UNIVERSIDAD
DE GRANADA

Escuela Técnica Superior de Ingenierías Informática y de Telecomunicación
Facultad de Ciencias

Doble Grado en Ingeniería Informática y Matemáticas

TRABAJO DE FIN DE GRADO

Optimización de redes neuronales

Presentado por:
Blanca Cano Camarero

Tutores:
Juan Julián Merelo Guervós
Arquitectura y tecnología de computadores

Francisco Javier Meri de la Maza
Análisis matemático

Curso académico 2021-2022

Optimización de redes neuronales

Blanca Cano Camarero

Blanca Cano Camarero *Optimización de redes neuronales*.
Trabajo de fin de Grado. Curso académico 2021-2022.

Responsables de tutorización

Juan Julián Merelo Guervós
Arquitectura y tecnología de computadores

Francisco Javier Meri de la Maza
Análisis matemático

Doble Grado en Ingeniería Informática y Matemáticas

Escuela Técnica Superior de Ingenierías Informática y de Telecomunicación
Facultad de Ciencias

Universidad de Granada

Declaración de originalidad

Dña. Blanca Cano Camarero

Declaro explícitamente que el trabajo presentado como Trabajo de Fin de Grado (TFG), correspondiente al curso académico 2021-2022, es original, entendida esta, en el sentido de que no ha utilizado para la elaboración del trabajo fuentes sin citarlas debidamente.

En Granada a 20 de junio de 2022

Fdo: Blanca Cano Camarero

Agradecimientos

No todos los días termina una de escribir su trabajo fin de grado y en esta euforia casi descomedida me parece oportuno volver la vista atrás y agradecer a todos aquellos que me han acompañado durante el camino.

Comenzaré por las personas que más quiero del mundo, gracias papá y mamá por vuestra infinita paciencia y vuestro amor inconmensurable, sin vosotros no hubiera sido posible (de hecho nada lo sería). Gracias también a mis dos tutores, JJ y Javier por toda la atención y consideraciones que me han dedicado, que sepáis que sois dos *soletes* y el cariño que me inspiráis no es poco.

Por supuesto también a todas las personas que me han insuflado ganas de aprender e ir a clase, ya sean esos profesores inspiradores y cercanos o todas las personas que me han sacado una sonrisa alguna vez.

Quiero además añadir una mención especial a mis *algebristas recalcitrantes favoritos* Daniel y Ricardo por haberme aguantado durante tantísimas horas; y como no podía ser de otra forma: a mi fiel compañero de aventuras, a mi Sancho para su Quijote (o su Sancho para mi Quijote, según se tercie), a mi archiamigo Jose, gracias por todos los momentos que hemos compartido y nos quedan por vivir.

Resumen

Existe en la actualidad un desequilibrio entre resultados empíricos y teóricos de redes neuronales llegando incluso a contradicción (como se comenta en la introducción del capítulo 2), será por tanto nuestro primer objetivo construir una teoría sólida que de cabida a optimizaciones de fundamento teórico; una revisión y purga de cualquier artificio existente sobre redes neuronales carente de fundamento matemático.

Como resultado de ello se ha propuesto e implementado un nuevo modelo de red neuronal así como sus métodos de aprendizaje y evaluación. Además se ha dado un criterio de selección de funciones de activación y un algoritmo de inicialización de pesos que mejora los ya existentes. Todos los resultados han conducido a la creación de la biblioteca *OptimizedNeuralNetwork.jl*, que contiene la implementación de nuestros modelos y métodos optimizados.

PALABRAS CLAVE: redes neuronales optimización funciones de activación inicialización de pesos Biblioteca de aprendizaje automático

Summary

Nowadays experimental research in Neural Networks is more advanced than theoretical results. From this we aim to establish a solid mathematical theory so as to optimize the current neural network models.

As a result of our study, we have proposed a novel neural network model, and adapted and optimized evaluation and learning methods to it. Moreover, we have discovered some theorems that prove the equivalence among some activation functions, and hence we propose a new algorithm to initialize the weights of neural networks. Thanks to the first result, we obtain a criterion to choose the most suitable activation function to maintain accuracy and reduce computational costs. Thanks to the second one, we might accelerate learning convergence methods.

In addition, the models, methods and algorithms have been implemented in Julia, resulting in the *OptimizedNeuralNetwork.jl* library.

All the theory development, designs, decisions and results are written in this memory, which has the following structure:

- **Chapter 1: Description of the methodology followed.** We have organized our project according to an agile philosophy based on personas methodology, user stories, milestones and tests. This method has conducted and linked mathematical and technical results and implementations, giving them coherence and validation methods.
- **Chapter 2: Description of the learning problem.** We defined the characteristic and type of machine learning problems. We will focus on supervised learning ones.
- **Chapter 3: Approximation theory.** In order to establish a solid theory, we will start our work trying to solve machine learning problems by traditional approximation methods. The main result we prove is the Stone Weierstrass's theorem. As a conclusion of this chapter we will achieve knowledge of the virtues and faults of traditional methods and understanding the necessity of new methods and structures such as neural networks.
- **Chapter 4: Neural networks are universal approximators.** In this chapter we introduce our neural network model and compare it with the conventional ones. In order to show it is well defined, we will prove the universal convergence of our model to any measurable function. In addition, we will give some results about how our model solves classification and regression problems as its number of neurons rises. Finally, we will argue if all of those math results can actually solve real life problems. The idea behind the debate is the computability representation of real numbers.
- **Chapter 5: The design and implementation of neural networks.** We will carefully describe the design and implementation of our model of neural network. Thanks to that we will obtain some mathematical results about bias and classification function. This will be useful to compare our model with the conventional ones and justify our selection. Moreover, we will explain, justify and design learning and evaluation methods to our model. These methods are optimized versions of Forward Propagation and Backpropagation.

- **Chapter 6: Democratization of activation functions.** We will explain in this chapter if there are better activation functions. In this direction we will prove two original results which show that there are families of activation functions that under the same conditions will solve problems with the same accuracy. As a result, if we compare the computational cost of the members of those families and choose the faster one, we will obtain a method to optimize evaluation and learning of neural networks without loss of accuracy. We have used the Wilcoxon signed-rank test as a statistical hypothesis test so as to give a rigorous study of our criteria.
- **Chapter 7: Weight initializing algorithm.** Since Backpropagation and other iterative methods are sensitive to the initial value of a neural network, we will show an original method to initialize its weights from training data. This process not only will produce a better initial step but also has lower computational cost than Backpropagation. To test the potential of this method we will use the Wilcoxon signed-rank test again and also, from the experiment's requirements we will design and create our OptimizedNeuralNetwork.jl library. In this chapter we will also explain every decision done during the design and implementation of the library in order to be as efficient as possible.
- **Chapter 8: Use of genetic algorithm in the selection of activation function.** In this chapter we will explain a future work. Given a fixed number of neurons, the selection of its activation function may be crucial to reduce the train and test error. However, adding more free params to the search space increases its complexity and at same time the cost of finding a solution. Nevertheless, the result obtained in chapter 6 and a property of our neural model will reduce the space complexity.
- **Chapter 9: Conclusions.**

KEYWORDS: neural networks optimization activation functions weights initializing machine learning library

Índice general

Índice de figuras

Índice de tablas

Índice de algoritmos

Comentario previo

Se pretende con este documento presentar un trabajo de fin del doble grado de Ingeniería Informática y Matemáticas y que cualquier miembro del tribunal; independientemente de la vertiente a la que pertenezca sea capaz de comprenderlo en su totalidad. Para ello se ha acompañado la exposición con notas aclaratorias en los márgenes, que siguen el siguiente código de color e icono [1]:

- **Color 1**: Comentarios para aclarar conceptos matemáticos o informáticos y ofrecer la idea intuitiva que se esconde, donde no se presuponen conocimientos avanzados en la materia.
- **Color 2**: Comentarios para una reflexión más profunda o que indique nuevas áreas que explorar.
- **Color 3**: Concepto clave y destacable que tendrá un papel fundamental a posteriori.

Además a lo largo del trabajo se han realizado aportaciones propias y resultados novedosos, estos aparecerán destacados de la siguiente forma:

Aportación original

Este recuadro representa cómo se indicará de ahora en adelante alguna aportación original a la materia.

[1] Como parte de la metodología los colores han sido seleccionados de acorde a una paleta de colores inclusiva. Para ello se ha seleccionado una paleta de la web Palett.es, visitada por última vez el 13 de mayo del 2022 y con dirección `https://palett.es/6a94a8-013e3b-7eb645-31d331-26f27d`. y con la herramienta de contraste de la web `https://color.adobe.com/es/create/color-contrast-analyzer` consultada por última vez el 16 de Junio de 2022

Introducción

Origen

En nuestros días, el aprendizaje automático es un campo en continua expansión. Desde procesamiento de imágenes hasta predicciones de acciones en bolsa, las redes neuronales se van implantando en todos los campos del conocimiento.

A pesar del pragmatismo actual que prevalece en las redes neuronales, el concepto de neurona artificial nace en el primer tercio del siglo XX con el artículo *Logical calculus of the ideas immanent in nervous activity* [MP43], como intento de modelar el pensamiento humano en forma de proceso lógico. Esta primera etapa de investigación culmina con la invención del perceptrón en 1958 por Frank Rosenblatt con el artículo *The perceptron: a probabilistic model for information storage and organization in the brain* [Ros58]. Es importante notar que todas estas investigaciones tenían un objetivo más allá de la resolución de problemas complejos utilizando máquinas u ordenadores: comprender el proceso de aprendizaje y cognición del ser humano.

Estos primeros modelos tenían sus carencias y reservas por parte de la comunidad científica y cuando en 1969 la publicación de la demostración de que los modelos eran incapaces de resolver problemas lógicos simples (véase [MP69]) hizo que el campo casi muriera. No fue hasta 1986 con el descubrimiento de un modelo en más complejo, que se superarían estas limitaciones y que darían lugar a las actuales redes neuronales [RHW86a].

El modelos de 1986, no obstante, usaba un método que sus autores eran incapaces de relacionar con el mundo de la cognición, suponiendo con esto el inicio de la separación de las redes neuronales con el campo de la psicología y la neurociencia y el inicio del enfoque actual de resolución de problemas. Estos nuevos descubrimientos, sumados a una mejora en las capacidades computacionales de los ordenadores y que en 1989 se demostrara formalmente su eficacia [HSW89] provocaron un auge en el interés acerca de las redes, que perdura hasta hoy.

Descripción del problema, motivación y objetivos

Si bien las redes neuronales abandonaron ya la psicología y a pesar de su uso extensivo en la actualidad, es un área incipiente de la matemática donde los grandes teoremas aún están por descubrir. Ante tal desequilibrio entre resultados empíricos y teóricos, será nuestro primer objetivo conseguir una revisión y purga de cualquier artificio existente sobre redes neuronales carente de fundamento matemático. Siendo el fin de esto construir una teoría sólida que de cabida a optimizaciones de fundamento teórico.

Técnicas, áreas matemáticas y fuentes utilizadas

El artículo principal que membrana el proyecto es el artículo *Multilayer Feedforward Networks are Universal Approximators* [HSW89] escrito por Kurt Hornik, Maxwell Stinchcombe y Halber White. Como pilar a la sección de teoría de aproximación se ha utilizad el manual *The Elements of Real Analysis* [Bar47] y finalmente los manuales de referencia seguidos sobre el aprendizaje automático han sido: *Learning From Data* [AMMIL12] y *Pattern Recognition and Machine Learning* [Bis06].

Sobre las técnicas y áreas empleadas pueden consultarse con detalle en la secciones 1.6 y 1.7.

1 Metodología

La planificación y organización es un componente vital a la hora del desarrollo de software y la ciencia de datos, por lo que no es de extrañar que sus beneficios sean extrapolables a otras áreas de la ciencia; hemos aplicado por ende la metodología expuesta en el artículo [Gue21], realizado el trabajo con una mentalidad ágil, de acorde a las siguientes hipótesis:

1. Se premia la **reproducibilidad**, *la ciencia no puede ser ciencia si no es reproducible*. Es por ello que se publica todo el material usado.

2. **Comprobaciones** en todo los niveles, *el código que no se ha probado no funciona*. Explicitamos unos requisitos y criterios claros de validación.

3. Conocimiento libre, tanto la memoria como el código se encuentra publicado y con licencia libre en nuestro repositorio de GitHub [1].

4. **Colaboración frente jerarquía de mando vertical**, los tutores en este caso los *interesados en el producto* indican qué les gustaría que tuviera en vez de un qué y cómo estricto. Consiguiendo con ello una mayor autonomía y bienestar de trabajo.

Concretamente la metodología seguida basada en [Gue] ha sido la siguiente:
El objetivo es *optimizar el proceso de diseño, entrenamiento y explotación* para reducir su coste de cómputo y espacio en memoria en base de un fundamento matemático sólido y sistemático que provenga de la noción más elemental de red neuronal y no meras heurísticas experimentales.
Puesto que los problemas surgen de las necesidades humanas, se han definido unas metas claras a través de la *metodología de personas* (ver sección 1.1) [D] y las respectivas historias de usuario derivadas (ver sección 1.2).

El objetivo de la metodología seleccionada.
Buscamos organizarnos de una manera eficiente con el fin de optimizar el proceso de producción y conducir a un resultado exitoso. Para ello nos basaremos en:
1.¿Qué personas se beneficiarán y están involucradas en el proyecto? (**Personas definidas** 1.1)
2.¿Qué caracteriza a esas personas y cuáles son sus necesidades? (**Historias de usuario** 1.2)
3.¿Qué acciones satisfarán tales requisitos?(**Hitos** 1.3)

1.1. *Personas definidas*

Ante la pregunta de quiénes serán los beneficiados e involucrados por este proyecto y que trataremos de satisfacer han surgido las siguientes *personas ficticias*:

- **Rosa Camarero**, desea implementar un modelo de red neuronal que mejore a los actuales en algún aspecto, ya sea porque reduzca su coste computacional o espacio en memoria.

- **María López**, catedrática en matemáticas aplicadas y miembro del tribunal. Su conocimiento de informática es moderado. Valora una memoria formal y rigurosa. Se encarga de evaluar trabajos fin de grado, en particular éste mismo.

[1] Puede visitarlo en https://github.com/BlancaCC/TFG-Estudio-de-las-redes-neuronales.

