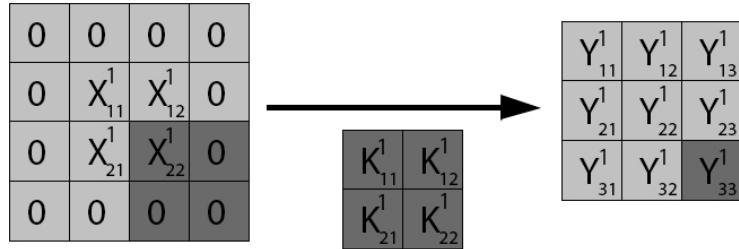


Figura E.17: Retropropagación de Y_{33}^c

Se calculará el gradiente de Y_{33}^c con respecto a cada peso utilizando las fórmulas E.96 y E.97.

$$Y_{33}^c = Z_{22}^c * K_{11}^c \quad (\text{E.94})$$

$$\frac{\partial Y_{33}^c}{\partial K_{xy}^c} = \frac{\partial (Z_{22}^c * K_{11}^c)}{\partial K_{xy}^c} \quad (\text{E.95})$$

$$\frac{\partial Y_{33}^c}{\partial K_{11}^c} = Z_{22}^c, \quad \frac{\partial Y_{33}^c}{\partial K_{12}^c} = 0 \quad (\text{E.96})$$

$$\frac{\partial Y_{33}^c}{\partial K_{21}^c} = 0, \quad \frac{\partial Y_{33}^c}{\partial K_{22}^c} = 0 \quad (\text{E.97})$$

Asimismo, se calculará el gradiente de Y_{33}^c con respecto a cada valor del volumen de entrada utilizando las fórmulas E.98 y E.99.

$$\frac{\partial Y_{33}^c}{\partial Z_{11}^c} = 0, \quad \frac{\partial Y_{33}^c}{\partial Z_{12}^c} = 0 \quad (\text{E.98})$$

$$\frac{\partial Y_{33}^c}{\partial Z_{21}^c} = 0, \quad \frac{\partial Y_{33}^c}{\partial Z_{22}^c} = K_{11}^c \quad (\text{E.99})$$

E.2.10. Gradiente respecto a pesos como convolución

Finalmente, de manera similar al caso anterior, se calcula la sumatoria de los gradientes y, con ello, el gradiente de la función de pérdida con respecto a cada peso K_{xy} . Nuevamente, se identifica un patrón claro en los resultados obtenidos.

$$\frac{\partial E}{\partial K_{11}^c} = \frac{\partial E}{\partial Y_{22}^c} * Z_{11}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{23}^c} * Z_{12}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{32}^c} * Z_{21}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{33}^c} * Z_{22}^c \quad (\text{E.100})$$

$$\frac{\partial E}{\partial K_{12}^c} = \frac{\partial E}{\partial Y_{21}^c} * Z_{11}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{22}^c} * Z_{12}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{31}^c} * Z_{21}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{32}^c} * Z_{22}^c \quad (\text{E.101})$$

$$\frac{\partial E}{\partial K_{21}^c} = \frac{\partial E}{\partial Y_{12}^c} * Z_{11}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{13}^c} * Z_{12}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{22}^c} * Z_{21}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{23}^c} * Z_{22}^c \quad (\text{E.102})$$

$$\frac{\partial E}{\partial K_{22}^c} = \frac{\partial E}{\partial Y_{11}^c} * Z_{11}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{12}^c} * Z_{12}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{21}^c} * Z_{21}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{22}^c} * Z_{22}^c \quad (\text{E.103})$$

Como se puede observar en los cálculos obtenidos (véanse las fórmulas E.100, E.101, E.102, y E.103), estos coinciden con una convolución entre la entrada X con relleno, y el gradiente con respecto a la capa de salida Y, como se ilustra en la Figura E.18. Como era de esperar, los resultados son equivalentes a los obtenidos en el caso anterior, con la única diferencia de que ahora se emplea X con relleno en lugar de X sin relleno para realizar la convolución.

