UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

Redes Neuronales Artificiales (ANN)

Diego Armando Pérez Rosero ·, Santiago Pineda Quintero

Departamento de Ingeniería Eléctrica, Electrónica y Computación
Universidad Nacional de Colombia
Manizales, Colombia
Septiembre 2023

Contenido

1 Repaso

2 Modelo Computacional de una Neurona

3 Funciones de Costo

Definiciones

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

- En aprendizaje de máquina (AM), un **modelo** es el elemento donde se almacena el aprendizaje.
- Los modelos de AM necesitan un conjunto de datos para poder aprender los patrones relevantes que ayuden a resolver una tarea. A esto se denomina la **etapa de entrenamiento**
- $f(\mathbf{X}; \theta)$ representa un modelo; donde θ son los parámetros del modelo y representan lo que se aprendió.

Notación

$\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{NxP}$, donde N y P son el número de muestras y atributos respectivamente.

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{np} \end{bmatrix}$$

$\mathbf{X_n} \in \mathbb{R}^{P}$ es una única muestra del conjunto de datos.

$$\mathbf{x}_n = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1p} \end{bmatrix}$$

el subíndice n se utiliza para referirse a una muestra del conjunto de datos.

Notación

$\mathbf{y} \in \Omega^N$ son el conjunto de etiquetas , y su dominio Ω depende de la tarea a resolver. Para tareas de regresión $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^N$, en clasificación sería:

$\mathbf{Y} \in [0,1]^{N \times C}$, para el caso de que se prediga la probabilidad de cada clase.

$\mathbf{y} \in \{0, 1, \ldots, C\}^N$, para el caso de que se predigan directamente las clases.

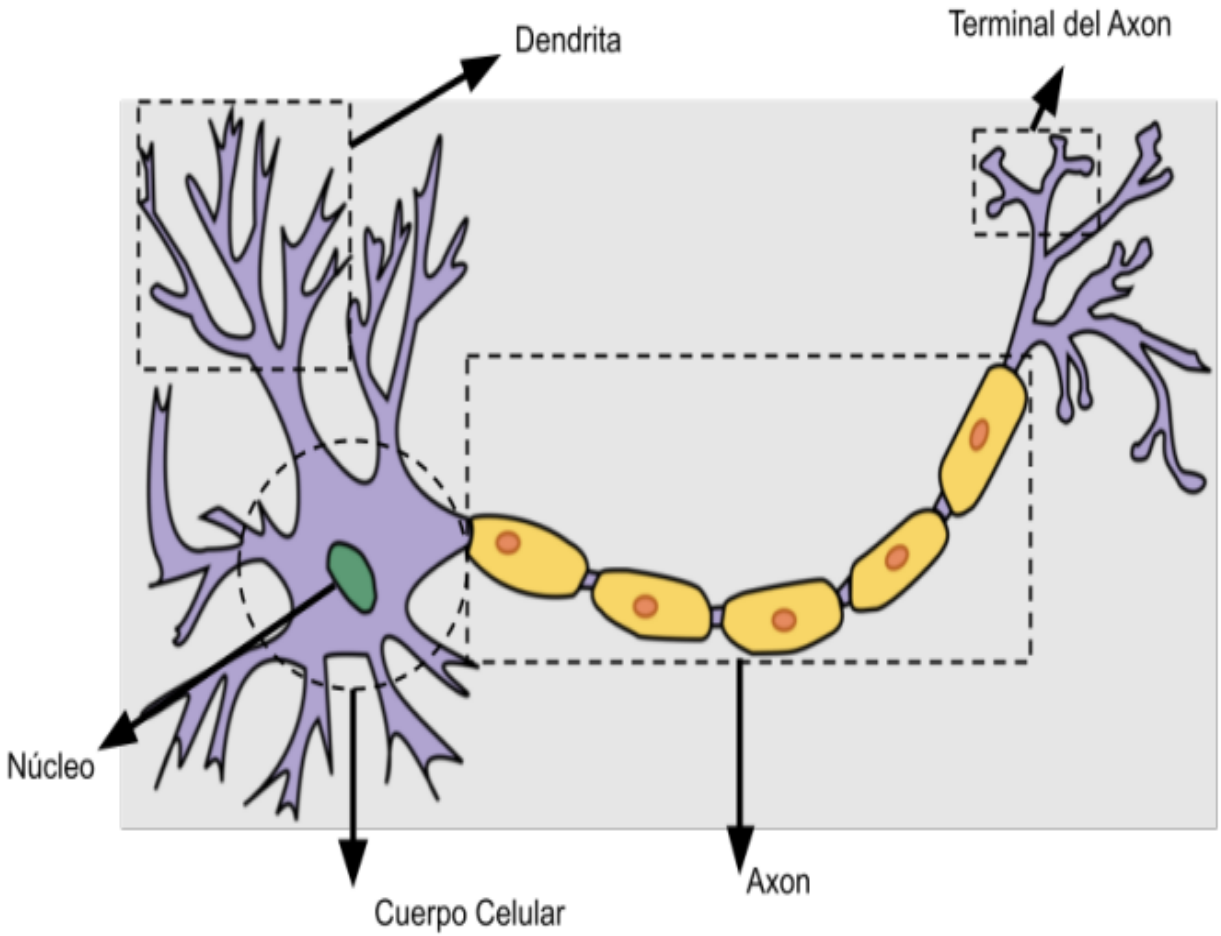
$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ \vdots \\ C \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} P(0|\mathbf{x_1}) & P(1|\mathbf{x_1}) & \cdots & P(C|\mathbf{x_1}) \\ P(0|\mathbf{x_2}) & P(1|\mathbf{x_2}) & \cdots & P(C|\mathbf{x_2}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ P(0|\mathbf{x_n}) & P(1|\mathbf{x_n}) & \cdots & P(C|\mathbf{x_n}) \end{bmatrix}$$

$\mathbf{y}_n \in [0,1]^C$ son las probabilidades de que *una* muestra pertenezca a cada clase.

$$\mathbf{y}_n = \begin{bmatrix} P(0|\mathbf{x_n}) & P(1|\mathbf{x_n}) & \cdots & P(C|\mathbf{x_n}) \end{bmatrix}$$