- **Pedro Castillo**, Doctor experto en *deep learning* y miembro del tribunal. Valora la claridad, las experimentaciones sensatas y fundamentadas así como la posibilidad de aplicaciones reales. Se encarga de evaluar trabajos fin de grado, en particular éste mismo.
- **Javier Merí**, profesor del departamento de análisis matemático y contutor del proyecto (junto con JJ). Busca de manera formal y rigurosa entender y optimizar las redes neuronales usando herramientas analíticas. Estará presente durante todo el desarrollo.
- **JJ Merelo**, profesor del departamento de arquitectura de computadores y contutor del proyecto (junto con Javier). Busca resolver problemas relacionados con la optimización bajo un punto de vista más práctico y experimental, salvaguardando un trabajo bien organizado y metódico. Estará presente durante todo el desarrollo.
- **Blanca Cano** alumna de informáticas y matemáticas, tiene muchas ganas de aprender sobre redes neuronales, su conocimiento es moderado, espera presentar el trabajo en la convocatoria ordinaria.

1.2. Historias de usuario

A partir de los usuarios se han definido las historias de usuario [Coh09], que han quedado registradas como *issues* etiquetadas con *user story* y cabecera de formato `[HUxx] título de la historia de usuario` en nuestro repositorio de GitHub, donde `HUxx` representa la historia de usuario número xx.

Las historias de usuario definidas son las siguientes:

[HU01] Optimización redes neuronales.

Como *Rosa* me gustaría que se ejecutaran las redes neuronales en un hardware más barato o que consuma menos en un tiempo razonable.

[HU02] Metodología

Como *JJ* me gustaría que el proyecto se realizara bajo un desarrollo ágil, el cual recoge sus principios en el siguiente manifiesto [Ken] y que es una filosofía, no una metodología [Rud] [Bos]. Puede encontrar su declaración en las historias de usuario definidas en nuestro repositorio de GitHub [2].

[HU03] Estudio de las redes neuronales

Como *Javier* me gustaría que la memoria fuera un estudio de calidad de las redes neuronales, respondiendo de manera auto-contenida, clara, rigurosa y precisa a preguntas como:

- ¿Qué son las redes neuronales?
- ¿Cómo se construyen?
- ¿Para qué sirven?
- ¿Por qué funcionan?

[2] Visite el *issue* 65 `https://github.com/BlancaCC/TFG-Estudio-de-las-redes-neuronales/issues/65`.

[HU04] Indagar y experimentar sobre redes neuronales

Como *Javier y JJ* nos gustaría plantear nuevas hipótesis para conocer en mayor profundidad, aclarar limitaciones, particularizar o abstraer en cualquier aspecto de las redes neuronales actuales.

Puede encontrar su declaración en las historias de usuario definidas en nuestro repositorio de GitHub [3].

[HU05] Requisitos tribunal

Como *María y Pedro* queremos corregir un trabajo fin de grado bien hecho. Bajo el contexto de evaluación, la memoria debe de cumplir una serie de requisitos imprescindibles:

1. Declaración explícita firmada en la que se asume la originalidad del trabajo, entendida en el sentido de que no ha utilizado fuentes sin citarlas debidamente. Esta declaración se puede descargar en la web del Grado (matemáticas).
2. Un índice detallado de capítulos y secciones.
3. Un resumen amplio en inglés del trabajo realizado (se recomienda entre 800 y 1500 palabras).
4. Una introducción en la que se describan claramente los objetivos previstos inicialmente en la propuesta de TFG, indicando si han sido o no alcanzados, los antecedentes importantes para el desarrollo, los resultados obtenidos, en su caso, y las principales fuentes consultadas.
5. Una descripción de la metodología.
6. Un estado del arte y diseño.
7. Estimación de los costes.
8. Análisis de las prestaciones.
9. Una bibliografía final que incluya todas las referencias utilizadas.

Estas historias de usuario dan lugar a *hitos*.

1.3. Hitos

Los hitos describen entregables, productos mínimos viables y se basan en las historias de usuarios, puede encontrar nuestras declaraciones en nuestro repositorio [4]. A éstas además les hemos asociado una fecha de entrega.

[3] Visite el *issue* 51 https://github.com/BlancaCC/TFG-Estudio-de-las-redes-neuronales/issues/51.

[4] Concretamente en la sección de *milestones*, cuya URL es https://github.com/BlancaCC/TFG-Estudio-de-las-redes-neuronales/milestones.

Hito 0: Explicitación escrita de la metodología

Consiste en la redacción de la descripción de la metodología a seguir, resultando en capítulos concretos de la memoria y *issues* en la plataforma de trabajo, GitHub. La documentación presentada deberá incluir:

- Explicitación de la metodología.
- Definición y descripción de personas.
- Redacción de las historias de usuario.
- Redacción de los hitos.

Será validada cuando los tutores aprueben la organización y formulación de la misma.

Hito 1: Búsqueda de resultados teóricos para optimizar las redes neuronales

Se busca con este hito establecer las bases teóricas para poder optimizar las redes neuronales, se dará por concluido cuando se haya conseguido algún resultado teórico con el que:

- Acotar el tamaño o la precisión de los pesos u otros parámetros de la red neuronal.
- Alguna forma de acelerar la convergencia, si es que se va a optar por un método de descenso de gradiente.
- En general, cualquier hipótesis que se pueda relajar o cambiar en el camino de reducir el espacio de búsqueda de posibles redes neuronales o de los pesos de las mismas.

El estudio progresivo se verá reflejado en varios capítulos y secciones de la memoria que se aceptarán una vez hayan sido supervisadas y validadas por los tutores.

Hito 2: Evaluación experimental de las hipótesis de optimización formuladas

Deberán de validarse y cuantificar experimentalmente las propuestas de optimización del hito anterior.

Para ello se deberá:

1. **Formular los test correspondientes y adecuados** lo que conllevará :
   - Una implementación de los algoritmos teóricos propuestos.
   - Una descripción y formulación de los test.
2. **Evaluar los resultados**.

El criterio de aceptación de un producto mínimo viable consistirá en verificar que:

- La implementación de los algoritmos debe de ser coherente, proveniente del hito anterior y debe de estar referenciada.
- Toda implementación comprueba su correcto funcionamiento mediante tests.
- La redacción del análisis y conclusiones es aprobada por los tutores nuevamente.

Hito 3: Entrega del proyecto

Su resultado será una memoria revisada y pulida que se entregará en Prado como trabajo fin de grado en el plazo de la convocatoria ordinaria.

Para cumplir con los *hitos*, ha sido necesario resolver nuevos problemas menores, estos se han recogido también como *issues* ligados a las historias de usuario y asociados a un *hitos*.

1.4. Registro de trabajo

Con el fin de constatar que el desarrollo efectivamente se ha llevado con una filosofía ágil y según los tiempos estipulados se han registrado el tiempo, las tareas dedicadas y los hitos relacionados en la siguiente hoja de cálculo.

En total el número de horas invertidas ha sido unas 450.

Que se distribuye de la siguiente manera en los distintos hitos:

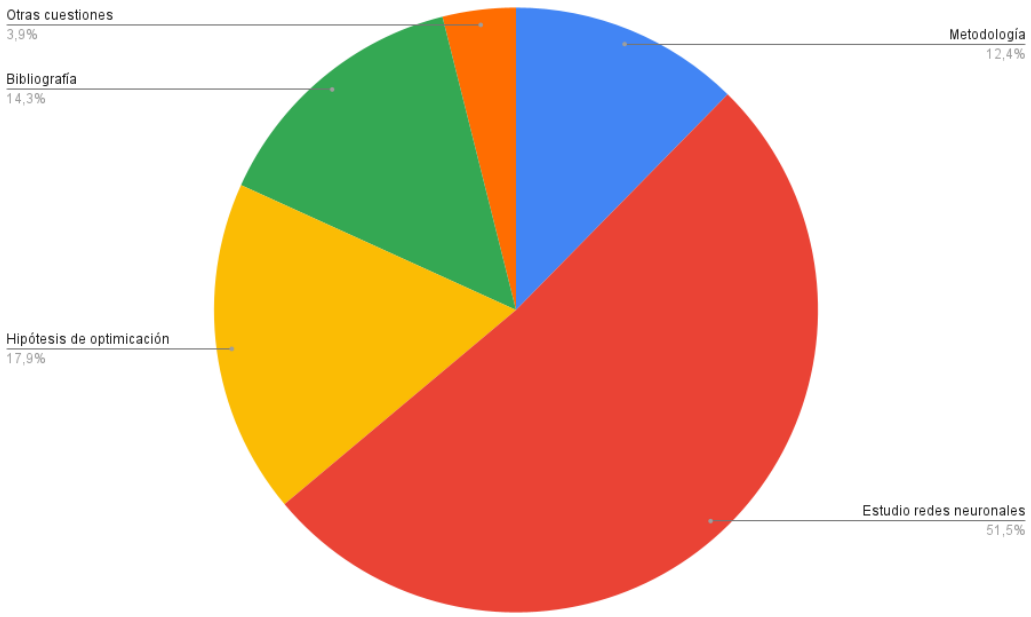


Figura 1.1: Sector circular sobre la dedicación a cada hito

1.5. Resumen de la metodología

Se ha seguido un desarrollo ágil que radica en la resolución de problemas expuestos como historias de usuarios. Éstas historias de usuario se formulan en base a los beneficiados, personas bien definidas; se formalizan mediante *issues* y entraman los *hitos*, con los que guiar el desarrollo.

Todo esto se puede leer no solo en esta memoria sino también en nuestro repositorio de GitHub [BCC].

1.6. Herramientas utilizadas

1.6.1. GitHub

Como servicio externo hemos usado GitHub, ya que permite implementar de manera eficaz todo el desarrollo ágil: desde la planificación, comunicación, test e incluso difusión y acceso a los resultados.

1.6.2. Lenguaje de programación Julia

Hemos seleccionado como lenguaje de programación Julia por los siguientes motivos ([BKSE12]):

- Ofrece resultados de *benchmarks* muy competitivos[5], al nivel de C.
- Variedad de bibliotecas usadas para ciencia de datos que podríamos encontrar en otros lenguajes muy utilizados en el sector como son Python y R.
- Otras características del lenguaje que facilitan la optimización del código como veremos en la sección 6.2.1.

1.6.3. *Notebooks*

Significado del término *script*
Término para designar un programa relativamente simple y que por lo general es interpretado (se va traduciendo y ejecutando línea a línea).

Todas las gráficas que se muestran en la memoria han sido creadas por nosotros. Las hemos generado con *scripts* o la mayoría de la veces con *notebooks* de Jupyter, el motivo de esto ha sido el tener una interacción y visualización más cómoda y compacta de los resultados.

El lenguaje utilizado en los *notebooks* ha sido Julia o Python indistintamente, a conveniencia de cuál ofrecía la función o biblioteca más cómoda para el propósito.

1.7. Asignaturas de grado relacionadas con el trabajo

Si bien, es casi imposible enumerar de manera exhaustiva todas las asignaturas involucradas en este trabajo, ya que todas han influido en menor o mayor medida en la comprensión y formulación de ideas; las principales han sido:

- **Análisis Matemático**: todas las asignaturas del departamento de análisis matemático han tenido relevancia, ya sea en el modelado de espacios de funciones, para probar que las redes neuronales son aproximadores universales y para la elaboración de nuestros propios resultados.
- El **Aprendizaje Automático** y **Visión por Computador** sientan las bases de lo que son problemas de aprendizaje, tratamiento de los datos y evaluación del error, así como el uso práctico de las redes neuronales.
- **Estructura de Datos**: diseño e implementación de la modelización de las redes neuronales y sus algoritmos concernientes.

En menor medida han tenido también relevancia:

[5] Véase los resultado expuestos en https://julialang.org/benchmarks/, web consultada por última vez el 22 de mayo de 2022.

- **Inferencia Estadística**, la Inferencia Estadística está estrechamente ligada con la ciencia de datos, también ha sido utilizada para los test de hipótesis.
- Otras asignaturas que han intervenido **Programación Orientada a Objeto Diseño y Desarrollo de Sistemas Informáticos**
- Nociones de **Topología** se han requerido para probar ciertos resultados analíticos.
- **Álgebra, Métodos Numéricos I, Modelos I, Geometría III y Metaheurística** esta agrupación de asignaturas han ayudado a la comprensión y servido como germen de ideas y relaciones a lo largo de todo el desarrollo de la memoria, por poner algunos ejemplos: la relación entre grafo y una matriz proviene de la asignatura de Modelos, la existencia de funciones cuyo error tiende a infinito de Métodos Numéricos, resultados constructivos que después han podido ser implementados (Álgebra y Métodos Numéricos), algunos resultados propios sobres las funciones de activación (Geometría), conocimiento sobre algoritmos de optimización como los genéticos y *KNN* (Metaheurística).

2 Introducción a las redes neuronales

Toma en la actualidad un papel clave en el desarrollo tecnológico el aprendizaje automático [Sar21], siendo las redes neuronales un modelo ampliamente usado en este contexto y por ello nuestro objetivo de democratización.

Comenzaremos pues sentando las bases y formalizando qué significa que una máquina *aprenda* y cómo puede conseguirse, todo ello en la sección 2.1. Continuaremos en las secciones 4.1 y 5 definiendo las redes neuronales, cómo se construyen y evalúan. **Centraremos además nuestros esfuerzos en el estudio de las redes neuronales de una sola capa**, esto se debe a que a pesar de la tendencia actual de utilizar redes neuronales profundas con un aumento de parámetros que ajustar [BS21] [CZLN21] el sustento de esto no deja de ser experimental o basado en cotas de carácter *en el peor de los casos y por el tamaño del espacio de búsqueda*. Pero estos motivos no constituyen una demostración formal ni rigurosa de porqué decantarnos verdaderamente por ello y, es más otros artículos experimentales demuestran que aumentar el número de capas no mejora los resultados [LGMC21].

Así pues, sustentados con la demostración de convergencia universal [HSW89] de las redes neuronales, la cual asegura la convergencia en igualdad de condiciones, tanto para una capa como para varias y en pos de simplificar el modelo. A priori, para establecer nuestras propias hipótesis de optimización desprovistos de sesgos empíricos, comenzaremos nuestro trabajo tratando tan solo de redes neuronales de una sola capa oculta.

2.1. Concepto de aprendizaje

El término de Aprendizaje Automático [His21] fue acuñado en 1959 por Arthur Samuel para hacer referencia a los sistemas informáticos que pudiesen *aprender* por sí mismos, es decir, mejorar su eficacia y rendimiento de forma autónoma a partir de los datos, sin que en esas mejoras intervenga un programador.