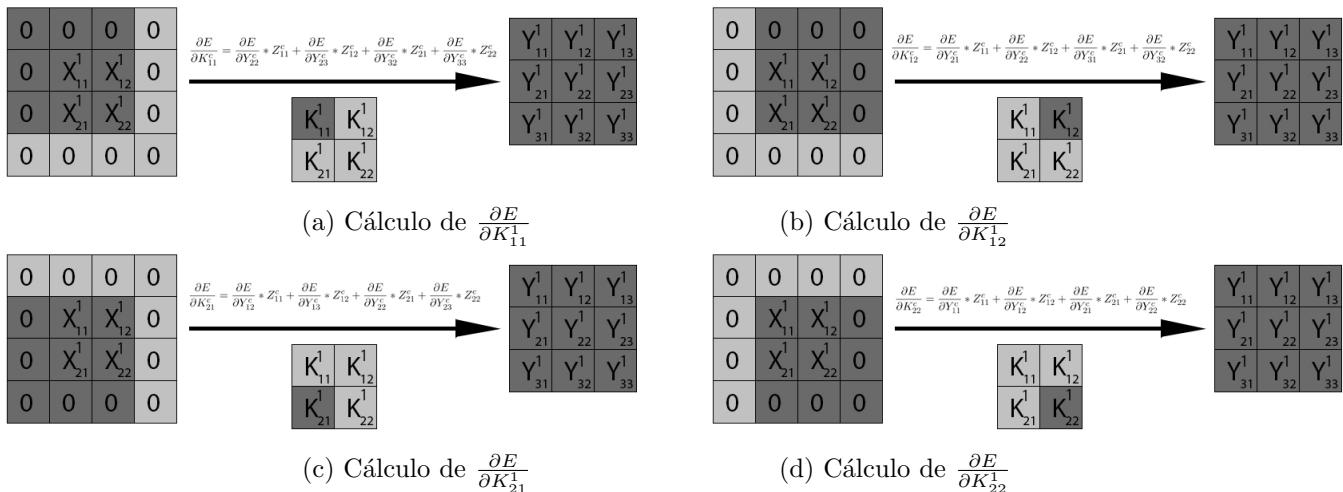


Figura E.18: Cálculo del gradiente de la pérdida con respecto a cada filtro como convolución entre X e Y

E.2.11. Gradiente respecto a entrada como convolución

Una vez más, se utilizará la función de activación ReLU en las capas convolucionales, conforme a lo discutido anteriormente. Por consiguiente, la derivada de esta función ya ha sido determinada previamente (véase la fórmula D.35).

$$\frac{\partial E}{\partial A_{11}^c} = (\frac{\partial E}{\partial Y_{11}^c} * K_{22}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{12}^c} * K_{21}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{21}^c} * K_{12}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{22}^c} * K_{11}^c) * \text{ReLU}'(A_{11}^c) \quad (\text{E.104})$$

$$\frac{\partial E}{\partial A_{12}^c} = (\frac{\partial E}{\partial Y_{12}^c} * K_{22}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{13}^c} * K_{21}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{22}^c} * K_{12}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{23}^c} * K_{11}^c) * \text{ReLU}'(A_{12}^c) \quad (\text{E.105})$$

$$\frac{\partial E}{\partial A_{21}^c} = (\frac{\partial E}{\partial Y_{21}^c} * K_{22}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{22}^c} * K_{21}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{31}^c} * K_{12}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{32}^c} * K_{11}^c) * \text{ReLU}'(A_{21}^c) \quad (\text{E.106})$$

$$\frac{\partial E}{\partial A_{22}^c} = (\frac{\partial E}{\partial Y_{22}^c} * K_{22}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{23}^c} * K_{21}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{32}^c} * K_{12}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{33}^c} * K_{11}^c) * \text{ReLU}'(A_{22}^c) \quad (\text{E.107})$$

Como se observa en los cálculos obtenidos (véanse las fórmulas E.104, E.105, E.106, y E.107), los resultados coinciden con una convolución entre el gradiente con respecto a la capa de salida Y y los pesos K, invertidos tanto horizontal como verticalmente. Este proceso se ilustra en detalle en la figura E.19.