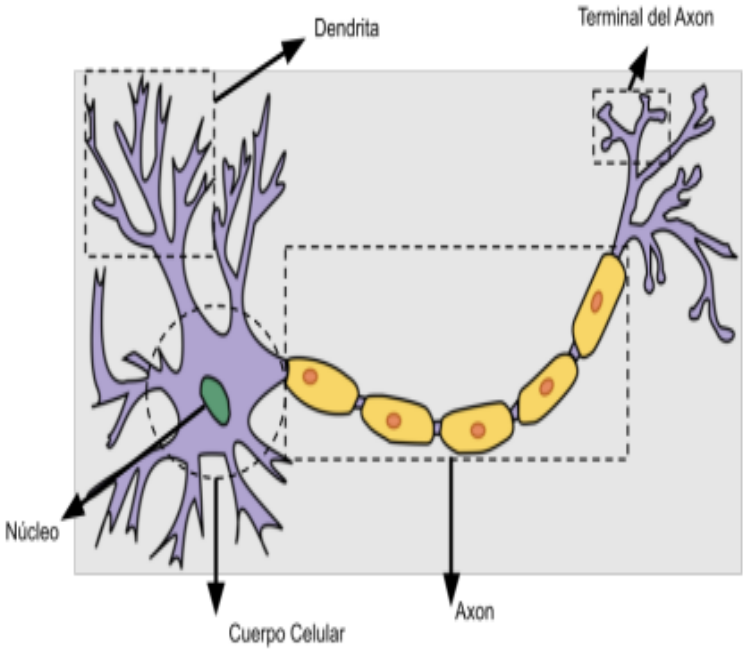
Neurona Biológica



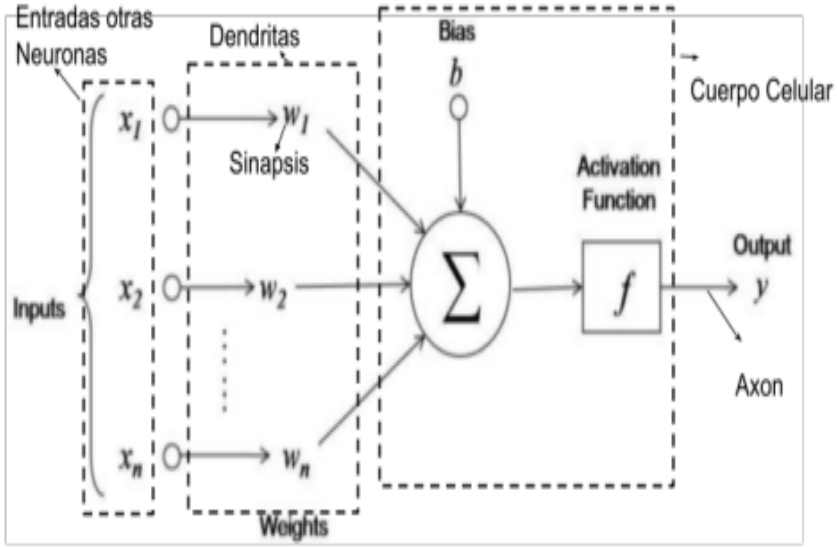
Aproximación matemática de una Neurona

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

Neurona biológica



Modelo computacional neurona



Comparación de Modelos

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

Neurona biológica

1. # de dendritas.
2. Sinapsis.
3. Cuerpo de la neurona.
4. Axón.

Neurona artificial

1. # de características P que tiene cada muestra.

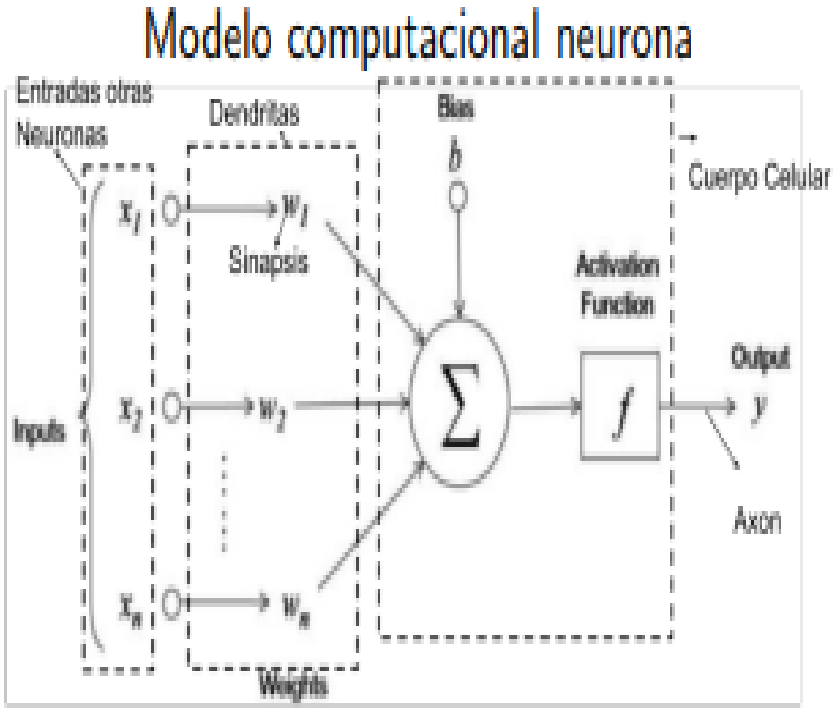
$$\mathbf{x}_n = \begin{bmatrix} x_1 & x_1 & \cdots & x_p \end{bmatrix}^\top$$

2. Los pesos w_i.

$$\mathbf{w} = \begin{bmatrix} w_1 & w_1 & \cdots & w_p \end{bmatrix}^\top$$

3. El sumatorio $\sum$ y la *función de activación* $f(.)$.
4. Salida $\hat{y}$.

Aproximación Matemática Neurona



$$\hat{y} = f(w_1 x_1 + w_2 x_2 + \ldots + w_p x_p + b)$$

$$\hat{y} = f\left(\sum_{i=1}^{P} w_i x_i + b\right)$$

$$\hat{y} = f(\langle \mathbf{w}, \mathbf{x} \rangle + b)$$

donde $\mathbf{x}, \mathbf{w} \in \mathbb{R}^P$, $b \in \mathbb{R}$ y el dominio de y depende la tarea tarea a resolver, como se vio anteriormente.

¿Qué importancia tienen w en el modelo computacional de una neurona?