Fue en 1997 cuando Tom Mitchell propuso una definición formal de aprendizaje [Mit97], aproximada a la dada en el libro *Learning from data* [CM07], que expondremos en seguida.

El aprendizaje es un proceso por el cual se estima una dependencia desconocida (input-output) o la estructura de un sistema a partir de un número finito de observaciones. Se compone de tres elementos principales:

- Un generador o función de distribución de la cual se extraen vectores aleatorios $x \in I \subset \mathbb{R}^n$ que dependen de una función de densidad desconocida [1].
- Un sistema que produce un vector de salida y por cada entrada del vector x a partir del valor fijo $p(y|x)$, que es desconocido también.
- Una *learning machine* dependiente de parámetros w, que en el caso más general no es más que un conjunto de funciones abstractas cuyos elementos son de la forma $f(x, w)$.

[1] De hecho, encontrar esta función resolvería el problema de aprendizaje

Así pues, el objetivo del aprendizaje automático es encontrar una función que se aproxime a la función de densidad desconocida.

Por lo general la teoría se fundamenta en minimizar el error de estimadores tales como el error cuadrático medio.

2.1.1. Componentes del aprendizaje

A nivel práctico y en nuestro caso, los elementos que consideraremos para el aprendizaje y los cuales serán susceptibles de contribuir a la optimización buscada son (capítulo 1 [AMMIL12]):

En qué consiste la función ideal y desconocida a nivel práctico:

A nivel teórico existen infinitas funciones que coincidan en un conjunto finito de puntos, por lo que verdaderamente no se está buscando una función ideal sino un elemento dentro de la clase de equivalencia de las funciones medibles que coincide en un conjunto numerable de puntos.

- Espacio muestral $\mathcal{X}$.
- Una función objetivo ideal y desconocida $f : \mathcal{X} \longrightarrow \mathcal{Y}$, donde $\mathcal{Y}$ es el conjunto de posibles valores asociados.
- Un conjunto de datos de entrenamiento $\mathcal{D}$, donde los elementos son pares (x, y) con $x \in \mathcal{X}$ y $y \in \mathcal{Y}$ y que representa una observación $f(x) = y$.
- Un algoritmo de aprendizaje es aquel que dado un espacio de búsqueda o de hipótesis posibles $\mathcal{H}$ con elementos de la forma $h :\longrightarrow Y$ con $X \subseteq \mathcal{X}$ y $Y \subseteq \mathcal{Y}$ selecciona un candidato que aproxime f.

En nuestro caso $\mathcal{H}$ será el conjunto de todas las posibles redes neuronales con un cierto número de neuronas y capas ocultas prefijadas.

2.1.2. Tipos de aprendizaje

El aprendizaje a partir de los datos trata en esencia de modelizar un patrón o ley del proceso subyacente a partir de un conjunto finito de muestras. En función de ciertas características del conjunto de datos se tienen distintos tipos de aprendizaje y cabe la pregunta de en qué ámbitos son útiles las redes neuronales o si resultados en problemas concretos son extensibles a otros.

Con el fin de tener una clara distinción, establecemos la siguiente clasificación sobre los tipos de aprendizajes existentes que se basada en el artículo [Sar21], el capítulo primero de [AMMIL12] y el capítulo cuarto página 179 de [Bis06].

2.1.2.1. Aprendizaje supervisado

Cuando el conjunto de datos de entrenamiento contiene de manera explícita lo que es una salida correcta respecto a una entrada estamos frente a un caso de **aprendizaje supervisado**. Este tipo de aprendizaje resuelve tareas de clasificación, donde la salida es discreta o de regresión, con una salida continua. Un ejemplo sería el reconocimiento de dígitos manuscritos donde cada imagen de un dígito tiene asociado cuál es.

2.1.2.2. Aprendizaje por refuerzo

Se trata de un problema de aprendizaje por refuerzo cuando conjunto de datos de entrenamiento no explicita la salida, en su lugar contiene posibles salidas junto a la bondad de éstas.

Pongamos por ejemplo que se quiere enseñar a un sistema a jugar a las damas; de todo el espacio de jugadas posibles, se conocerían tan solo el resultado de algunas situaciones, por ejemplo en la que uno de los jugadores ha ganado.

2.1.2.3. Aprendizaje no supervisado

En este tipo de aprendizaje, los datos de entrenamiento tampoco contienen ninguna información de la salida. Tan solo se tienen los datos de entrada. El **aprendizaje no supervisado** consiste en la tarea de encontrar patrones y estructuras en los datos de entrada, así como de crear una abstracción de los datos. Son problemas de *clustering*, asociación o entre otros, detección de anomalías.

2.1.2.4. Aprendizaje semi supervisado

Combina tanto datos etiquetados como no etiquetados, se utiliza en problemas de clasificación o *clustering* como por ejemplo en traducción o detección de fraudes.

Las redes neuronales son partícipes en todos los tipos de aprendizaje recién mencionados [DZDW18], [BGNR16], [SM02]. Sin embargo centraremos nuestro estudio en el caso de aprendizaje supervisado.

3 Teoría de la aproximación

Puesto que queremos fundamentar desde el origen las redes neuronales, vamos a tratar de abordar el problema de aprendizaje 2.1 desde resultados clásicos de teoría de la aproximación con el fin de analizar su carencias y virtudes (ver conclusiones 3.3). Para ello nuestro objetivo en esta sección será desarrollar la teoría necesaria para demostrar y analizar el teorema de Stone Weierstrass.

3.1. Polinomios de Bernstein

En esta sección introduciremos los polinomios de Bernstein que, vistos como una serie, nos asegurarán una convergencia uniforme a cualquier función continua en un compacto y serán esenciales para nuestra prueba del teorema de Stone-Weierstrass, las pruebas se basan en el manual [Bar47].

Idea intuitiva compacto
Un compacto es un conjunto que se puede cambiar por un subconjunto finito cometiendo un error prefijado.

Comenzaremos recordando el Teorema del Binomio de Newton.

Teorema 3.1 (Binomio de Newton)**.** *Cualquier potencia de un binomio $x+y$ con $x, y \in \mathbb{R}$, puede ser expandido en una suma de la forma*

$$(x+y)^n = \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} x^k y^{n-k}.$$

Tomando ahora para esta igualdad $x \in \mathbb{R}, y = 1-x$ se tiene que

$$1 = (x+(1-x))^n = \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} x^k (1-x)^{n-k}. \tag{3.1}$$

Dada cualquier función continua $f : I \longrightarrow \mathbb{R}$ podríamos multiplicar la ecuación (3.1) por $f(x)$ resultando

$$f(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x) \binom{n}{k} x^k (1-x)^{n-k}. \tag{3.2}$$

Y tomando como dominio $I = [0,1]$ de $f : I \longrightarrow \mathbb{R}$, nos encontramos frente a una ecuación muy sugerente para introducir $B_n(x)$, el *Polinomio n-ésimo de Bernstein*. El cual pretende aproximar la función f a través de los puntos $\frac{k}{n}$ con $n \in \mathbb{N}$ fijo y $k \in \{0, ..., n\}$.

Definición 3.1 (Polinomios de Bernstein)**.** Dada cierta función $f : [0,1] \to \mathbb{R}$, se define el n-ésimo polinomio de Bernstein para f como

$$B_n(x) = B_n(x; f) = \sum_{k=0}^{n} \left(f\left(\frac{k}{n}\right) \binom{n}{k} x^k (1-x)^{n-k} \right).$$

Faltaría por ver si efectivamente nuestro polinomio construido *aproxima lo suficientemente bien* a la f originaria. Basándonos en la igualdad (3.2) y la diferencia entre $f(x)$ y $B_n(x)$ se concluye que

¿Qué es la convergencia uniforme?. Cuando se hable de **convergencia** nos referiremos a encontrar un elemento que **aproxime todo lo bien que queramos**; es decir, fijado cualquier error podemos encontrar un elemento que lo aproxime cometiendo un error menor.
Tengamos presente que en el contexto de funciones el error se puede medir evaluando la imagen de cada punto del dominio; entonces con **uniforme** lo que se dice es que independientemente del error que se busque, se puede encontrar una función que **para todos los puntos del dominio aproxima al objetivo por debajo de ese error**.

¿Con qué idea se está avanzando?.
Nuestro objetivo es ser capaces de aproximar una función a partir de una muestra de sus preimágenes e imágenes. Comenzaremos probando primero que dada una función continua, podemos aproximarla a partir de una muestra concreta. Por eso se está tratando de reescribir la función en términos de cierto conjunto de sus imágenes.

$$|f(x) - B_n(x)| \leq \sum_{k=0}^{n} \left| f(x) - f\left(\frac{k}{n}\right) \right| \binom{n}{k} x^k (1-x)^{n-k} \tag{3.3}$$

Ante tal igualdad la intuición ya nos hace pensar que sea convergente al aumentar el tamaño de la partición. En efecto, en nuestro siguiente teorema, nos cercioraremos de que 3.1 es uniformemente convergente a f en un compacto.

Para la demostración será necesario el siguiente resultado técnico:

Lema 3.1. *Se desea probar la siguiente igualdad*

$$\frac{1}{n} x(1-x) = \sum_{k=0}^{n} \left(x - \frac{k}{n}\right)^2 \binom{n}{k} x^k (1-x)^{n-k}. \tag{3.4}$$

Resultado técnico. La demostración del lema 3.4 se ha incluido para que todo resultado esté fundamentado, solo se utiliza para establecer una cota necesaria en una desigualdad del teorema 3.2.

Demostración. Tengamos ahora presente las siguientes igualdades

$$\binom{n-1}{k-1} = \frac{(n-1)!}{(k-1)!(n-1-(k-1))!} = \frac{k}{n}\binom{n}{k} \tag{3.5}$$

$$\binom{n-2}{k-2} = \frac{(n-2)!}{(k-2)!(n-2-(k-2))!} = \frac{k(k-1)}{n(n-1)}\binom{n}{k} \tag{3.6}$$

Partiendo de la igualdad (3.1):

$$1 = (x + (1-x))^n = \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} x^k (1-x)^{n-k}.$$

Reemplazamos la n por $n-1$ y la k por j y tenemos

$$1 = \sum_{j=0}^{n-1} \binom{n-1}{j} x^j (1-x)^{(n-1)-j}.$$

Multiplicamos por x y aplicamos la igualdad (3.5) resultando

$$x = \sum_{j=0}^{n-1} \frac{j+1}{n} \binom{n}{j+1} x^{j+1} (1-x)^{n-(j+1)}.$$

Renombramos $k = j+1$, por lo que resulta

$$x = \sum_{k=1}^{n} \frac{k}{n} \binom{n}{k} x^k (1-x)^{n-k}.$$

Como el término con $k = 0$ es nulo podemos añadirlo a la sumatoria

$$x = \sum_{k=0}^{n} \frac{k}{n} \binom{n}{k} x^k (1-x)^{n-k}. \tag{3.7}$$

Haremos ahora un razonamiento similar sustituyendo n por $n-2$. Partiendo de (3.1) se tiene que

$$1 = (x + (1-x))^n = \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} x^k (1-x)^{n-k}.$$

Reemplazamos la n por $n-2$ y la k por j y tenemos

$$1 = \sum_{j=0}^{n-2} \binom{n-2}{j} x^j (1-x)^{(n-2)-j}.$$

Multiplicamos por x^2 y aplicamos la igualdad (3.6) resultando

$$x^2 = \sum_{j=0}^{n-2} \frac{(j+2)(j+1)}{n(n-1)} \binom{n}{j+2} x^{j+2} (1-x)^{n-(j+2)}.$$

Renombramos $k = j+2$, por lo que resulta

$$x^2 = \sum_{k=2}^{n} \frac{k(k-1)}{n(n-1)} \binom{n}{k} x^k (1-x)^{n-k}.$$

Como con los términos $k=0$ y $k=1$ se anulan, podemos añadir dichos índices sin modificar la suma

$$x^2 = \sum_{k=0}^{n} \frac{k(k-1)}{n(n-1)} \binom{n}{k} x^k (1-x)^{n-k}.$$

Podemos reescribir la ecuación resultando:

$$(n^2-n)x^2 = \sum_{k=0}^{n} (k^2-k) \binom{n}{k} x^k (1-x)^{n-k}. \tag{3.8}$$

Sumando las dos expresiones que hemos obtenido (3.7) y (3.8) resulta:

$$(n^2-n)x^2 + nx = \sum_{k=0}^{n} ((k^2-k)+k) \binom{n}{k} x^k (1-x)^{n-k}.$$

Dividimos todo entre n.

$$(1-\frac{1}{n})x^2 + \frac{1}{n}x = \sum_{k=0}^{n} \left(\frac{k}{n}\right)^2 \binom{n}{k} x^k (1-x)^{n-k}. \tag{3.9}$$

A continuación sumamos a la igualdad (3.9) la ecuación (3.1) multiplicada por x^2 y la ecuación (3.7) multiplicada por $-2x$ resultando:

$$\left(1-\frac{1}{n}+1-2\right)x^2 + \frac{1}{n}x = \sum_{k=0}^{n} \left(\left(\frac{k}{n}\right)^2 + x^2 - 2x\right) \binom{n}{k} x^k (1-x)^{n-k}.$$

Sacando factor común en el miembro de la izquierda y escribiendo como un cuadrado el factor de la derecha, resulta la igualdad 3.4 que buscábamos

$$\frac{1}{n}x(1-x) = \sum_{k=0}^{n} \left(x-\frac{k}{n}\right)^2 \binom{n}{k} x^k (1-x)^{n-k}.$$

□

Teorema 3.2 (Teorema de aproximación de Bernstein)**.** *Sea f una función continua de un intervalo $I = [0,1]$ con imágenes en los reales. La sucesión de polinomios de Bernstein 3.1 converge uniformemente a f en I.*

Recordaremos antes la definición de convergencia uniforme:

Definición 3.2 (Convergencia uniforme para funciones reales)**.** Dado E un conjunto y $\{f_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ una sucesión de funciones de E a los reales, se dice que dicha sucesión converge uniformemente si para cualquier $\varepsilon > 0$ existe un número natural m tal que para todo $x \in E$ y cualquier natural n que cumpla $n \geq m$ se tiene que

$$|f_n(x) - f(x)| < \varepsilon$$

Comencemos pues con la demostración del teorema 3.2.

Demostración. Para cualquier $\varepsilon > 0$ queremos probar que existe un $m_\varepsilon \in \mathbb{N}$ tal que para todo $x \in I$ e $n \geq m_\varepsilon$ se tiene que $|f(x) - B_n(x)| < \varepsilon$.