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline Y_{11}^1 & Y_{12}^1 & Y_{13}^1 \\ \hline Y_{21}^1 & Y_{22}^1 & Y_{23}^1 \\ \hline Y_{31}^1 & Y_{32}^1 & Y_{33}^1 \\ \hline \end{array}$$

$$\frac{\partial E}{\partial A_{11}^c} = (\frac{\partial E}{\partial Y_{11}^c} * K_{22}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{12}^c} * K_{21}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{21}^c} * K_{12}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{22}^c} * K_{11}^c) * \text{ReLU}'(A_{11}^c)$$

$$(a) \text{ Cálculo de } \frac{\partial E}{\partial A_{11}^c}$$

$$\begin{array}{|c|c|} \hline X_{11}^1 & X_{12}^1 \\ \hline X_{21}^1 & X_{22}^1 \\ \hline \end{array}$$

$$(a) \text{ Cálculo de } \frac{\partial E}{\partial A_{11}^c}$$

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline Y_{11}^1 & Y_{12}^1 & Y_{13}^1 \\ \hline Y_{21}^1 & Y_{22}^1 & Y_{23}^1 \\ \hline Y_{31}^1 & Y_{32}^1 & Y_{33}^1 \\ \hline \end{array}$$

$$(b) \text{ Cálculo de } \frac{\partial E}{\partial A_{12}^c}$$

$$\begin{array}{|c|c|} \hline X_{11}^1 & X_{12}^1 \\ \hline X_{21}^1 & X_{22}^1 \\ \hline \end{array}$$

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline Y_{11}^1 & Y_{12}^1 & Y_{13}^1 \\ \hline Y_{21}^1 & Y_{22}^1 & Y_{23}^1 \\ \hline Y_{31}^1 & Y_{32}^1 & Y_{33}^1 \\ \hline \end{array}$$

$$\frac{\partial E}{\partial A_{21}^c} = (\frac{\partial E}{\partial Y_{21}^c} * K_{22}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{22}^c} * K_{21}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{31}^c} * K_{12}^c + \frac{\partial E}{\partial Y_{32}^c} * K_{11}^c) * \text{ReLU}'(A_{21}^c)$$

$$(c) \text{ Cálculo de } \frac{\partial E}{\partial A_{21}^c}$$

$$\begin{array}{|c|c|} \hline X_{11}^1 & X_{12}^1 \\ \hline X_{21}^1 & X_{22}^1 \\ \hline \end{array}$$

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline Y_{11}^1 & Y_{12}^1 & Y_{13}^1 \\ \hline Y_{21}^1 & Y_{22}^1 & Y_{23}^1 \\ \hline Y_{31}^1 & Y_{32}^1 & Y_{33}^1 \\ \hline \end{array}$$

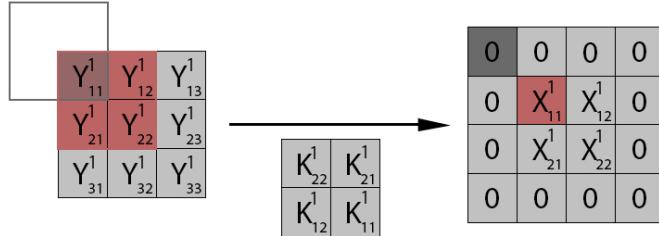
$$(d) \text{ Cálculo de } \frac{\partial E}{\partial A_{22}^c}$$

$$\begin{array}{|c|c|} \hline X_{11}^1 & X_{12}^1 \\ \hline X_{21}^1 & X_{22}^1 \\ \hline \end{array}$$