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

El conocimiento que se va adquiriendo, se almacena en las conexiones neuronales (sinapsis). Entre más fuerte sea la conexión, mayor importancia tiene el conocimiento adquirido.

Por lo tanto, el vector **w** representa el conocimiento adquirido y sus elementos w_i *la importancia que tiene cada característica para el modelo.*

Generalizando el modelo de una neurona artificial

El modelo que vimos anteriormente nos arroja la salida $\hat{y}$ para una única muestra $\mathbf{x}_n$. Se puede generar la salida para un conjunto de muestras $\mathbf{X}$ como:

$$\hat{\mathbf{y}} = f(\tilde{\mathbf{X}}\mathbf{w})$$

donde $\tilde{\mathbf{X}} = [\mathbf{X}, \mathbf{1}]$ es $\mathbf{X}$ más un vector columna de unos y $\hat{\mathbf{y}} \in \Omega^N$ depende de la tarea a resolver, al igual que para el caso de una muestra.

Nota: El símbolo $\wedge$ se utiliza para denotar las salidas generadas por un modelo.

Capa Densa

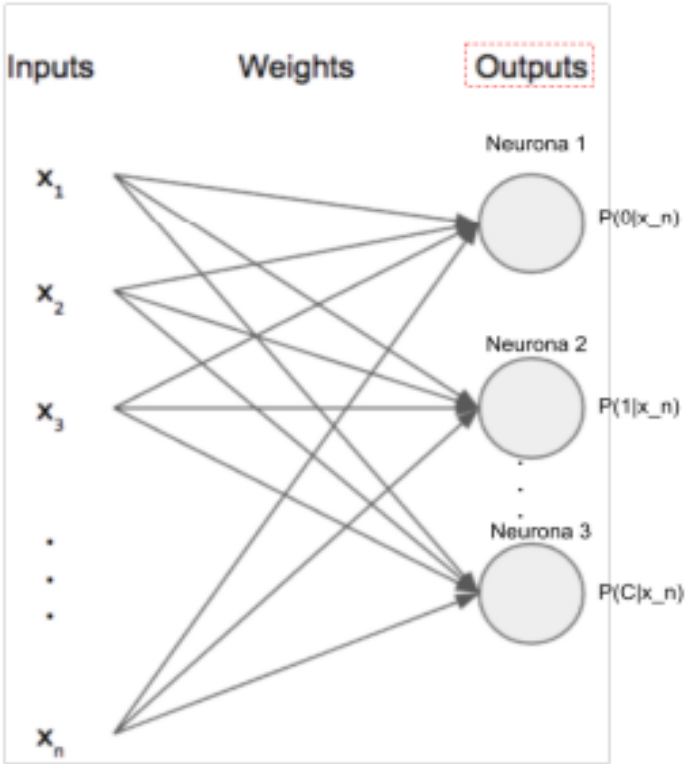
Adicionalmente, el modelo de neurona artificial descrito genera una única salida $\hat{y}$, que para el caso de una tarea de regresión o clasificación bi-clase seria suficiente. No obstante, en el caso de que se tuviera una tarea de clasificación multi-clase donde se prediga la probabilidad de que una muestra pertenezca a cada clase, se necesitaría que el modelo arroje a la salida un vector de probabilidades con número de elementos igual al número de clases como se menciono anteriormente.

$$\mathbf{y}_n = \begin{bmatrix} P(0|\mathbf{x_n}) & P(1|\mathbf{x_n}) & \cdots & P(C|\mathbf{x_n}) \end{bmatrix}$$

Para lograr este objetivo, se introduce una pila de neuronas conocida como **Capa Densa**, donde cada una de estas se encargara de predecir la probabilidad de una clase.

Nota: En una capa densa, todas las neuronas están conectadas a todas las entradas.

Capa Densa



Por lo tanto, la salida de una capa densa se puede generar como:

$$\hat{\mathbf{Y}} = f(\tilde{\mathbf{X}}\mathbf{W}^T)$$

donde $\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{Q\times(P+1)}$, es la matriz que alberga los pesos de cada una de las neuronas de la capa densa, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^Q$ es un vector que alberga el bias de cada neurona y Q es el número de neuronas en la capa densa, que en este caso sería $Q = C$.

Capa Densa

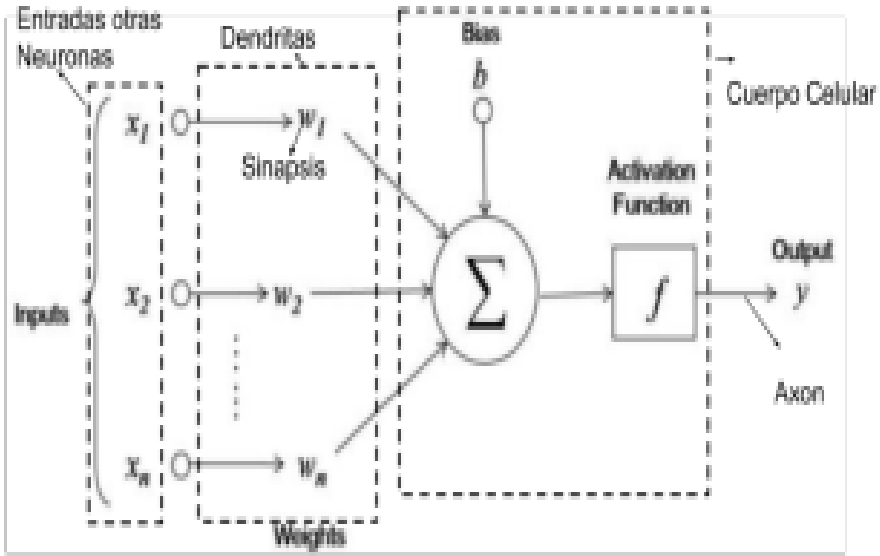
$$\hat{\mathbf{Y}} = f(\tilde{\mathbf{X}}\mathbf{W}^T)$$

$$= f\left(\begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1p} & 1 \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2p} & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{np} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_{11} & w_{21} & \cdots & w_{q1} \\ w_{12} & x_{22} & \cdots & w_{q2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{1p} & w_{2p} & \cdots & w_{qp} \\ w_{1(p+1)} & w_{2(p+1)} & \cdots & w_{q(p+1)} \end{bmatrix}\right)$$