Para ello por estar f definida en un intervalo, se tienen dos consecuencias claves:

1. Está acotada, supongamos por $M \in \mathbb{R}$, esto es $|f(x)| \leq M$.
2. En virtud del teorema de Heine-Cantor f es uniformemente continua, es decir, por estar f definida en un compacto, para cualquier $\varepsilon > 0$ existirá un δ_ε tal que para cualesquiera $x, y \in I$ que cumplan $|x - y| < \delta_\varepsilon$ entonces $|f(x) - f(y)| < \varepsilon$.

En virtud de la consecuencia 1. Dado $N \in \mathbb{N}$ fijo pero arbitrario, para cualquier $k \in \{1, ..., N\}$ se tiene que $\frac{k}{N} \in I$ y tomando $x \in I$ podemos acotar por la desigualdad triangular

$$\left|f(x) - f\left(\frac{k}{N}\right)\right| \leq |f(x)| + \left|f\left(\frac{k}{N}\right)\right| \leq 2M.$$

Por (3.3)

$$|f(x) - B_n(x)| \leq \sum_{k=0}^{n} \left|f(x) - f\left(\frac{k}{n}\right)\right| \binom{n}{k} x^k (1-x)^{n-k}.$$

Puesto que tenemos que f acotada por M y es uniformemente continua, para valores de k tales que $\frac{k}{n}$ esté próxima a x, tal término de la sumatoria será pequeño por la continuidad de f en x. Por otro lado si está lo suficientemente alejado, tan solo podremos acotar tal término por $2M$.

Para $\varepsilon > 0$ y para δ_ε de la definición de continuidad uniforme de f podemos encontrar un

$$n \geq \sup\left\{(\delta_\varepsilon)^{-4}, \frac{M^2}{\varepsilon^2}\right\}. \tag{3.10}$$

Separaremos pues nuestra sumatoria en los siguientes dos conjuntos.

$$\mathcal{A}_{nx} = \left\{k \text{ tales que } k \in \{0, ..., n\} \text{ y } \left|x - \frac{k}{n}\right| < n^{\frac{-1}{4}} \leq \delta_\varepsilon\right\},$$

$$\mathcal{B}_{nx} = \{0, ..., n\} \setminus \mathcal{A}_{nx}.$$

Para los elementos de $\mathcal{A}_{nx}$ se obtiene la siguiente estimación:

$$\sum_{k\in\mathcal{A}_{nx}} \left|f(x) - f\left(\frac{k}{n}\right)\right| \binom{n}{k} x^k (1-x)^{n-k} \leq \sum_{k\in\mathcal{A}_{nx}} \varepsilon \binom{n}{k} x^k (1-x)^{n-k} =$$

$$= \varepsilon \sum_{k\in\mathcal{A}_{nx}} \binom{n}{k} x^k (1-x)^{n-k} \leq \varepsilon \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} x^k (1-x)^{n-k} = \varepsilon$$

Para los elementos de $\mathcal{B}_{nx}$ se tiene que $(x-\frac{k}{n})^2 \geq n^{\frac{-1}{2}}$. Usando esto y la consecuencia 1 podemos escribir:

$$\begin{aligned}
&\sum_{k\in\mathcal{B}_{nx}} \left| f(x) - f\left(\frac{k}{n}\right)\right| \binom{n}{k} x^k (1-x)^{n-k} \\
&\leq \sum_{k\in\mathcal{B}_{nx}} 2M \binom{n}{k} x^k (1-x)^{n-k} \\
&= 2M \sum_{k\in\mathcal{B}_{nx}} \frac{\left(x-\frac{k}{n}\right)^2}{\left(x-\frac{k}{n}\right)^2} \binom{n}{k} x^k (1-x)^{n-k} \\
&\leq 2M\sqrt{n} \sum_{k\in\mathcal{B}_{nx}} \left(x-\frac{k}{n}\right)^2 \binom{n}{k} x^k (1-x)^{n-k} \\
&\leq 2M\sqrt{n}\left(\frac{1}{n}x(1-x)\right) \leq \frac{M}{2\sqrt{n}}.
\end{aligned}$$

Para la penúltima desigualdad se ha usado la desigualdad (3.4) del lema previo y para la última que en el intervalo I se satisface que

$$x(1-x) \leq \frac{1}{4}.$$

Además recordemos que se puede tomar un n que satisfaga (3.10) y entonces se concluye que para los valores de $\mathcal{B}_{nx}$ se puede acotar la desigualdad por ε. Por tanto, para un n convenientemente seleccionado, se ha acotado la desigualdad para los índices $\mathcal{A}_{nx}$ y $\mathcal{B}_{nx}$, es decir todos los elementos de $\{0,\ldots,n\}$, por lo que concluimos que

$$|f(x) - B_n(x)| \leq 2\varepsilon,$$

independientemente del valor de x, por lo que se prueba que la sucesión de polinomios de Bernstein converge uniformemente a f en I. □

Realizando un repaso global habiendo acabado el teorema, se pueden extraer que, junto a un ingenioso manejo de operaciones y acotaciones; la clave del resultado reside en las consideraciones en 1 y 2 y estas a su vez en la compacidad de I.

Por su parte, la selección del dominio de $I = [0,1]$ viene determinada ya que los nodos $\{\frac{k}{N} : k \in \{0,...,N\}\}$ sobre los que se construye el *N-ésimo polinomio de Bernstein* deben pertenecer a I.

Sin embargo, tal dificultad es fácilmente salvable con un homeomorfismo.

Como resultado de relajar el dominio donde se define f, pidiéndole tan solo compacidad nace el siguiente corolario.

¿Qué es un homeomorfismo?.
A nivel intuitivo, un homeomorfismo sería la transformación de un objeto en otro, con la condición de que tal cambio consista en una deformación *sin roturas*. Es decir, si éste fuera de plastilina, existiría un homeomorfismo entre la figura original y aquellas que pudiéramos construir sin separar totalmente la masilla o crear y eliminar agujeros. Ejemplo de objetos homeomorfos serías: un pelota y un vaso, una taza y un rosco. El vaso y la taza no serían homeomorfos, ya que el número de agujeros que tienen es distinto.

Corolario 3.1 (Teorema de aproximación de Weierstass)**.** *Sea f una función continua definida en un intervalo cerrado y acotado y con valores reales. Se tiene que f puede ser aproximada uniformemente con polinomios.*

Demostración. Si f se encuentra definida en $[a,b]$ con $a < b$ y bastará considerar la función

$$g(t) = f((b-a)t + a) \text{ con } t \in [0,1].$$

Esta función está definida en $[0,1]$, tiene la misma imagen que f y mantiene la continuidad ya que se ha construido a través del homeomorfismo $H : [0,1] \longrightarrow [a,b]$, con $H(t) = (b-a)t + a$.

En virtud del teorema de convergencia 3.2 g podrá ser aproximada uniformemente por una sucesión de polinomios de Bernstein $\{S_n\}_{n\in\mathbb{N}}$. Gracias a ella se puede construir la sucesión $\{S_n \circ H^{-1}\}_{n\in\mathbb{N}}$, que aproxima uniformemente a f. □

3.2. Teorema de Stone-Weierstrass

Lema 3.2. *Sean tres funciones $f_1, f_2, g : K \longrightarrow \mathbb{R}$ tales que*

$$|f_2 - g| \leq \varepsilon.$$

Entonces la diferencia entre los máximos y respectivamente mínimos satisface que:

$$|\max\{f_1, f_2\} - \max\{f_1, g\}| \leq \epsilon$$

y

$$|\min\{f_1, f_2\} - \min\{f_1, g\}| \leq \epsilon.$$

Demostración. Sabemos que

$$\max\{f, g\} = \frac{1}{2}(f + g + |f - g|)$$
$$\min\{f, g\} = \frac{1}{2}(f + g - |f - g|).$$

Por lo que

$$\begin{aligned}
|\max\{f_1, f_2\} - \max\{f_1, g\}| &= \left|\frac{1}{2}(f_1 + f_2 + |f_1 - f_2|) - \frac{1}{2}(f_1 + g + |f_1 - g|)\right| \\
&= \frac{1}{2}\big|f_1 + f_2 + |f_1 - f_2| - f_1 - g - |f_1 - g|\big| \\
&= \frac{1}{2}\big|f_2 - g + |f_1 - f_2| - |f_1 - g|\big| \\
&\leq \frac{1}{2}(|f_2 - g| + |f_2 - g|) \\
&\leq |f_2 - g| \\
&\leq \varepsilon.
\end{aligned}$$

Para el mínimo se razona igual:

$$\begin{aligned}
|\min\{f_1, f_2\} - \min\{f_1, g\}| &= \left|\frac{1}{2}(f_1 + f_2 - |f_1 - f_2|) - \frac{1}{2}(f_1 + g - |f_1 - g|)\right| \\
&= \frac{1}{2}\big|f_1 + f_2 - |f_1 - f_2| - f_1 - g + |f_1 - g|\big| \\
&= \frac{1}{2}\big|f_2 - g - |f_1 - f_2| + |f_1 - g|\big| \\
&\leq \frac{1}{2}(|f_2 - g| + |f_2 - g|) \\
&\leq |f_2 - g| \\
&\leq \varepsilon.
\end{aligned}$$

□

Teorema 3.3 (Teorema de Stone-Weierstrass)**.** *Sea K un subconjunto compacto de $\mathbb{R}^p$ y sea $\mathcal{A}$ una colección de funciones continuas de K a $\mathbb{R}$ que separa puntos en K, es decir cumpliendo las siguientes propiedades:*

1. *La función constantemente uno, definida como $e(x) = 1$, para cualquier $x \in K$ pertenece a $\mathcal{A}$.*
2. *$\mathcal{A}$ es cerrado para sumas y productos por escalares reales. Si f, g pertenece a $\mathcal{A}$, entonces $\alpha f + \beta g$ pertenece a $\mathcal{A}$.*
3. *$\mathcal{A}$ es cerrado para productos. Para $f, g \in \mathcal{A}$, se tiene que fg pertenece a $\mathcal{A}$.*
4. *Separación de K, es decir, si $x \neq y$ pertenecen a K, entonces existe una función f en $\mathcal{A}$ de tal manera que $f(x) \neq f(y)$.*

Entonces se tiene que toda función continua de K a $\mathbb{R}$ puede ser aproximada en K por funciones de $\mathcal{A}$.

Demostración. **Paso 1: Para $f \in \mathcal{A}$ la función valor absoluto de f puede ser aproximada por elementos de $\mathcal{A}$.**

Probaremos que para cualquier $\varepsilon > 0$ y $f \in \mathcal{A}$, existe $g \in \mathcal{A}$ tal que

$$\big|g(x) - |f(x)|\big| < \varepsilon \quad \forall x \in K.$$

Por el teorema de Heine f es acotada, es decir existe $M \in R^+$ tal que $|f(x)| \leq M$ para $x \in K$.

Consideremos ahora la función valor absoluto, $\phi(t) = |t|$ definida en el dominio $I = [-M, M]$. Por el teorema de aproximación de Weierstrass 3.1 para cualquier $\varepsilon > 0$ existirá un polinomio p cumpliendo que

$$\big||t| - p(t)\big| < \varepsilon \quad \forall t \in I.$$

Puesto que $t \in I$ no son más que las posibles imágenes que puede tomar f en K inferimos entonces que

$$\big||f(x)| - p \circ f(x)\big| < \varepsilon \quad \forall x \in K$$

Como $f \in \mathcal{A}$ y p es un polinomio, $p \circ f$ son sumas de potencias de f multiplicadas por escalares. Como $\mathcal{A}$ es cerrado para estas operaciones tenemos que la función $p \circ f$ pertenece a $\mathcal{A}$ de donde se deduce $|f|$ se puede aproximar todo lo que queramos por elementos de $\mathcal{A}$.

Tenemos con esto que para $f, g \in \mathcal{A}$ también es capaz de aproximar la función a máximo e mínimo gracias a que:

$$\max\{f, g\} = \frac{1}{2}(f + g + |f - g|)$$
$$\min\{f, g\} = \frac{1}{2}(f + g - |f - g|).$$

Paso 2: Para cada familia finita $\mathcal{F} \subset \mathcal{A}$ las funciones $\max\{\mathcal{F}\}$ y $\min\{\mathcal{F}\}$ pueden ser aproximadas por elementos de de $\mathcal{A}$

Razonando por inducción: para el caso base $n = 2$ ya se ha probado. Si $n > 2$ entonces podemos escribir (los razonamientos son idénticos para la función mínimo):

$$\max\{f_1, f_2, \ldots, f_n\} = \max\{f_1, \max\{f_2, \ldots, f_n\}\},$$

por hipótesis de inducción existe $g \in \mathcal{A}$ tal que

$$|\max\{f_2, \ldots, f_n\} - g| < \frac{\varepsilon}{2}.$$

Considerando entonces $\max\{f_1, g\}$, por el caso base existirá un $g' \in \mathcal{A}$ tal que

$$|\max\{f_1, g\} - g'| < \frac{\varepsilon}{2}. \tag{3.11}$$

Por desigualdad triangular, el lema 3.2 y la ecuación (3.11) se tiene que

$$|\max\{f_1, f_2, \ldots, f_n\} - g'| \leq |\max\{f_1, f_2, \ldots, f_n\} - \max\{f_1, g\}| + |\max\{f_1, g\} - g'| \leq \varepsilon.$$

Probando con ello lo buscado.

Paso 3: Cualquier función continua $f \in \mathcal{C}(K, \mathbb{R})$ puede ser aproximada con elementos de $\mathcal{A}$

Vamos a proceder ahora con nuestro objetivo principal. Queremos probar que para cualquier función continua $f : K \longrightarrow \mathbb{R}$ y cualquier $\varepsilon > 0$ existe $g \in \mathcal{A}$ tal que

$$|f(x) - g(x)| < \varepsilon \quad \forall x \in K.$$

Tomamos $s, t \in K$ distintos y por la hipótesis de separación de puntos existirá $u \in \mathcal{A}$ tal que $u(s) \neq u(t)$, de esta forma definimos

$$\tilde{h}_{st}(x) = f(s) + (f(t) - f(s))\frac{u(x) - u(s)}{u(t) - u(s)},$$

se tiene que $\tilde{h}_{st} \in \mathcal{A}$ y satisface que $\tilde{h}_{st}(s) = f(s)$ y $\tilde{h}_{st}(t) = f(t)$.