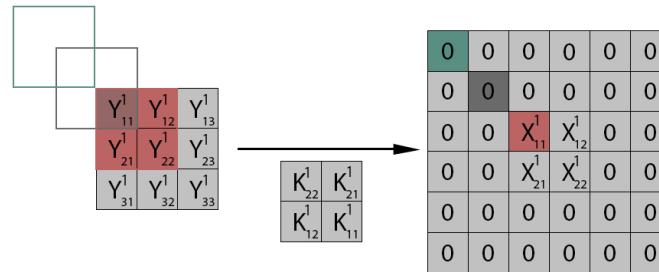
Figura E.19: Cálculo del gradiente de la pérdida con respecto a la entrada como convolución

Una vez desarrolladas ambas retropropagaciones en una capa convolucional, tanto con relleno como sin relleno, se pueden comparar las figuras E.7 y E.19. En ambas representaciones, se calcula el gradiente de la pérdida con respecto al volumen de entrada. No obstante, se observa que en la primera

figura se utiliza una convolución con relleno completo sobre el volumen Y (volumen de salida de la capa), mientras que en la segunda figura se aplica una convolución sin relleno.



(a) Retropropagación con un nivel de relleno



(b) Retropropagación con dos niveles de relleno

Figura E.20: Cálculo del gradiente de la pérdida con respecto a la entrada X con uno y dos niveles de relleno

La razón detrás de esta diferencia se detalla en la figura E.20. En el caso de una convolución con relleno completo, los gradientes se calculan comenzando desde la esquina superior izquierda de X. Sin embargo, dado que X incluye relleno, no es necesario calcular los gradientes en las posiciones de relleno, ya que estos valores no influyen en los cálculos posteriores.

Bibliografía

- [1] NVIDIA. Linear/fully-connected layers user's guide, 2024. <https://docs.nvidia.com/deeplearning/performance/dl-performance-fully-connected/index.html> [Accessed:11/05/2024].
- [2] Prakash Jay. Back-propagation is very simple. who made it complicated ?, 2017. <https://medium.com/@14prakash/back-propagation-is-very-simple-who-made-it-complicated-97b794c97e5c> [Accessed:06/03/2024].
- [3] Chamanth mvs. No more confusion on back-propagation, 2022. <https://pub.aimind.so/no-more-confusion-on-backpropagation-7adfc271539f> [Accessed:07/03/2024].
- [4] Amazon. ¿qué es una unidad central de procesamiento (cpu)?, 2024. <https://aws.amazon.com/es/what-is/cpu/> [Accessed:15/08/2024].
- [5] Amazon. ¿qué es una gpu?, 2024. <https://aws.amazon.com/es/what-is/gpu/> [Accessed:15/08/2024].
- [6] Patricio Bulić. Heterogeneous systems, 2024. <https://doc.sling.si/en/workshops/programming-gpu-cuda/01-intro/02-hetsys/#:~:text=A%20homogeneous%20system%20uses%20one,%2Ds suited%2C%20yielding%20performance%20improvement.> [Accessed:15/08/2024].
- [7] Ty McKercher John Cheng, Max Grossman. *Professional Cuda C Programming*. John Wiley and Sons, Inc., 10475 Crosspoint Boulevard, 1 edition, 2014.
- [8] IBM. What are convolutional neural networks?, 2024. <https://www.ibm.com/topics/convolutional-neural-networks> [Accessed:15/08/2024].
- [9] Izzat El Hajj Wen-emi W.Hwu, David B.kirk. *Programming Massively Parallel Processors*. Morgan Kaufmann, 50 Hampshire Street, 5th Floor, Cambridge, MA 02139, United States, 4 edition, 2022.