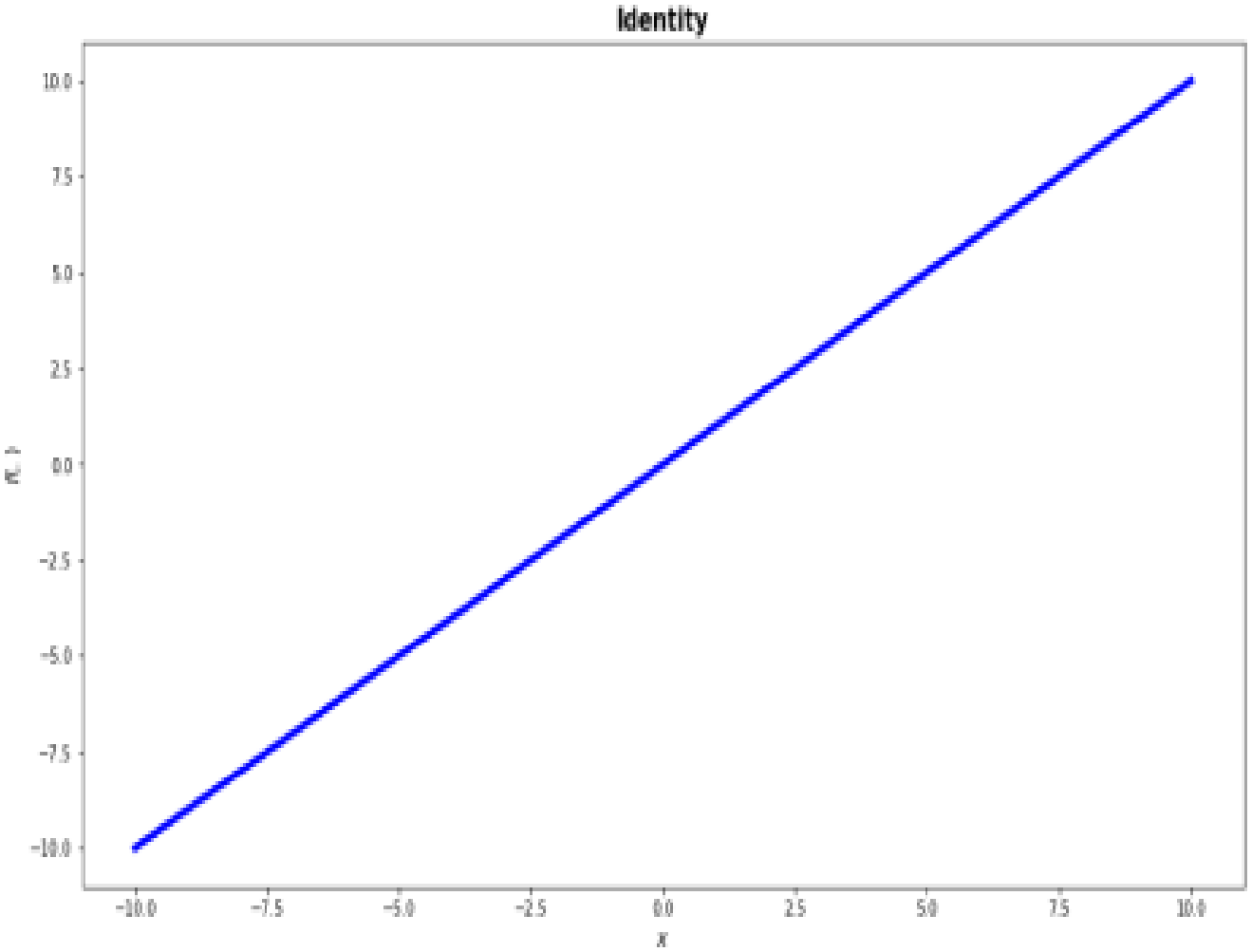
$$= \begin{bmatrix} P(0|\mathbf{x_1}) & P(1|\mathbf{x_1}) & \cdots & P(C|\mathbf{x_1}) \\ P(0|\mathbf{x_2}) & P(1|\mathbf{x_2}) & \cdots & P(C|\mathbf{x_2}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ P(0|\mathbf{x_n}) & P(1|\mathbf{x_n}) & \cdots & P(C|\mathbf{x_n}) \end{bmatrix}$$

Funciones de Activación

El cuerpo de la neurona, es la parte encargada de realizar el proceso sobre las señales de entrada para generar la salida. La neurona artificial imita este elemento a través de las funciones de activación $f(.)$ en conjunto con el sumatorio $\sum$. Por lo tanto, es de vital importancia conocer los diferentes tipos de funciones de activación que se tienen, para de acuerdo a la tarea a resolver se escoja la más adecuada.