Tomamos $s \in K$ fijo pero arbitrario y definimos el siguiente conjunto

$$U_t = \left\{u \in K \colon \tilde{h}_{st}(u) < f(u) + \frac{\varepsilon}{2}\right\}.$$

Notemos que U_t es un conjunto abierto ya que $\tilde{h}_{st} - f$ es una función continua y se está tomando la imagen inversa de un abierto. Además se tiene que $\{t, s\} \subset U_t$ para cualquier $t \in K \setminus \{s\}$. Por lo que podemos escribir

$$K = \bigcup_{t \in K \setminus \{s\}} U_t$$

y por ser K compacto admitirá un recubrimiento finito dado por $I_u = \{t_1, \ldots, t_n\} \subset K$, es decir

$$K = \bigcup_{t \in I_u} U_t. \tag{3.12}$$

Definimos ahora

$$h_s(x) = \max_{t \in I_u}\{\tilde{h}_{st}(x) \colon x \in U_t\} \text{ para cada } x \in K.$$

Así definida h_s satisface que:

- Para cada $x \in K$ se tiene que $h_s(x) < f(x) + \frac{\varepsilon}{2}$.
  Ya que por (3.12) $h_s(x) = \tilde{h}_{st_j}(x)$ y como $x \in U_{t_j}$ entonces $\tilde{h}_{st_j}(x) < f(x) + \frac{\varepsilon}{2}$.
- La función h_s puede ser aproximada con la precisión que se desee por elementos de $\mathcal{A}$ como ya hemos visto en el paso 2. Sea $h'_s \in \mathcal{A}$ tal que $|h'_s - h_s| < \frac{\varepsilon}{2}$.
- Para cada $x \in K$ se tiene que $h_s(x) < f(x) + \frac{\varepsilon}{2}$ y que $\frac{\varepsilon}{2} > |h'_s - h_s| \geq h'_s - h_s$; sumando ambas ecuaciones se tiene que

$$h'_s(x) < f(x) + \varepsilon.$$

Y definimos para cada $s \in K$ el conjunto

$$V_s = \left\{ v \in K \colon h'_s(x) > f(x) - \frac{\varepsilon}{2} \right\}. \tag{3.13}$$

Y repitiendo el mismo argumento que para U_t puede verse que K admitirá un subrecubrimiento finito por abiertos:

$$K = \bigcup_{s \in I_s} V_s$$

con $I_v = \{s_1, \ldots, s_m\} \subset K$. Además g definida como:

$$g(x) = \min_{s \in I_v} \{h'_s(x) \colon x \in V_s\}$$

satisface:

- Por el paso 2 sabemos que existe $g' \in \mathcal{A}$ tal que $|g' - g| < \frac{\varepsilon}{2}$.
- Para cada $x \in K$ se tiene que $g(x) > f(x) - \frac{\varepsilon}{2}$. Ya que por (3.13) $g(x) = h'_{s_i}(x)$ y como $x \in V_{s_i}$ entonces $h'_{s_i}(x) > f(x) - \frac{\varepsilon}{2}$.
- Para cada $x \in K$ se tiene que $g(x) < f(x) + \frac{\varepsilon}{2}$.
  Ya que por (3.13) para cada x existe i tal que $g(x) = h'_{s_i}(x)$ y en las propiedades de h'_s habíamos visto que $h'_s(x) < f(x) + \frac{\varepsilon}{2}$ para s arbitrario.
- De las últimas observaciones se deduce que $|g - f| < \frac{\varepsilon}{2}$.

De estas observaciones se tiene que $g' \in \mathcal{A}$ cumple

$$|g' - f| \leq |g - f| + |g' - g| < \frac{\varepsilon}{2} + \frac{\varepsilon}{2} = \varepsilon.$$

Es decir, f puede ser aproximada por elementos de $\mathcal{A}$. □

3.3. Conclusiones teoría de la aproximación

Acabamos de probar en 3.2 que cualquier función continua es aproximable uniformemente con polinomios en un compacto. Sin embargo este enfoque tiene los siguientes problemas:

1. La prueba obtenida no nos permite una forma constructiva sencilla de obtener el polinomio.

2. Aproximando con polinomios se corre el riesgo de que fuera de la muestra el error sea demasiado grande. Como muestra de ello damos un ejemplo patológico reflejado en la figura 3.1; se pretende aproximar la función $f : [-3, 3] \longrightarrow \mathbb{R}$ definida como

$$f(x) = \begin{cases} e^{-x} + 4 & si \quad x \leq 1 \\ \\ \log x & si \quad x > 1 \end{cases}$$

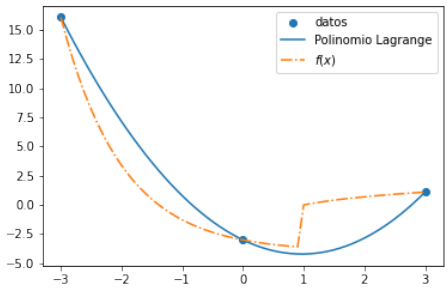
   usando el método de interpolación de Lagrange; en este caso el error tiende a infinito conforme aumenta el número de nodos. [1]

   El problema que evidencia este caso patológico es el tratar de abarcar todo el dominio con un mismo polinomio ¿y si en lugar de eso se hicieran aproximaciones en una partición concreta del dominio? El resultado sería una función definida a trozos. La cuestión es que esta aproximación sería difícil de implementar de manera eficiente; sin embargo, es el germen y el enfoque de las *funciones de activación*.

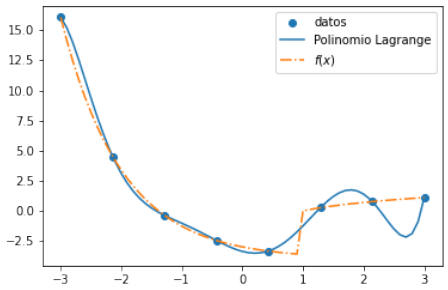
3. Y otra cuestión, de corte físico o filosófico ¿son todos los fenómenos observables continuos? Sería extraño que así fueran, lo que evidencia la necesidad de formular una teoría más general.

De todas formas no abandonaremos del todo esta teoría; porque como ya veremos, el teorema de Stone Weierstrass 3.2 jugará un papel fundamental en el diseño y demostración de las redes neuronales como aproximadores universales, ya que nos brinda los requisitos mínimos que debe de tener un conjunto para ser capaz de aproximar cualquier función continua.

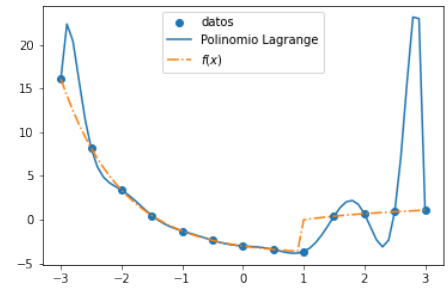
[1] Puede encontrar la implementación del código que genera las gráficas en nuestro repositorio https://github.com/BlancaCC/TFG-Estudio-de-las-redes-neuronales, en el fichero `Lagrange.ipynb` que se encuentra en el directorio de teoría de la aproximación de la memoria.



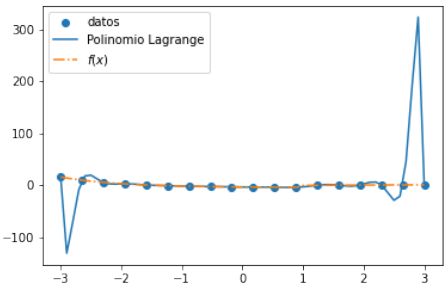
(a) Polinomio de Lagrange utilizando 3 datos



(b) Polinomio de Lagrange utilizando 8 datos



(c) Polinomio de Lagrange utilizando 13 datos



(d) Polinomio de Lagrange utilizando 18 datos

Figura 3.1: Ejemplo de aproximación de la función $f(x)$ a partir de los polinomios de Lagrange.

4 Las redes neuronales son aproximadores universales

El objetivo principal de este capítulo es dar una modelización propia de red neuronal y demostrar que es un aproximador universal a cualquier función medible.

El capítulo se organiza de la siguiente manera:

1. **Introducción de nuestro modelo** de red neuronal $\mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s)$ y comparación con los usuales en la sección 4.1.

2. Demostración de que **las redes neuronales modelizadas son aproximadores universales**.

   - Para ello serán necesarias una serie de **definiciones previas** que se encuentran en la sección 4.3, las más relevantes son la de función de activación y los espacios $\sum\prod^d(G)$.
   - El resultado de convergencia universal es producto de una sucesión de **conseguir aproximar espacios a partir de otros**, concretamente las relaciones *es denso en* y dónde se demuestran son:

     $$\mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}) \overset{4.5}{\Longrightarrow} \sum\prod^d(\psi) \overset{4.4}{\Longrightarrow} \sum\prod^d(G) \overset{4.2}{\Longrightarrow} \mathcal{C}(\mathbb{R}^d) \overset{4.3}{\Longrightarrow} \mathcal{M}(\mathbb{R}^d).$$

     Además se verá en la sección 4.5 que $\mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ es denso en $L_p(\mathbb{R}^d, \mu)$ lo que nos permitirá establecer propiedades y entender cómo funciona nuestro modelo para problemas concretos de regresión y clasificación.
   - En la sección 4.6 se demostrará la convergencia universal para el espacio $\mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s)$.

3. Consideración en la sección 4.7 si **en la práctica** se tiene la **capacidad computacional de actuar como aproximador universal**.

4.1. Definición de las redes neuronales *Feedforward Networks* de una capa oculta

Ya estamos en condiciones de introducir qué es una red neuronal, cómo está construida y en qué consiste el *aprendizaje* de la misma. Concretamente construiremos el tipo particular *Feedforward Neural Networks*, al cual nos referiremos de ahora en adelante como red neuronal.

De acorde con nuestra filosofía de trabajo expuesta en la introducción del capítulo 2 partiremos de un modelo de una sola capa oculta y además comenzaremos presentando el modelo que hemos considerado más conveniente; esta decisión es argumentada en el capítulo 5.

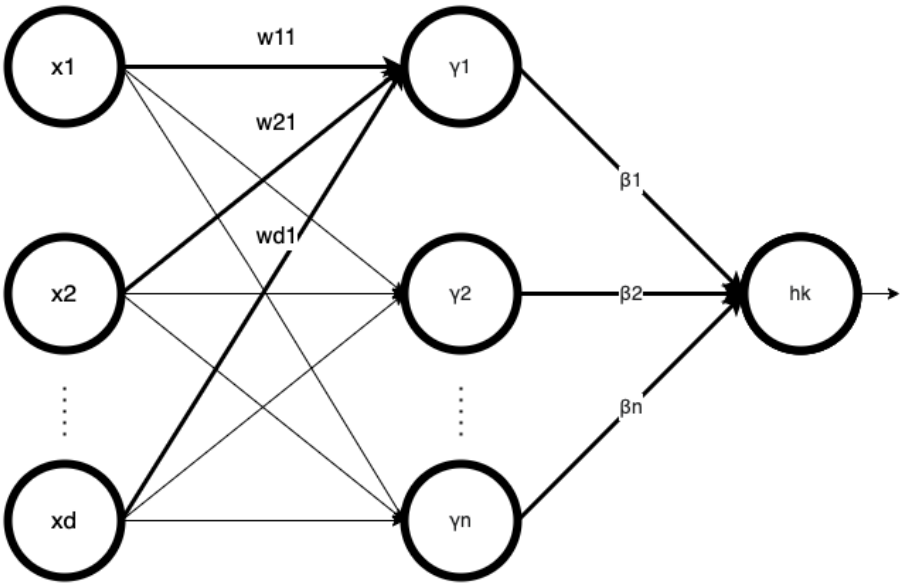


Figura 4.1: *Grafo* de una red neuronal de una capa oculta

Aportación original

Definición 4.1 (Redes neuronales de una capa oculta)**.** Dados $X \subseteq \mathbb{R}^d, Y \subseteq \mathbb{R}^s$ y Γ un conjunto no vacío de funciones medibles definidas de $\mathbb{R}$ a $\mathbb{R}$, denotaremos como

$$\mathcal{H}(X,Y) = \{h : X \longrightarrow Y / \quad h_k(x) = \sum_{i=1}^{n} \beta_{ik}\gamma_i(A_i(x)),$$

donde h_k es la proyección k-ésima de h con $k \in \{1,\dots,s\}$,

$n \in \mathbb{N}, \gamma_i \in \Gamma, \beta_{ik} \in \mathbb{R}$ y A_i una aplicación afín de $\mathbb{R}^d$ a $\mathbb{R}\}$.

Interpretación fórmula Observemos que n es el número de neuronas de la capa oculta. Es decir lo que en el grafo 4.1 serían los nodos interiores y se correspondería con los términos $\gamma_i(A_i(x))$.

Es habitual representar una red neuronal de forma matricial, veremos que tal forma es equivalente a la definición dada.

Consideramos la aplicación inclusión $i : \mathbb{R}^r \longrightarrow \mathbb{R}^{r+1}$ dada por $i((x_1,\dots,x_d)) = (1,x_1,\dots,x_d)$. Para coeficientes $w_i \in \mathbb{R}$ toda función afín es de la forma $A_i(x) = \sum_{j=1}^{d}(w_{ji}x_j) + w_{0i}$, tomando $W_i = (w_{0i}, w_{1i}, \dots, w_{ri}) \in \mathbb{R}^{r+1}$ tenemos que $A_i(x) = W_i \cdot i(x)$ como queríamos probar.

Además también se suele mostrar de manera pedagógica con un grafo como el mostrado en la figura 4.1.

Qué son las funciones medibles y porqué las usamos en nuestra definición. A nivel intuitivo una función medible es aquella, que por muy extraña que sea su imagen (los valores que toma su salida) está acotada casi siempre, lo que a nivel práctico significa que *podemos observar y cuantificar sus valores.* Con esto pretendemos que nuestra definición Γ sea lo menos restrictiva posible.

Componentes de la red neuronal

A la vista de la definición dada notemos que cada elemento de $\mathcal{H}(X,Y)$ viene determinado por los coeficientes de las distintas β y ws de la función afín. Como veremos más adelante estos son los valores que *aprende una red neuronal*.

Diferencia con otras definiciones

En otros textos como en el capítulo cinco, páginas 227-256 del libro [Bis06] y las notas online sobre redes neuronales de [AMMIL12] se presentan las redes neuronales de una capa como

$$\begin{aligned} y_k(x,w) &= \theta_k\left(\sum_{j=1}^{M} w_{ji}^{(2)}\sigma_j\left(\sum_{i=1}^{D} w_{ji}^{(1)}x_i + w_{j0}^{(1)}\right) + w_{k0}^{(2)}\right) \\ &= \theta_k\left(\sum_{j=1}^{M} A_k^{(n_k)}\left(\sigma\left(A_{jk}^{r}(x)\right)\right)\right) \text{ para cada } k \in \{1,\dots,K\}. \end{aligned}$$

Donde θ_k representa una función de *clasificación*, σ_j lo que se suele llamar *función de activación* y a la que además se le exige que sea diferenciable.