- [10] IBM. ¿qué es el machine learning (ml)?, 2024. <https://www.ibm.com/es-es/topics/machine-learning> [Accessed:15/08/2024].
- [11] IBM. ¿qué es el deep learning?, 2024. <https://www.ibm.com/es-es/topics/deep-learning> [Accessed:15/08/2024].
- [12] Mohdsanadzakirizvi. Image classification using cnn, 2024. <https://www.analyticsvidhya.com/blog/2020/02/learn-image-classification-cnn-convolutional-neural-networks-3-datasets/> [Accessed:15/08/2024].
- [13] Microsoft. ¿qué es la visión artificial?, 2024. <https://azure.microsoft.com/es-es/resources/cloud-computing-dictionary/what-is-computer-vision#clasificaci%C3%B3n-de-objetos> [Accessed:15/08/2024].
- [14] Yi Wang Jusong Ren. Overview of object detection algorithms using convolutional neural networks, 2024. <https://www.scirp.org/journal/paperinformation?paperid=115011> [Accessed:15/08/2024].
- [15] Shameerayaseen. U-net: Advancing image segmentation with convolutional neural networks, 2023. <https://medium.com/@shameerayaseen21/u-net-advancing-image-segmentation-with-convolutional-neural-networks-1fd81> [Accessed:15/08/2024].
- [16] Ying Nian Wu Jifeng Dai, Yang Lu. Generative modeling of convolutional neural networks, 2023. <http://www.stat.ucla.edu/~ywu/generativeCNN/main.html> [Accessed:15/08/2024].
- [17] Intel. Convolutional neural networks (cnns), deep learning, and computer vision, 2024. <https://www.intel.com/content/www/us/en/internet-of-things/computer-vision/convolutional-neural-networks.html> [Accessed:15/08/2024].
- [18] Taha Binhuraib. Nlp with cnns, 2020. <https://towardsdatascience.com/nlp-with-cnns-a6aa743bdc1e> [Accessed:15/08/2024].
- [19] Augmented AI. Convolutional neural networks (cnn) in self-driving cars, 2024. <https://www.augmentedstartups.com/blog/convolutional-neural-networks-cnn-in-self-driving-cars#:~:text=They%20have%20the%20potential%20to,decisions%20based%20on%20the%20environment.> [Accessed:15/08/2024].
- [20] OpeMP. Openmp, 2024. <https://www.openmp.org/> [Accessed:15/08/2024].

- [21] NVIDIA. Cuda toolkit, 2024. <https://developer.nvidia.com/cuda-toolkit> [Accessed:15/08/2024].
- [22] NVIDIA. Nvidia cudnn, 2024. <https://developer.nvidia.com/cudnn> [Accessed:02/08/2024].
- [23] Caffe2. What is caffe2?, 2024. <https://caffe2.ai/docs/caffe-migration.html> [Accessed:15/08/2024].
- [24] Keras. Keras, 2024. <https://keras.io/> [Accessed:15/08/2024].
- [25] Mathworks. Matlab, 2024. <https://la.mathworks.com/products/matlab.html> [Accessed:15/08/2024].
- [26] Pytorch. Pytorch, 2024. <https://pytorch.org/> [Accessed:15/08/2024].
- [27] Tensorflow. Tensorflow, 2024. <https://www.tensorflow.org/?hl=es-419> [Accessed:15/08/2024].
- [28] NVIDIA. Nvidia cudnn, 2024. <https://docs.nvidia.com/deeplearning/cudnn/latest/developer/overview.html#dev-overview> [Accessed:02/08/2024].
- [29] Hsuan-Tien Lin Yaser S. Abu-Mostafa, Malik Magdon-Ismail. *Learning From Data*. California Institute of Technology Pasadena, CA 91125, USA, 1 edition, 2012.
- [30] IBM. ¿qué es el aprendizaje supervisado?, 2024. <https://www.ibm.com/es-es/topics/supervised-learning> [Accessed:22/08/2024].
- [31] Interactive Chaos. ¿qué es el aprendizaje supervisado?, 2024. <https://interactivechaos.com/es/manual/tutorial-de-machine-learning/etiquetas> [Accessed:22/08/2024].
- [32] IBM. ¿qué son las redes neuronales?, 2024. <https://www.ibm.com/es-es/topics/neural-networks#:~:text=%C2%BFQu%C3%A9%20son%20las%20redes%20neuronales,opciones%20y%20llegar%20a%20conclusiones.> [Accessed:10/08/2024].
- [33] Sakshi Tiwari. Funciones de activación en redes neuronales, 2024. <https://www.geeksforgeeks.org/activation-functions-neural-networks/> [Accessed:10/08/2024].
- [34] Douglas Karr. Unidad lineal rectificada, 2024. <https://es.martech.zone/acronym/relu/> [Accessed:25/02/2024].