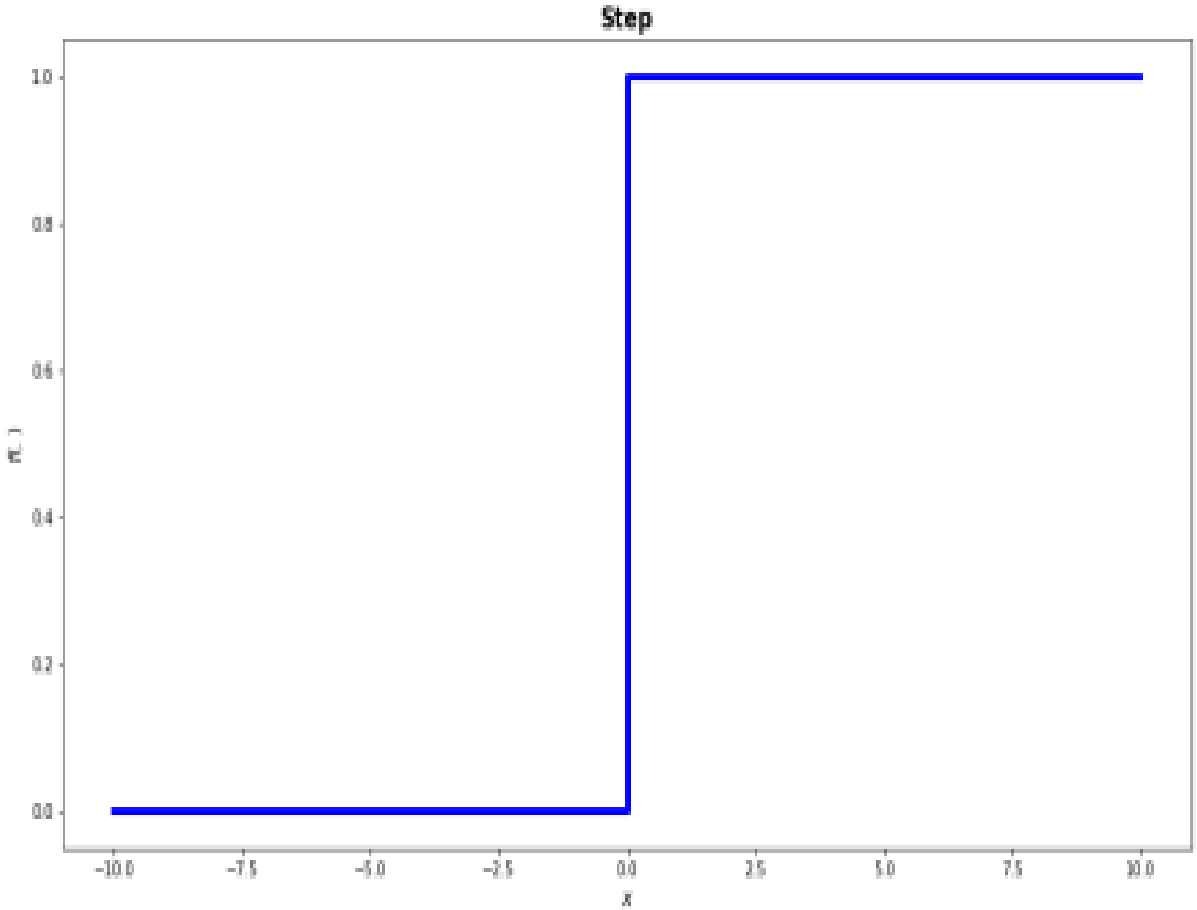


Funciones de Activación



$$f : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$$
$$f(x) = x$$

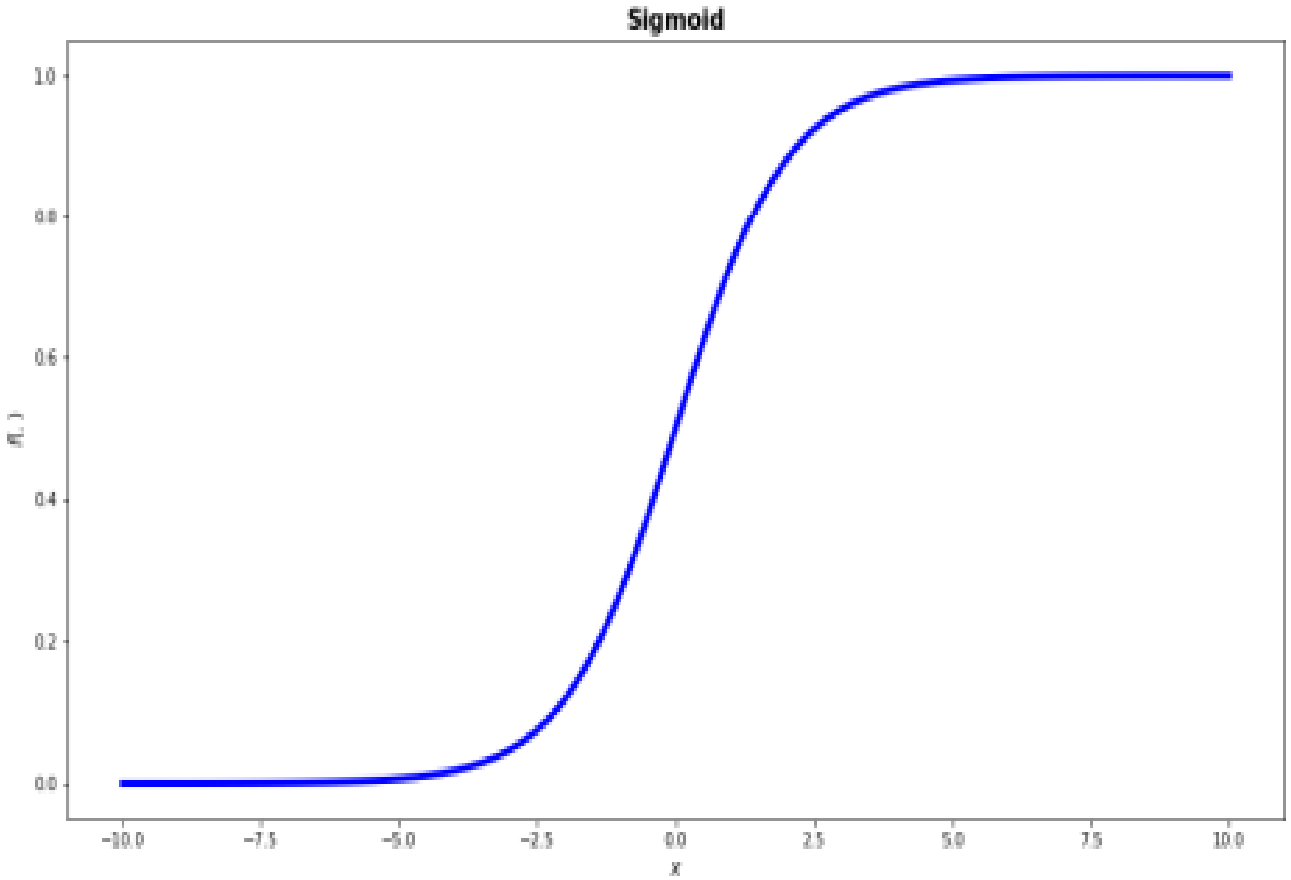
Funciones de Activación



$$f : \mathbb{R} \longrightarrow \{0, 1\}$$

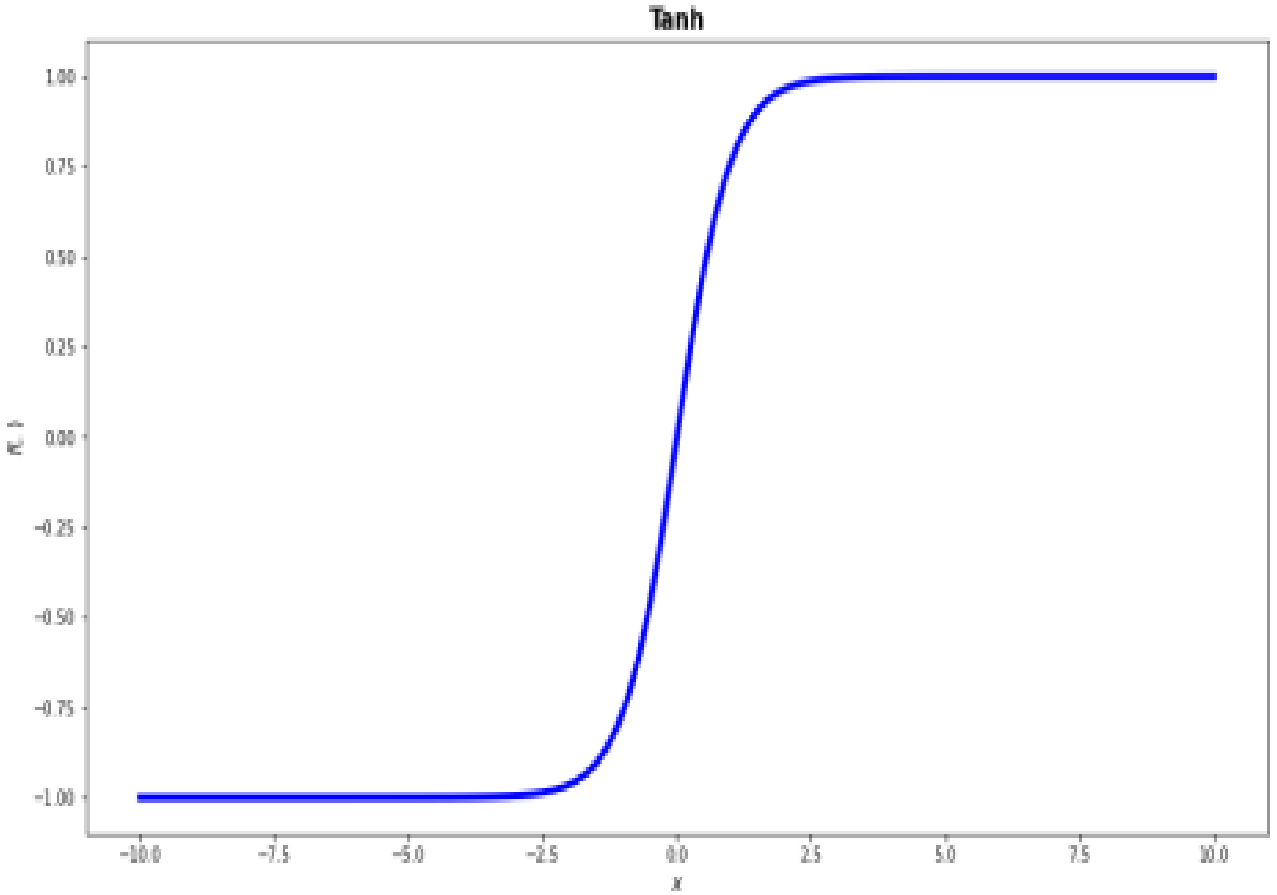