Las diferencias con nuestra definición son las siguientes

- **Desaparece la función de clasificación** θ.
- **Se elimina un parámetro** por cada neurona.
- No se le exige condición de diferenciabilidad a priori, ya que a priori no existe ninguna hipótesis teórica que fuerce a tal restricción, como hemos visto en 4.1.

Se justificarán y se matizarán tales decisiones en la sección 5.2.

4.2. Las redes neuronales son aproximadores universales

Tras las definición 4.1 de red neuronal expuesta, es pertinente la pregunta si tal estructura será capaz de aproximar con éxito una función genérica desconocida.

Aunque las redes neuronales multicapa ya se venían aplicando con anterioridad, véase por ejemplo los usos expuestos durante la primera conferencia internacional de redes neuronales de [43087] de 1987, no fue hasta 1989 que se descubrió formalmente su alcance. Tal delimitación se propuso en el artículo **Multilayer Feedforward Networks are Universal Approximators** [HSW89] escrito por Kurt Hornik, Maxwell Stinchcombe y Halber White enunciando:

Teorema 4.1. ***Las redes feedforward multicapa son una clase de aproximadores universales*** *Una red neuronal feedforward multicapa estándar con tan solo una capa oculta y con una función de activación cualquiera es capaz de aproximar cualquier función Borel medible con dominios y codominios de dimensión finita (no necesariamente iguales) y con el nivel de precisión que se desee siempre y cuando se utilicen suficientes neuronas. En este sentido las redes feedforward multicapa son una clase de aproximadores universales.*

En las secciones siguientes, con el fin de alcanzar una comprensión profunda de las redes neuronales, trataremos de desgranar y profundizar en el artículo y su demostración. Primero precisaremos o introduciremos conceptos elementales sobre redes neuronales 4.3, después demostraremos el teorema en el caso real 4.2 e iremos refinando y generalizando los resultados hasta probar el resultado enunciado 4.1 para una capa oculta.

Idea intuitiva conjunto denso. Si S es denso en T, se está está diciendo que **los elementos de S son capaces de aproximar cualquier elemento de T con la precisión que se desee**.

El esquema general será:

$$\mathcal{H}(\mathbb{R}^d,\mathbb{R}) \overset{4.5}{\Longrightarrow} \sum\prod^{d}(\psi) \overset{4.4}{\Longrightarrow} \sum\prod^{d}(G) \overset{4.2}{\Longrightarrow} \mathcal{C}(\mathbb{R}^d) \overset{4.3}{\Longrightarrow} \mathcal{M}(\mathbb{R}^d).$$

- Las redes neuronales que nosotros hemos modelizado son densas en un espacio más general que hemos denominado *Anillo de aproximación de redes neuronales* generado a partir de una función de activación ψ.
- Que a su vez es denso en el *Anillo de aproximación de redes neuronales* generado a partir de una función medible G.
- El espacio *Anillo de aproximación de redes neuronales* es denso en el de las funciones continuas.
- Las funciones continuas son densas en el espacio de funciones medibles.

Si quisiéramos situar en este esquema a otras definiciones de redes neuronales las situaríamos entre nuestro modelo y el espacio *Anillo de aproximación de redes neuronales*; en el capítulo 5 se probará tal resultado y analizarán los beneficios de basarnos en un modelo más simple.

4.3. Definiciones primeras

Comenzaremos presentando definiciones básicas sobre redes neuronales.

Definición 4.2 (Función de activación)**.** Una función $\psi : \mathbb{R} \longrightarrow [0,1]$ es una **función de activación** si cumple las siguientes propiedades:

(I) Es no decreciente.

(II) $\lim_{x\to\infty} \psi(x) = 1$.

(III) $\lim_{x\to-\infty} \psi(x) = 0$.

Observación sobre la idoneidad de cada función activación: Se probará la convergencia de las redes neuronales independientemente de la función de activación seleccionada. Cabe entonces la pregunta ¿Existen funciones de activación más democráticas que otras? Se discutirá esta pregunta en 6.

Ejemplos comunes de funciones de activación son

- **Funciones indicadoras** 4.2a: $\psi(\lambda) = 1_{\{\lambda>\lambda_0\}}$ con $\lambda_0 \in \mathbb{R}$.
- **Funciones umbral** 4.2b: Una función umbral, es una función booleana monótona $\psi_w : \{0,1\}^n \longrightarrow \{0,1\}$, donde para $w \in \mathbb{R}^n$, $t \in \mathbb{R}$ fijos se satisface que

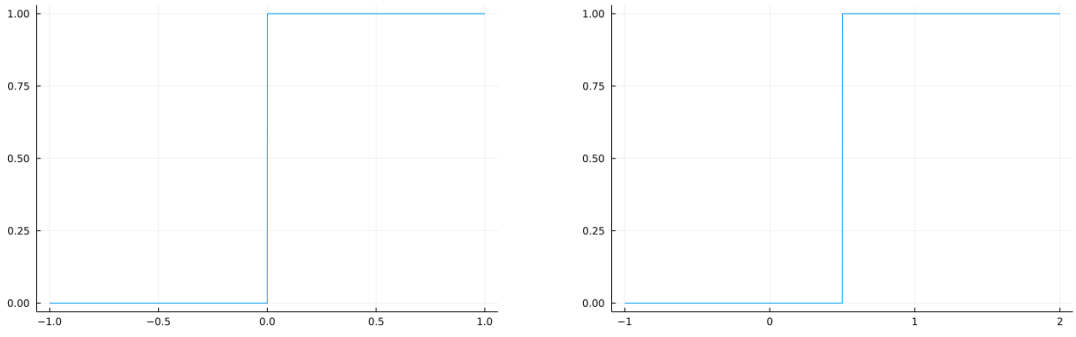
$$\psi_w(x) = \begin{cases} 1, & si \quad w \cdot x \geq t \\ 0, & si \quad w \cdot x < t. \end{cases}$$

- **Función rampa** 4.2c: $\psi(\lambda) = \lambda 1_{\{0\leq\lambda\leq1\}} + 1_{\{\lambda>1\}}$.
- **La función *cosine squasher*** de Gallant and White 4.2d (1988) [GW88].

$$\psi(\lambda) = \left(1 + \cos\left(\lambda + 3\frac{\pi}{2}\right)\frac{1}{2}\right) 1_{\{\frac{-\pi}{2}\leq\lambda\leq\frac{\pi}{2}\}} + 1_{\{\frac{\pi}{2}<\lambda\}}.$$

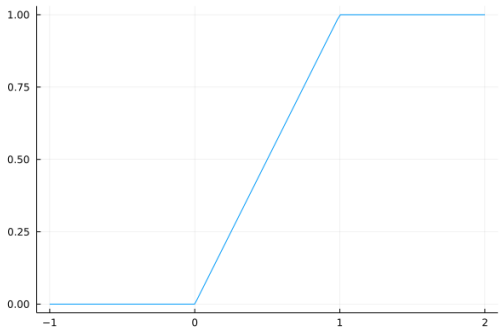
Notemos que así definidas las funciones de activación son medibles, ya que la imagen inversa de un abierto de $[0,1]$ siempre será un conjunto medible de $\mathbb{R}$ (capítulo 7 página 77 [Hal74]).

Cabe destacar que la definición tomada es la propuesta en [HSW89] y que existen otras posibles definiciones menos restrictivas con las que también se ha probado la convergencia universal. Por ejemplo podrían aceptarse funciones de activación no continuas (véase [Fun89]); o como se demuestra en [SM15] y en [CC95], funciones de activación no polinómicas y no acotadas.

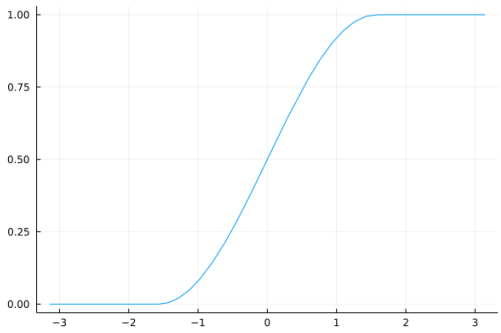


(a) Función indicadora $\lambda_0 = 0$

(b) Función umbral $w = (2)$, $t = 1$



(c) Función rampa



(d) *Cosine Squasher*

Figura 4.2: Ejemplos de funciones de activación

Las funciones de activación Γ son la clave del aprendizaje
La idea intuitiva es que cada neurona lo que se hace es *colocar* por transformaciones afines la imagen de la función de activación en el espacio con el fin de aproximar una región de la imagen de la función ideal. Por lo tanto, la forma que ésta tenga será determinante en el número de neuronas necesarias para la convergencia.

Para cualquier natural d mayor que cero denotaremos por $\mathcal{A}(\mathbb{R}^d)$ al conjunto de todas las **funciones afines** de $\mathbb{R}^d$ a $\mathbb{R}$. Es decir el conjunto de funciones de la forma $A(x) = w \cdot x + b$ donde x y w son vectores de $\mathbb{R}^d$, $b \in \mathbb{R}$ es un escalar y $\cdot$ representa el producto escalar usual. En este contexto, x corresponde al vector entrada de la red neuronal, w los pesos de la red que se multiplicarán con x en la capa intermedia y b el sesgo.

Definición 4.3 (Formalización de una red neuronal de una capa oculta y salida real)**.** Para cualquier función Borel medible G, definida de $\mathbb{R}$ a $\mathbb{R}$ y cualquier natural positivo $d \in \mathbb{N}$ se define a la clase de funciones $\mathcal{H}_G(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ como

$$\mathcal{H}_G(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}) = \{f : \mathbb{R}^d \longrightarrow \mathbb{R} / \quad f(x) = \sum_{j=1}^{q} (\beta_j G(A_j(x))),$$
$$x \in \mathbb{R}^d, \beta_j \in \mathbb{R}, A_j \in \mathcal{A}(\mathbb{R}^d), q \in \mathbb{N}\}.$$

Idea tras la definición de $\mathcal{H}_G(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$. Nótese que de acorde a la definición 4.1 lo que se está refiriendo es la clase de las redes neuronales de una capa oculta y **salida de una dimensión**. Donde cada sumando representa una neurona de la capa oculta.

Conforme avancen los resultados teóricos veremos que $\mathcal{H}_G(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ no depende de la función G seleccionada; así pues, tras enunciar tales resultados nos referiremos sin ambigüedad a tal conjunto como $\mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$.

Definiremos a continuación una familia de funciones más generales que $\mathcal{H}_G(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ con la intención de que actúe como nexo de unión entre la clase de funciones continuas y las redes

neuronales de una capa facilitándonos con ello la prueba de los resultados. La familia que introduciremos solo tiene una utilidad teórica, es decir no tendrá ninguna relevancia a nivel práctico en cuanto a implementaciones.

Motivación de la definición de $\sum\prod^d(G)$. En un principio será más fácil demostrar que con funciones de esta clase seremos capaz de aproximar cualquier función continua. De esta manera este conjunto actuará de nexo de unión entre las funciones continuas y las redes neuronales facilitando las demostraciones. De ahora en adelante nos referiremos a este conjunto como al **de anillo de aproximación**.

Definición 4.4 (Anillo de aproximación de redes neuronales)**.**

$$\sum\prod^{d}(G) = \{f : \mathbb{R}^r \longrightarrow \mathbb{R} / \quad f(x) = \sum_{j=1}^{q} \beta_j \prod_{k=1}^{l_j} G(A_{jk}(x)),$$
$$x \in \mathbb{R}^d, \beta_j \in \mathbb{R}, A_{jk} \in \mathcal{A}(\mathbb{R}^d); l_j, q \in \mathbb{N}\}.$$

Notemos que $\mathcal{H}_G(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ se recupera en el caso particular en el que $l_j = 1$ para todo j. Los elementos de $\sum\prod^d(G)$ son combinaciones lineales de productos finitos de neuronas.

Introducimos a continuación la notación de los conjuntos de funciones que seremos capaces de aproximar.

Denotamos por $\mathcal{C}(\mathbb{R}^d)$ al conjunto de funciones continuas con dominio en $\mathbb{R}^d$ y codominio $\mathbb{R}$, por $\mathcal{M}(\mathbb{R}^d)$ al conjunto de todas las funciones Borel medibles de $\mathbb{R}^d$ a $\mathbb{R}$; y por B^d a la σ-álgebra de Borel en $\mathbb{R}^d$.

En lo que respecta a definiciones anteriores, $\mathcal{H}_G(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ y $\sum\prod^d(G)$ están contenidos en $\mathcal{M}(\mathbb{R}^d)$ para cualquier función Borel-medible G. Si G es continua entonces $\mathcal{H}_G(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ y $\sum\prod^d(G)$ pertenecen a $\mathcal{C}(\mathbb{R}^d)$. Tengamos presente que $\mathcal{C}(\mathbb{R}^d)$ es un subconjunto de $\mathcal{M}(\mathbb{R}^d)$.

De ahora en adelante nos referiremos a Borel-medible como medible.

Aplicación práctica aprendizaje automático y relación con las funciones medible. A nivel práctico se tiene un conjunto de datos para los cuales queremos extraer un patrón que nos permita predecir la naturaleza de datos nuevos. Es por ello necesario suponer que estos datos están regidos por alguna regla, la cual puede ser todo lo extraña posible pero que toma valores que pueden ser observables y cuantificables en la mayoría de los casos, estos comportamientos son formalizados matemáticamente con **funciones medibles**.

4.3.1. Reflexión sobre el tipo de funciones que se pueden aproximar

La existencia de funciones no medibles manifiesta una limitación de la formalización actual de las redes neuronales que plantea las siguientes preguntas:

1. ¿Supone la existencia de este tipo de funciones una verdadera limitación a nivel práctico?

2. ¿Se podría construir alguna arquitectura que sí que las aproximara?

Continuando con el hilo de la segunda cuestión, si se carece de un espacio vectorial, de una medida, ¿Cómo se podría construir una sucesión de funciones que se aproxime? Quizás habría que buscar características más intrínsecas del problema en cuestión, razonamientos topológicos.