- [35] Jorge Calvo Martin. La importancia de las funciones de activación en una red neuronal, 2022. <https://www.linkedin.com/pulse/la-importancia-de-las-funciones-activaci%C3%B3n-en-una-red-calvo-martin/> [Accessed:10/06/2024].
- [36] Miguel Sotaquirá. La función de activación, 2018. <https://www.codificandobits.com/blog/funcion-de-activacion/> [Accessed:10/06/2024].
- [37] Javi. La función sigmoide: Una herramienta clave en redes neuronales, 2023. <https://jacar.es/la-funcion-sigmoide-una-herramienta-clave-en-redes-neuronales/> [Accessed:25/02/2024].
- [38] Jason Brownlee. Softmax activation function with python, 2020. <https://machinelearningmastery.com/softmax-activation-function-with-python/> [Accessed:24/02/2024].
- [39] Interactive Chaos. One hot encoding, 2024. <https://interactivechaos.com/es/manual/tutorial-de-machine-learning/one-hot-encoding> [Accessed:22/08/2024].
- [40] Saurav Maheshkar. What is cross entropy loss? a tutorial with code, 2023. <https://wandb.ai/sauravmaheshkar/cross-entropy/reports/What-Is-Cross-Entropy-Loss-A-Tutorial-With-Code--VmlldzoxMDA5NTMx#:~:text=Cross%20entropy%20loss%20is%20a,close%20to%20possible%20as%20possible.> [Accessed:29/02/2024].
- [41] Google. Classification: Accuracy, recall, precision, and related metrics, 2024. <https://developers.google.com/machine-learning-crash-course/classification/accuracy-precision-recall> [Accessed:30/08/2024].
- [42] Descenso del gradiente, 2024. https://es.wikipedia.org/wiki/Descenso_del_gradiente#:~:text=El%20descenso%20del%20gradiente%20o,en%20direcci%C3%B3n%20contraria%20al%20gradiente. [Accessed:26/02/2024].
- [43] Gradiente, 2024. <https://es.wikipedia.org/wiki/Gradiente> [Accessed:26/02/2024].
- [44] Robert Kwiatkowski. Gradient descent algorithm — a deep dive, 2021. <https://towardsdatascience.com/gradient-descent-algorithm-a-deep-dive-cf04e8115f21#:~:text=Gradient%20descent%20algorithm%20is%20an%20optimization%20method%20used%20to%20minimize%20a%20function%20by%20iteratively%20adjusting%20the%20parameters%20of%20the%20model%20in%20the%20direction%20of%20the%20negative%20gradient%20of%20the%20function.>