$$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{if } x < 0 \\ x & \text{if } x \geq 0 \end{cases}$$

Funciones de Activación



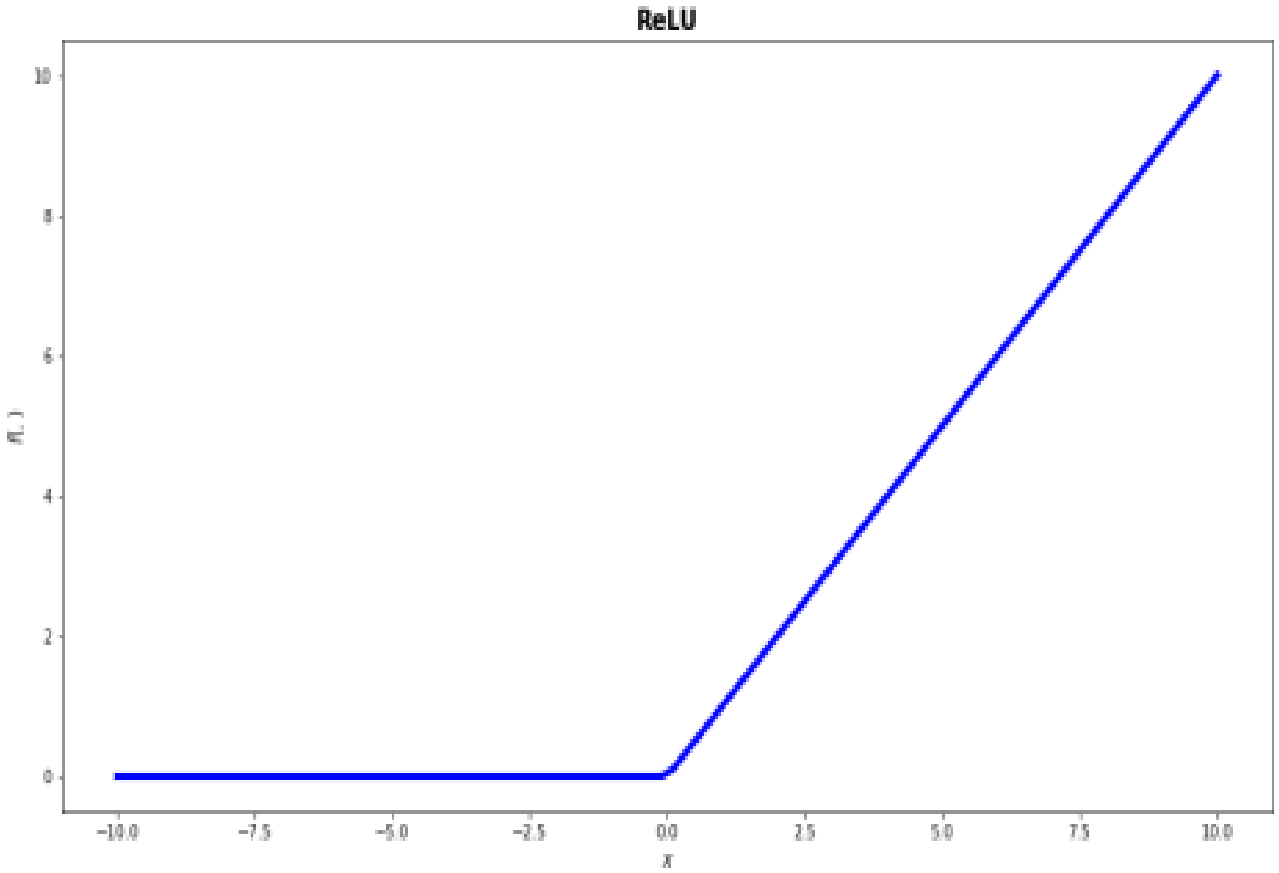
$$f : \mathbb{R} \longrightarrow (0, 1)$$
$$f(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$$