Idea intuitiva conjunto denso. Si S es denso en T, se está está diciendo que **los elementos de S son capaces de aproximar cualquier elemento de T con la precisión que se desee**.

Definición 4.5 (Subconjunto denso)**.** Dado un subconjunto S de un espacio métrico (X, ρ), se dice que S es denso por la distancia ρ en subconjunto T si para todo ε positivo y cualquier $t \in T$ existe un $s \in S$ tal que $\rho(s, t) \leq \varepsilon$.

Un ejemplo habitual es en el espacio métrico $(\mathbb{R}, |\cdot|)$ con $|\cdot|$ el valor absoluto, el subconjunto $T = \mathbb{R}$ y S los números irracionales, $S = \mathbb{R} \setminus \mathbb{Q}$.

Definición 4.6. Un subconjunto S de $\mathcal{C}(\mathbb{R}^d)$ se dice que es **uniformemente denso para compactos** en $\mathcal{C}(\mathbb{R}^d)$ si para cada subconjunto compacto $K \subset \mathbb{R}^d$ se tiene que S_K es denso según ρ_K en $\mathcal{C}(\mathbb{R}^d)$ donde ρ_K está definida como sigue. Para cualquier $f, g \in \mathcal{C}(\mathbb{R}^d)$

$$\rho_K(f,g) = \sup_{x \in K} |f(x) - g(x)|.$$

Definición 4.7. Una serie de funciones $\{f_n\}$ **converge uniformemente a una función** f **sobre compactos** si para cada conjunto compacto $K \subset \mathbb{R}^d$ se cumple que

$$\rho_k(f_n, f) \longrightarrow 0 \text{ cuando } n \longrightarrow \infty.$$

Noción intuitiva de compacto
Un compacto es un conjunto que **se puede cambiar por un subconjunto finito cometiendo un error prefijado**.
Al trabajar con números reales, un espacio es compacto si es cerrado y acotado, lo que a nivel práctico significa que los **datos de entrada se encuentran dentro de un rango concreto**.

Noción intuitiva de uniformemente denso para compactos lo que indica es que *controlamos* **cuánto de cerca están dos funciones sea cual sea cualquier punto del compacto en que evaluemos** es decir, podríamos afirmar que para una red neuronal que tome valores por ejemplo en $[0,1]^r$, se puede saber que su error es menor que $\varepsilon \in \mathbb{R}^+$ independientemente de la entrada.

4.4. Primeros resultados

Teorema 4.2 (Teorema de convergencia real en compactos)**.** *Sea G cualquier función continua no constante definida de $\mathbb{R}$ en $\mathbb{R}$. Se tiene que $\sum\prod^d(G)$ es uniformemente denso para compactos en $\mathcal{C}(\mathbb{R}^d)$.*

Demostración. Bastará probar que el conjunto $\sum\prod^d(G)$ satisface las hipótesis del teorema de Stone-Weierstrass 3.2. Lo primero será comprobar que $\sum\prod^d(G)$ es un álgebra, para ello veamos que:

1. La función constante uno pertenece al conjunto. Como G no es constante existirá un valor de la imagen distinto de 0, supongamos que $G(a) = b \neq 0$ para $a, b \in \mathbb{R}$. Consideremos la función afín $A(x) = 0 \cdot x + a$, está claro que $\frac{1}{b}G(A(x))$ es la función constantemente uno.

2. El conjunto $\sum\prod^d(G)$ es cerrado para sumas y producto por escalares reales. En efecto, si f, g pertenecen a $\sum\prod^d(G)$, serán de la forma $f = \sum_{j=1}^{q} \beta_{fj} \prod_{k=1}^{l_{fj}} G(A_{fjk}(x))$ y $g = \sum_{j=1}^{p} \beta_{gj} \prod_{k=1}^{l_{gj}} G(A_{gjk}(x))$ por lo que

$$\begin{aligned}\gamma f + \sigma g =& \gamma \sum_{j=1}^{q} \beta_{fj} \prod_{k=1}^{l_{fj}} G(A_{fjk}(x)) + \sigma \sum_{j=1}^{p} \beta_{gj} \prod_{k=1}^{l_{gj}} G(A_{gjk}(x)) \\ =& \sum_{j=1}^{q} (\gamma\beta_{fj}) \prod_{k=1}^{l_{fj}} G(A_{fjk}(x)) + \sum_{j=1}^{p} (\sigma\beta_{gj}) \prod_{k=1}^{l_{gj}} G(A_{gjk}(x)).\end{aligned}$$

   Basta renumerar una de las sumatorias para ver $\gamma f + \sigma g$ como una combinación lineal de productos finitos y por tanto $\gamma f + \sigma g \in \sum\prod^d(G)$.

3. Cerrado para producto. Para $f, g \in \sum\prod^d(G)$, se tiene que fg pertenece a $\sum\prod^d(G)$,

Qué se está probando en el teorema 4.2 Podemos aproximar tanto como queramos cualquier función continua con elementos de $\sum\prod^d(G)$, es decir a lo que llamamos *anillo de aproximación*.

Clave de la demostración del teorema 4.2 Se comprueba primero que para operando elementos del *anillo de aproximación* con sumas, productos y re-escalados no se *salen del conjunto*, es decir que el resultado es otro elemento del *anillo de aproximación*. Con estas operaciones se irá construyendo y refinando una función que aproxime cualquier función continua con un método cuya idea es *con este elemento del anillo de aproximación tengo tal error porque me falla en tales puntos, si le sumo esto otro corrijo ese error y además el resultado sigue perteneciendo al conjunto.*

para ello basta ver que:

$$\begin{aligned} fg &= \left(\sum_{i\in I_f} \beta_{f_i} \prod_{k=1}^{l_i} G((x))\right)\left(\sum_{j\in I_g} \beta_{g_j} \prod_{k=1}^{l_j} G(A_{g_{jk}(x)})\right) \\ &= \sum_{i\in I_f}\left(\beta_{f_i} \prod_{k=1}^{l_i} G(A_{f_{ik}}(x))\right)\left(\sum_{j\in I_g} \beta_{g_j} \prod_{k=1}^{l_j} G(A_{g_{jk}(x)})\right) \\ &= \sum_{\substack{i\in I_f \\ j\in I_g}} (\beta_{f_i}\beta_{g_j}) \sum_{k=1}^{l_i+l_j} G\left(\tilde{A}_{ijk}(x)\right). \end{aligned}$$

Definimos $\tilde{A}_{ijk}(x) = A_{f_{ik}}$ si $k \in \{1,\dots,l_i\}$ y $\tilde{A}_{ijk}(x) = A_{g_{i(k-l_i)}}$ si $k \in \{l_i+1,\dots,l_i+l_j\}$. luego $fg \in \sum\prod^d(G)$.

Veamos que $\sum\prod^d(G)$ separa puntos para cada compacto $K \subset \mathbb{R}^r$. Por ser G no constante existirán $a, b \in \mathbb{R}$ distintos cumpliendo que $G(a) \neq G(b)$. Fijadas $x, y \in K$ tomamos entonces cualquiera de las funciones afines que cumplen que $A(x) = a$ y $A(y) = b$ [1], por lo que $G(A(x)) \neq G(A(y))$ y tenemos como buscábamos que $\sum\prod^d(G)$ separa los puntos de K.

Comprobemos finalmente que para todo punto de K existe una función de $\sum\prod^d(G)$ en el que la imagen no es nula.

Por ser G no constante volvemos a tomar un $a \in \mathbb{R}$ tal que $G(a) \neq 0$, consideramos ahora la aplicación lineal $A(x) = 0 \cdot x + a$ por lo que para todo $x \in K$, $G(A(x)) = G(a) \neq 0$.

Como hemos comprobado se verifican todas las hipótesis del teorema de Stone-Weierstrass, con lo que concluimos que $\sum\prod^d(G)|_K$ es denso en $C(K)$. □

4.4.1. Observaciones y reflexiones sobre el teorema de convergencia real en compactos

Con esto lo que acabamos de probar es que una estructura más general de *feedforward neural networks* con tan solo una capa oculta son capaces de aproximar cualquier función continua en un compacto. Cabe destacar que a la función G, que haría el papel de función de activación, solo se le ha pedido como hipótesis ser continua.

Notemos que la función de activación G es única en toda la estructura, sin embargo es habitual la combinación de éstas en una misma red neuronal ([NIGM18], [WLH+17], [SVI+15]).

Nueva hipótesis de optimización El corolario 4.1 abre la puerta a preguntarse si la combinación de diferentes funciones de activación podría mejorar los resultados de alguna manera. De hecho trataremos sobre esto en el capítulo 8.

Aportación original

Corolario 4.1 (Pueden combinarse distintas funciones de activación en una misma red neuronal)**.** *Una misma red neuronal puede estar constituida por una familia de funciones conti-*

[1] Sabemos que al menos una habrá, ya que podemos plantear la función afín como un sistema de ecuaciones lineales de $r+1$ incógnita y 2 soluciones

nuas no constantes Γ*, bastará con generalizar* $\sum\prod^d(G)$ *a* $\sum\prod^d(\Gamma)$ *donde*

$$\sum\prod^{d}(\Gamma) = \{f : \mathbb{R}^d \longrightarrow \mathbb{R} / f(x) = \sum_{j=1}^{q} \beta_j \prod_{k=1}^{l_j} G(A_{jk}(x)),$$
$$x \in \mathbb{R}^d, \beta_j \in \mathbb{R}, A_{jk} \in \mathcal{A}(\mathbb{R}^d), l_j, q \in \mathbb{N}, G \in \Gamma)\}$$

Demostración. La demostración es idéntica a la dada en el Teorema de convergencia real en compactos 4.2. □

Cómo contribuiría este corolario a la optimización de redes neuronales

Notemos que este resultado no da pista alguna de las ventajas de una función frente a otra, ni cómo afecta a la *velocidad de convergencia*. Es más, a priori se estaría aumentando el espacio de búsqueda, lo que significaría que *dificultaría el encontrar la solución*, es decir un aumento en coste y aumento del error de aproximación.

Sin embargo, como ya indicábamos en 4.3 utilizar una función de activación frente a otra varía el número de neuronas necesarias para conseguir cierta precisión, lo cual, bien usado significaría reducir el espacio de búsqueda.

En el capítulo 8, una vez que se hayan presentado todas las herramientas necesarias se desarrollará con más profundidad y claridad esta idea.

Definición 4.8 (Equivalencia entre funciones)**.** Sea μ una medida de probabilidad en $(\mathbb{R}^d, B^d)$. Dos funciones f y g pertenecientes a $\mathcal{M}(\mathbb{R}^d)$, diremos que son $\mu-$equivalentes si $\mu\{x \in \mathbb{R}^d : f(x) = g(x)\} = 1$.

Lo que se está diciendo es que serán iguales casi por doquier.

Idea intuitiva equivalencia de funciones:

En la definición 4.8 Se considera que dos funciones son equivalentes si son iguales en casi todos sus puntos. El objetivo de todas estas definiciones es **saber cuándo una red neuronal es equivalente a una función medible o cuánto la aproxima**.

Definición 4.9 (Introducción de una distancia basada en una probabilidad)**.** Dada una medida de probabilidad μ en $(\mathbb{R}^d, B^d)$, se define la métrica ρ_μ definida como

$$\rho_\mu : \mathcal{M}(\mathbb{R}^d) \times \mathcal{M}(\mathbb{R}^d) \longrightarrow \mathbb{R}^+$$
$$\rho_\mu(f, g) = \inf\{\varepsilon > 0 : \mu\{x : |f(x) - g(x)| > \varepsilon\} < \varepsilon\}.$$

Con esta definición lo que se está buscando es una forma de decir cuánto distan las funciones f, g entre ellas.

Lema 4.1 (Caracterización de la convergencia de una sucesión)**.** *Son equivalentes las siguientes afirmaciones:*

1. $\rho_\mu(f_n, f) \longrightarrow 0$.
2. *Para cualquier* $\varepsilon > 0$ *se tiene que* $\mu\{x : |f_n(x) - f(x)| > \varepsilon\} \longrightarrow 0$.
3. $\int \min\{|f_n(x) - f(x)|, 1\} d\mu(x) \longrightarrow 0$.

Idea intuitiva distancia probabilidad:

Este concepto de analizar la tendencia de la mayoría de los punto se ve reflejado en la definición de distancia basada en una probabilidad 4.9, siendo entonces la **distancia de dos funciones la menor de las distancias que siguen la mayoría de sus puntos**.
El lema 4.1 nos permitirá trabajar con mayor comodidad matemática este concepto.

Demostración. Comenzaremos probando (1) ⇒ (2).

Si $\rho_\mu(f_n, f) \longrightarrow 0$ Fijamos $\varepsilon_0 > 0$, tenemos por definición que para cualquier $0 < \delta < \varepsilon_0$ existirá $n_0 \in \mathbb{N}$ tal que $\rho_\mu(f_n, f) < \delta$ para cada n un natural mayor que n_0. Es decir,

$$\inf\{\varepsilon > 0 : \mu\{x : |f_n(x) - f(x)| > \varepsilon\} < \varepsilon\} < \delta \quad \forall n \geq n_0$$

entonces

$$\mu\{x : |f_n(x) - f(x)| > \varepsilon_0\} \leq \mu\{x : |f_n(x) - f(x)| > \delta\} < \delta \quad \forall n \geq n_0$$

lo que significa que

$$\mu\{x : |f_n(x) - f(x)| > \varepsilon_0\} \longrightarrow 0$$

probando con ello la implicación buscada.

Veamos ahora que (2) $\Rightarrow$ (1). Fijamos $\varepsilon_0 > 0$ y bajo la hipótesis segunda se tiene que

$$\mu\{x : |f_n(x) - f(x)| > \varepsilon_0\} \longrightarrow 0,$$

es decir, que para cualquier real δ cumpliendo que $0 < \delta < \varepsilon_0$ existe un natural n_0 a partir del cual todo natural n mayor o igual satisface que

$$\mu\{x : |f_n(x) - f(x)| > \varepsilon_0\} \leq \mu\{x : |f_n(x) - f(x)| > \delta\} < \delta \quad \forall n \geq n_0$$

lo que significa que

$$\inf\{\varepsilon > 0 : \mu\{x : |f_n(x) - f(x)| > \varepsilon\} < \varepsilon\} < \delta \quad \forall n \geq n_0$$

que por definición de la distancia equivale a que

$$\rho_\mu(f_n, f) < \delta \quad \forall n \geq n_0$$

probando con ello

$$\rho_\mu(f_n, f) \longrightarrow 0.$$

Probaremos ahora que (2) $\Longrightarrow$ (3). Por (2) se tiene que sea cual sea ε cumpliendo que $0 < \varepsilon \leq 2$ existirá un natural n_0 a partir del cual, cualquier otro natural n satisface que

$$\mu\left\{x : |f_n(x) - f(x)| > \frac{\varepsilon}{2}\right\} < \frac{\varepsilon}{2}.$$

Gracias a esta desigualdad, para cualquier $n > n_0$ podemos acotar la siguiente integral:

$$\int \min\{|f_n(x) - f(x)|, 1\} d\mu(x) \leq \frac{\varepsilon}{2}(1 - \frac{\varepsilon}{2}) + 1\frac{\varepsilon}{2} = \varepsilon - \frac{\varepsilon^2}{4} < \varepsilon,$$

probando con ello la implicación (2) $\Longrightarrow$ (3).