- text=Gradient%20descent%20(GD)%20is%20an,e.g.%20in%20a%
20linear%20regression). [Accessed:26/02/2024].
- [45] Jason Brownlee. Weight initialization for deep learning neural networks, 2021. <https://machinelearningmastery.com/weight-initialization-for-deep-learning-neural-networks/> [Accessed:14/03/2024].
- [46] Sandeep Jain. Kaiming initialization in deep learning, 2023. <https://www.geeksforgeeks.org/kaiming-initialization-in-deep-learning/> [Accessed:14/03/2024].
- [47] Adrian Rosebrock. Understanding weight initialization for neural networks, 2021. <https://pyimagesearch.com/2021/05/06/understanding-weight-initialization-for-neural-networks/> [Accessed:14/03/2024].
- [48] Yahia Zakaria. Initial bias values for a neural network, 2017. <https://stackoverflow.com/questions/44883861/initial-bias-values-for-a-neural-network> [Accessed:14/03/2024].
- [49] Glen Meyerowitz. Bias initialization in a neural network, 2018. <https://medium.com/@glenmeyerowitz/bias-initialization-in-a-neural-network-2e5d26fed0f0> [Accessed:14/03/2024].
- [50] ml4a. How neural networks are trained, 2020. https://ml4a.github.io/ml4a/how_neural_networks_are_trained/ [Accessed:27/02/2024].
- [51] Sebastian Raschka. How is stochastic gradient descent implemented in the context of machine learning and deep learning?, 2024. <https://sebastianraschka.com/faq/docs/sgd-methods.html> [Accessed:27/03/2024].
- [52] Wikipedia. Stochastic gradient descent, 2024. https://en.wikipedia.org/wiki/Stochastic_gradient_descent [Accessed:22/03/2024].
- [53] Aishwarya V Srinivasan. Stochastic gradient descent — clearly explained !!, 2019. <https://towardsdatascience.com/stochastic-gradient-descent-clearly-explained-53d239905d31> [Accessed:22/03/2024].
- [54] mehran@mldawn.com. Back-propagation through cross-entropy softmax, 2021. <https://www.mldawn.com/>

- back-propagation-with-cross-entropy-and-softmax/ [Accessed:29/02/2024].
- [55] mehran@mldawn.com. The derivative of softmax function wrt z, 2021. <https://www.mldawn.com/the-derivative-of-softmaxz-function-w-r-t-z/> [Accessed:05/03/2024].
- [56] Afshin Amidi y Shervine Amidi. Convolutional neural networks cheatsheet, 2018. <https://stanford.edu/~shervine/teaching/cs-230/cheatsheet-convolutional-neural-networks> [Accessed:19/03/2024].
- [57] Stanford. Convolutional neural networks (cnns / convnets), 2020. <https://cs231n.github.io/convolutional-networks/> [Accessed:19/03/2024].
- [58] DeepAI. Understanding padding in machine learning, 2024. <https://deepai.org/machine-learning-glossary-and-terms/padding> [Accessed:23/08/2024].
- [59] savyakhosla. Cnn — introduction to padding, 2024. <https://www.geeksforgeeks.org/cnn-introduction-to-padding/> [Accessed:02/04/2024].
- [60] Avinash Kumar. Full padding, 2020. https://www.researchgate.net/figure/Full-padding-and-same-padding-10_fig5_337287600 [Accessed:23/08/2024].
- [61] Avinash Kumar, Sobhangi Sarkar, and Chittaranjan Pradhan. *Malaria Disease Detection Using CNN Technique with SGD, RMSprop and ADAM Optimizers*, pages 211–230. 01 2020.
- [62] Hide Inada. Calculate cnn backprop with padding and stride set to 2, 2024. https://hideyukiinada.github.io/cnn_backprop_strides2.html [Accessed:01/04/2024].
- [63] Archana David. Backprop through max-pooling layers?, 2007. <https://datascience.stackexchange.com/questions/11699/backprop-through-max-pooling-layers> [Accessed:24/03/2024].
- [64] Muhammad Baqir. How to backpropagate through max-pooling layers, 2024. <https://www.educative.io/answers/how-to-backpropagate-through-max-pooling-layers> [Accessed:24/03/2024].
- [65] Piotr Skalski. Let's code convolutional neural network in plain numpy, 2020. <https://towardsdatascience.com/>