Funciones de Activación



$$f : \mathbb{R} \longrightarrow (-1, 1)$$
$$f(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$$

Funciones de Activación



$$f : \mathbb{R} \longrightarrow [0, \infty)$$
$$f(x) = \max(0, x)$$

Recapitulando

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

- El modelo es el elemento que se encarga de almacenar el aprendizaje.
- Los parámetros del modelo, ($\mathbf{w}$ en el caso de la neurona artificial y $\mathbf{W}$ en el caso de la capa densa) representan el aprendizaje.
- Las métricas o medidas de desempeño, nos permiten evaluar si el aprendizaje adquirido es acorde o no a la tarea que se desea resolver.

Sin embargo,

¿Cómo se le especifica al modelo que es lo que debe de aprender? y al mismo tiempo, ¿Cómo se supervisa el proceso de aprendizaje?
Respuesta: A través de las *funciones de costo*.

Dependiendo del tipo de aprendizaje y tarea que se desee desempeñar existen diferentes tipos de funciones de costo. En este curso, nos enfocaremos en **tareas de clasificación para modelos de aprendizaje supervisados**.

Definiciones

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

Función de perdida

Permite evaluar el proceso de aprendizaje en una sola muestra $\mathbf{x}_n$ del conjunto de entrenamiento.

Función de costo

Permite evaluar el proceso de aprendizaje en todo el conjunto de entrenamiento $\mathbf{X}$.

La función de perdida mas comúnmente utilizada para tareas de clasificación es la **Entropía Cruzada**.

Entropia Cruzada

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

Función de perdida

Permite evaluar el proceso de aprendizaje en una sola muestra $\mathbf{x}_n$ del conjunto de entrenamiento.

Función de costo

Permite evaluar el proceso de aprendizaje en todo el conjunto de entrenamiento $\mathbf{X}$.

La función de perdida mas comúnmente utilizada para tareas de clasificación es la **Entropía Cruzada**.

Tarea: Consultar a cerca de la función de costo entropia cruzada categorica

Ejemplo 1

Ejemplo 1 :

$$\mathbf{y} \quad 1 \quad 0 \quad 0 \qquad\qquad \mathbf{y} \quad 1 \quad 0 \quad 0 \qquad\qquad -\mathbf{y} \odot \log(\hat{\mathbf{y}}) \quad 0{,}02 \quad 0 \quad 0$$

$$\hat{\mathbf{y}} \quad 0{,}98 \quad 0{,}01 \quad 0{,}01 \qquad\qquad \log(\hat{\mathbf{y}}) \quad -0{,}02 \quad -4{,}61 \quad -4{,}61$$

$$H(\mathbf{y}, \hat{\mathbf{y}}) = 0{,}02 \ ;$$

Ejemplo 2

Ejemplo 1 :

$\mathbf{y}$	1	0	0		$\mathbf{y}$	1	0	0	$-\mathbf{y} \odot \log(\hat{\mathbf{y}})$	0,02	0	0
$\hat{\mathbf{y}}$	0,98	0,01	0,01		$\log(\hat{\mathbf{y}})$	−0,02	−4,61	−4,61				

$H(\mathbf{y}, \hat{\mathbf{y}}) = 0{,}02$; Un valor cercano a 0 significa que el modelo desempeño bien la tarea en la muestra.

Ejemplo 2 :

$\mathbf{y}$	0	0	1		$\mathbf{y}$	0	0	1	$-\mathbf{y} \odot \log(\hat{\mathbf{y}})$	0	0	0,69
$\hat{\mathbf{y}}$	0,3	0,2	0,5		$\log(\hat{\mathbf{y}})$	−1,2	−1,61	−0,69				

$H(\mathbf{y}, \hat{\mathbf{y}}) = 0{,}69$; Un valor lejano a 0 significa que el modelo no desempeño bien la tarea en la muestra y debe mejorar.