- lets-code-convolutional-neural-network-in-plain-numpy-ce48e732f5d5 [Accessed:24/03/2024].
- [66] Arnab Chakraborty. What is openmp?, 2019. <https://www.tutorialspoint.com/what-is-openmp> [Accessed:24/08/2024].
- [67] Microsoft. Directivas de openmp, 2024. <https://learn.microsoft.com/es-es/cpp/parallel/openmp/reference/openmp-directives?view=msvc-170> [Accessed:24/08/2024].
- [68] NVIDIA. Cuda c++ programming guide, 2024. <https://docs.nvidia.com/cuda/cuda-c-programming-guide/index.html> [Accessed:24/08/2024].
- [69] NVIDIA. Nvidia cudnn, 2024. <https://docs.nvidia.com/deeplearning/cudnn/latest/developer/core-concepts.html> [Accessed:02/08/2024].
- [70] NVIDIA. Nvidia cudnn, 2024. <https://docs.nvidia.com/deeplearning/cudnn/latest/api/cudnn-cnn-library.html#cudnnconvolutionforward> [Accessed:03/08/2024].
- [71] NVIDIA. Nvidia cudnn, 2024. <https://docs.nvidia.com/deeplearning/cudnn/archives/cudnn-897/api/index.html#cudnnPoolingForward> [Accessed:03/08/2024].
- [72] NVIDIA. Nvidia cudnn, 2024. <https://docs.nvidia.com/deeplearning/cudnn/latest/api/cudnn-cnn-library.html#cudnnconvolutionbackwardfilter> [Accessed:03/08/2024].
- [73] NVIDIA. Nvidia cudnn, 2024. <https://docs.nvidia.com/deeplearning/cudnn/latest/api/cudnn-cnn-library.html#cudnnconvolutionbackwarddata> [Accessed:03/08/2024].
- [74] Lei Mao. Data parallelism vs model parallelism in distributed deep learning training, 2024. <https://leimao.github.io/blog/Data-Parallelism-vs-Model-Paralelism/> [Accessed:25/08/2024].
- [75] PureStorage. What is model parallelism?, 2024. <https://www.purestorage.com/knowledge/what-is-model-parallelism.html> [Accessed:25/08/2024].
- [76] Vishakh Hegde and Sheema Usmani. Parallel and distributed deep learning. 2016.
- [77] Sunwoo Lee, Dipendra Jha, Ankit Agrawal, Alok Choudhary, and Weikeng Liao. Parallel deep convolutional neural network training by exploiting the overlapping of computation and communication. In *2017*

- IEEE 24th International Conference on High Performance Computing (HiPC)*, pages 183–192, 2017.
- [78] Alex Krizhevsky. One weird trick for parallelizing convolutional neural networks. *ArXiv*, abs/1404.5997, 2014.
 - [79] Stanford University. General matrix multiply (gemm), 2018. <https://spatial-lang.org/gemm> [Accessed:25/08/2024].
 - [80] H. Howie Huang¶ Zhufan Wang†‡ Weimin Zheng†‡ †Department of Computer Science Xiaqing Li†§, Guangyan Zhang†§, Tsinghua University ‡Tsinghua National Laboratory for Information Science Technology §State Key Lab of Mathematical Engineering, China ¶Department of Electrical Advanced Computing, Wuxi, and George Washington University Computer Engineering. Performance analysis of gpu-based convolutional neural networks. *International Conference on Parallel Processing*, 2016.
 - [81] Mary Thomas. Comp 605: Introduction to parallel computing lecture : Cuda matrix-matrix multiplication, 2017. <https://edoras.sdsu.edu/~mthomas/sp17.605/lectures/CUDA-Mat-Mat-Mult.pdf> [Accessed:10/05/2024].
 - [82] NVIDIA. Matrix multiplication background, user’s guide — nvidia docs, 2023. <https://docs.nvidia.com/deeplearning/performance/pdf/Matrix-Multiplication-Background-User-Guide.pdf> [Accessed:10/05/2024].
 - [83] Alex Krizhevsky. Cifar10 dataset, 2009. <https://www.cs.toronto.edu/~kriz/cifar.html> [Accessed:30/08/2024].
 - [84] Guerry. 10 big cats of the wild - image classification, 2022. <https://www.kaggle.com/datasets/gpiosenka/cats-in-the-wild-image-classification> [Accessed:30/08/2024].