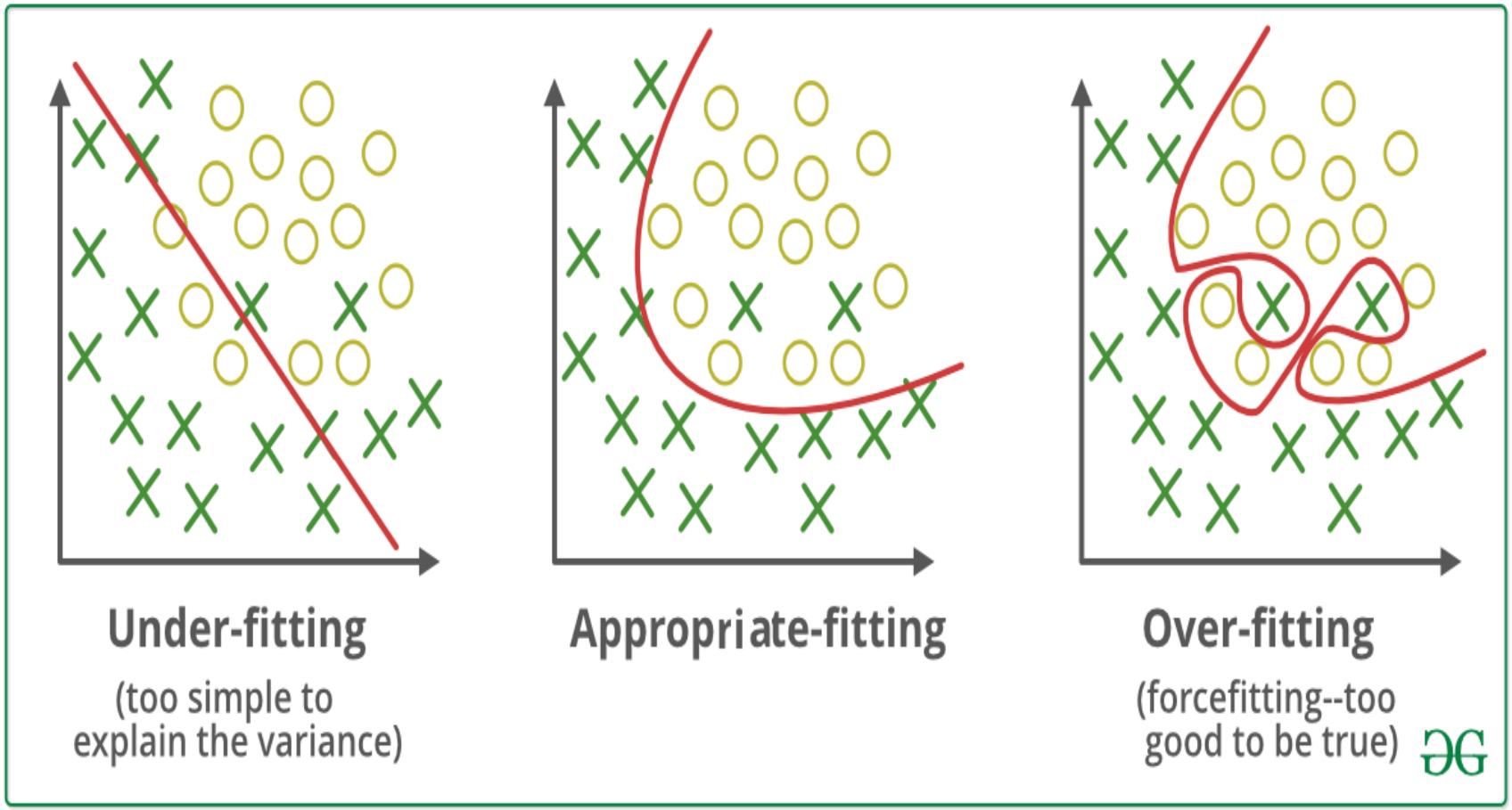
Función de Costo

Evalúa el proceso de aprendizaje sobre el conjunto de muestras **X** como el promedio de las perdidas en las muestras.

$$C(\mathbf{Y}, \hat{\mathbf{Y}}) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} H(\mathbf{y}_n, \hat{\mathbf{y}}_n)$$

El objetivo, es tratar de que el valor de la función de costo sea el **mínimo** posible. De esta manera, aseguramos que el modelo va a desempeñar bien la tarea en el conjunto de entrenamiento. Sin embargo, es importante aclarar que puede ocurrir sobre-ajuste y en lugar del modelo aprender memoriza los datos. Por tal motivo, es importante el conjunto de prueba, que permite validar si efectivamente el modelo aprendió los patrones (reglas) relevantes asociados a la tarea de interés. Las funciones de costo por si solas no aseguran que el modelo aprenda, como se menciono anteriormente puede memorizar.

Underfitting y Overfitting



Función de Costo en Términos de W

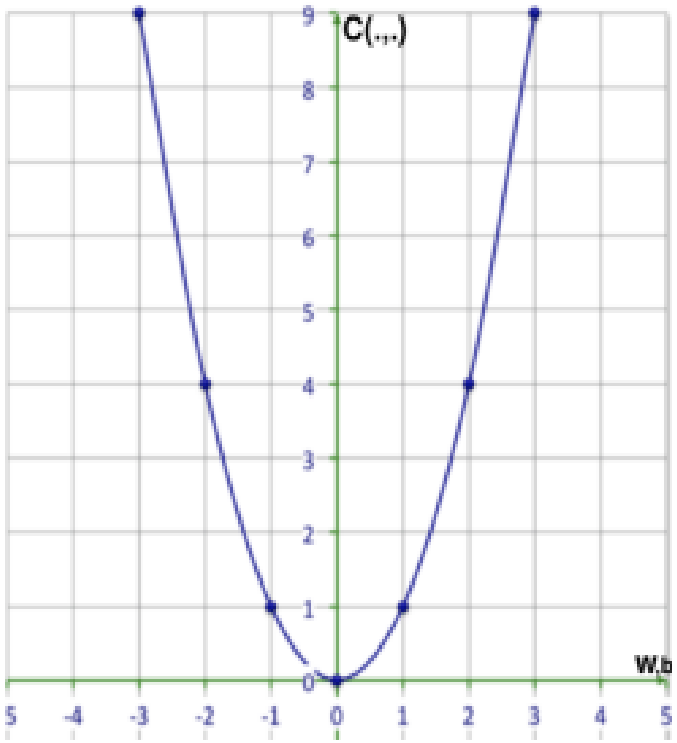
Si escribimos $\hat{\mathbf{y}}_n$ en términos de la salida de una capa densa como $\hat{\mathbf{y}}_n = f(\tilde{\mathbf{x}}_n \mathbf{W}^T)$, la función de costo ahora nos quedaría:

$$C(\mathbf{X}, \mathbf{Y}; \mathbf{W}, \mathbf{b}) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} H(\mathbf{y}_n, f(\tilde{\mathbf{x}}_n \mathbf{W}^T))$$

Ya que $\mathbf{X}$ y $\mathbf{Y}$ están dados, la función de costo nos quedaría en términos de $\mathbf{W}$.

Adquisición de Aprendizaje en una Capa Densa

¿Cómo se calcula **W** para una capa densa?
Respuesta: Minimizando la función de costo



Adquisición de Aprendizaje en una Capa Densa

Si hacemos $\theta = \{\mathbf{W}\}$, se tendría el siguiente problema de optimización.

$$\theta^* = \arg\min_{\theta} C(\mathbf{Y}, \hat{\mathbf{Y}})$$

Donde encontrar el mínimo valor de θ, corresponde a la adquisición de aprendizaje por parte de la capa densa para resolver la tarea de interés.

¿Cómo se minimiza la función de costo?

Respuesta: Al igual que se hacía en calculo diferencial cuando se quería minimizar una función: (i) Calculando el gradiente (∇) (ii) igualando a cero y (iii) resolviendo la ecuación resultante.

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

Thanks!