Finalmente comprobaremos la implicación (3) $\Longrightarrow$ (1). Para cada $n \in \mathbb{N}$ llamamos $g_n = \min\{|f_n - f|, 1|\}$. Por (2), dado $0 < \varepsilon < 1$, existe un $n_0 \in \mathbb{N}$ de modo que si $n \geq n_0$ se cumple que

$$\int g_n d\mu < \varepsilon^2. \tag{4.1}$$

Como $\varepsilon < 1$ tenemos que

$$\{x; g_n(x) > \varepsilon\} = \{x; |f_n - f| > \varepsilon\},$$

luego

$$\mu\{x; |f_n - f(x)| > \varepsilon\} = \mu\{x; g_n(x) > \varepsilon\} \leq \frac{1}{\varepsilon} \int_{g_n(x) > \varepsilon} g_n d\mu < \varepsilon \quad \forall n \geq n_0,$$

donde se ha usado la desigualdad de Chebyshev para g_n y la desigualdad (4.1).

Probando con esto lo buscado que para cualquier $\varepsilon > 0$ se tiene que

$$\mu\{x : |f_n(x) - f(x)| > \varepsilon\} \longrightarrow 0.$$

□

Lema 4.2. *Si $\{f_n\}$ es una sucesión de funciones en $\mathcal{M}(\mathbb{R}^d)$ que converge uniformemente en un compacto a f entonces $\rho_\mu(f_n, f) \longrightarrow 0$.*

Demostración. Para cada $n \in \mathbb{N}$ llamamos $g_n = \min\{|f_n - f|, 1|\}$. Tengamos presente que por el lema 4.1 deberemos probar que para cualquier $\varepsilon > 0$, existe un n_0 natural, tal que para cualquier otro natural n mayor o igual que n_0 se tiene que

$$\int \min\{|f_n(x) - f(x)|, 1\} d\mu(x) < \frac{\varepsilon}{2}.$$

Sea $\mu(\mathbb{R}^d) = M \in \mathbb{R}^+$ y sin pérdida de generalidad puede suponerse $M = 1$ [2]. Ya que $\mathbb{R}^r$ es un espacio métrico localmente compacto (pag 228 teorema 52.G [Hal74]), se tiene que existirá un subconjunto K compacto de $\mathbb{R}^r$ con medida $\mu(K) > 1 - \frac{\varepsilon}{2}$. Para el cual, por su compacidad, existirá un n_0 natural $\sup_{x \in K} |f_n(x) - f(x)| < \frac{\varepsilon}{2}$ para cada natural n con $n \geq n_0$.

De modo que para cualquier $x \in K$, n con $n \geq n_0$ se cumple que

$$|f_n(x) - f(x)| = \min\{|f_n(x) - f(x)|, 1\} = g_n.$$

Por lo que

$$\int_K g_n d\mu \leq \mu(K) \sup_{x \in K} |f_n(x) - f(x)| \leq \frac{\varepsilon}{2}. \tag{4.2}$$

Acotando el primer sumando por la medida del complemento de la región integrada y en virtud de (4.2)

$$\int_{\mathbb{R}^d \setminus K} \min\{|f_n(x) - f(x)|, 1\} d\mu(x) + \int_K \min\{|f_n(x) - f(x)|, 1\} d\mu(x)$$
$$\leq \mu(\mathbb{R}^d \setminus K) + \frac{\varepsilon}{2} \leq \frac{\varepsilon}{2} + \frac{\varepsilon}{2} = \varepsilon$$

para cualquier $n \geq n_0$. □

Lema 4.3. *Para cualquier medida finita μ se tiene que $\mathcal{C}(\mathbb{R}^d)$ es denso en $\mathcal{M}(\mathbb{R}^d)$ para la distancia ρ_μ.*

Demostración. Dada cualquier $f \in \mathcal{M}(\mathbb{R}^d)$ y un $\varepsilon > 0$ arbitrario, tenemos que encontrar una función g que cumpla que $\rho_\mu(f, g) < \varepsilon$.

Tomando un $M > 1$ lo suficientemente grande, tenemos que

$$\int \min\{|f(x)\ 1_{|f(x)|<M} - f(x)|, 1\} d\mu(x) < \frac{\varepsilon}{2}.$$

Sabemos además que podemos aproximar $f 1_{|f|<M}$ por g, una función continua que es límite de una sucesión de funciones simples (pag 241-242, teoremas 55C y 55D [Hal74]), la cual satisface

$$\int \min\{|f(x) 1_{|f(x)|<M} - g(x)|, 1\} d\mu(x) < \frac{\varepsilon}{2}. \tag{4.3}$$

[2] De otra forma bastaría con definir en los pasos siguientes $\mu(K) > M - \frac{\varepsilon}{2}$ y acotar con $\frac{\varepsilon}{2M}$ en vez de $\frac{\varepsilon}{2}$.

Idea intuitiva lema 4.3:

Las funciones medibles pueden tomar formas muy variopintas, estando incluso no acotadas, un ejemplo de ello es la función de Dirichlet definida como $D(x) = 1$ si x es irracional y $D(x) = 0$ si x es racional. Esta función es medible pero no es continua ya que presenta infinitas discontinuidades.

Sin embargo, las funciones continuas son más simples, fáciles de entender y manejar. Gracias al lema 4.3 se prueba el llamativo resultado de que **podemos aproximar en casi todos sus puntos cualquier función medible a partir de una continua.**

Por ejemplo la función constantemente uno aproxima a la función D previamente definida.

Tomamos M lo suficientemente grande, de tal forma que

$$\mu(\{x : |f(x)| \geq M\}) < \frac{\varepsilon}{2} \tag{4.4}$$

y denotamos por Λ al conjunto $\{x : |f(x)| < M\}$.

Concluyendo por 4.3 y 4.4

$$\begin{aligned}\int \min\{|f-g|,1\}d\mu = \int_{\Lambda} \min\{|f1_{|f(x)|<M} - g|,1\}d\mu + \int_{\mathbb{R}^d\setminus\Lambda} \min\{|f-g|,1\}d\mu \\ < \frac{\varepsilon}{2} + \mu(\{x : |f(x)| \geq M\}) < \frac{\varepsilon}{2} + \frac{\varepsilon}{2} < \varepsilon.\end{aligned}$$

□

Teorema 4.3. *Para cualquier función continua no constante G, $d \in \mathbb{N}$ y medida de probabilidad μ en $(\mathbb{R}^d, B^d)$, se tiene que $\sum\prod^d(G)$ es ρ_μ-denso en $\mathcal{M}(\mathbb{R}^d)$.*

Idea intuitiva teorema 4.3

Se prueba en el teorema 4.3 que con una **versión más general de una red neuronal** (perteneciente a $\sum\prod^d(G)$) **se es capaz de aproximar cualquier función medible**.
La idea de la demostración es sencilla, sabemos aproximar una función medible con una continua y a su vez una continua con una del *anillo de aproximación de redes neuronales*, luego sabemos aproximar una función medible con una *anillo de aproximación de redes neuronales*.

Demostración. Debemos probar que para cualquier función $f \in \mathcal{M}(\mathbb{R}^d)$ existe una sucesión de funciones $\{h_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ contenida en $\sum\prod^d(G)$ y cumpliendo que $\rho_\mu(h_n, f) \longrightarrow 0$.

Consideramos cualquier $f \in \mathcal{M}(\mathbb{R}^d)$, por el lema 4.3 sabemos que $\mathcal{C}(\mathbb{R}^d)$ es ρ_μ-denso en $\mathcal{M}(\mathbb{R}^d)$; es decir, existirá un sucesión $\{f_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ de funciones de $\mathcal{C}(\mathbb{R}^d)$ convergente a f.

Por otra parte sabemos por el teorema 4.2, que $\sum\prod^d(G)$ es uniformemente denso por compactos en $\mathcal{C}(\mathbb{R}^d)$, luego en cualquier compacto $K \subset \mathbb{R}^d$ existirá una sucesión (con n fijo) $\{g(n)_m\}_{m\in\mathbb{N}}$ convergente a f_n, el término n-ésimo de la sucesión convergente a g.

Así pues, denotando como h_n al término $g(n)_n$, obtenemos una sucesión de funciones en $\mathcal{M}(\mathbb{R}^d)$ que converge uniformemente en compactos a f y por el lema 4.2 tenemos que $\rho_\mu(h_n, f) \longrightarrow 0$ como queríamos probar. □

Lema 4.4. *Sea F una función de activación continua y ψ una **función de activación** arbitraria. Para cualquier $\varepsilon > 0$ existe un elemento H_ε de $\mathcal{H}_\psi(\mathbb{R}, \mathbb{R})$ cumpliendo que*

$$\sup_{\lambda\in\mathbb{R}} |F(\lambda) - H_\varepsilon(\lambda)| < \varepsilon.$$

Idea intuitiva lema 4.4

Hasta ahora hemos probado que $\sum\prod^d(G)$ es capaz de aproximar funciones medibles pero siendo G una función de activación continua, vamos a relajar tal hipótesis a que G sea cualquier función de activación, sin exigirle continuidad.

Demostración. Procedamos a realizar la siguiente prueba constructiva. Tomamos fijo pero arbitrario un $\varepsilon > 0$, que sin pérdida de generalidad supondremos menor que uno. Para que H_ε pertenezca a $\mathcal{H}_\psi(\mathbb{R}, \mathbb{R})$ deberá ser de la forma $\sum_{j=1}^{q-1} b_j\psi(A_j(\lambda))$ debemos encontrar por ende el número de sumatorias, $q-1$; esa misma cantidad de constantes reales b_j y funciones afines A_j. Para ello tomamos como q cualquier número natural que cumpla que

$$\frac{1}{q} < \frac{\varepsilon}{4}. \tag{4.5}$$

Fijaremos para cada $j \in \{1, 2, ..., q-1\}$ los coeficientes b_j como $\frac{1}{q}$.

Seleccionamos cualquier constante real $M > 0$ de tal forma que se cumpla que

$$\psi(-M) < \frac{\varepsilon}{2q} \quad \text{y} \quad \psi(M) > 1 - \frac{\varepsilon}{2q}. \tag{4.6}$$

Sabemos que esto es posible ya que por ser ψ una función de activación satisface que $\lim_{\lambda\longrightarrow\infty} \psi(\lambda) = 1$ y que $\lim_{\lambda\longrightarrow-\infty} \psi(\lambda) = 0$, por tanto existirá una constante M_1 positiva tal

que a partir de ella cualquier otra constante n_1 mayor o igual que cumpla que $\psi(n_1) > 1 - \frac{\varepsilon}{2q}$. También existirá una constante M_2 positiva tal que a partir de ella cualquier otra constante n_2 mayor o igual tal que que $\psi(-n_2) < \frac{\varepsilon}{2q}$. Podemos tomar como M al máximo de M_1 y M_2.

Seleccionaremos ahora los siguientes puntos del dominio

$$r_j = \sup\left\{\lambda : F(\lambda) = \frac{j}{q}\right\}, \text{ con } j \in \{1, ..., q-1\} \tag{4.7}$$
$$r_q = \sup\left\{\lambda : F(\lambda) = 1 - \frac{1}{2q}\right\}.$$

Que por ser F una función de activación continua sabemos que existen ya que $\lim_{\lambda \longrightarrow -\infty} F(\lambda) = 0$ y $\lim_{\lambda \longrightarrow \infty} F(\lambda) = 1$.

Procedemos ahora a definir las distintas aplicaciones afines. Para cualesquiera reales s, r que cumplan $r < s$ sea $A_{rs} \in \mathcal{A}(\mathbb{R})$ la única aplicación afín que satisface que

$$A_{rs}(r) = -M \text{ y } A_{rs}(s) = M.$$

Acabamos pues de determinar todos los elementos que conforman a H_ε, de tal forma que se tiene que

$$H_\varepsilon(\lambda) = \frac{1}{q}\sum_{j=1}^{q-1} \psi(A_{r_j, r_{j+1}}(\lambda))$$

y así definida cumple que:

Idea intuitiva demostración del lema 4.4

Aprovechamos que sabemos que la función de activación continua F es no decreciente así que podemos dividir su imagen en trozos iguales y aproximar la imagen con una función en escalera que valga en cada tramo el valor mínimo. A su vez, una función en escalera se puede construir con una red neuronal de una capa oculta que tenga como función de activación arbitraria ψ, *cada vez que se activa un nodo más se sube un escalón más de de la escalera.*

- Si $\lambda \in (-\infty, r_1]$: Se cumple que $\lambda \leq r_1 < r_2 < ... < r_q$ luego para todos $j \in \{1, ..., q-1\}$ las funciones afines satisfacen que $A_{r_j, r_{j+1}}(\lambda) < -M$ y por cómo se fijó M en la condición 4.6 resulta que $\psi(A_{r_j, r_{j+1}}(\lambda)) < \frac{\varepsilon}{2q}$. Por tanto para $\lambda \in (-\infty, r_1]$ se tiene

  $$H_\varepsilon(\lambda) = \frac{1}{q}\sum_{j=1}^{q-1} \psi(A_{r_j, r_{j+1}}(\lambda)) < \frac{1}{q}\sum_{j=1}^{q-1} \frac{\varepsilon}{2q} < \frac{1}{q}(q-1)\frac{\varepsilon}{2q} < \frac{\varepsilon}{2q} < \frac{\varepsilon}{2}$$

  y como además $0 \leq F(\lambda) \leq \frac{1}{q} < \frac{\varepsilon}{2}$ por cómo se seleccionaron los puntos r_j en 4.7 se tiene que

  $$|F(\lambda) - H_\varepsilon(\lambda)| < \frac{\varepsilon}{2} + \frac{\varepsilon}{2} < \varepsilon.$$

- Si $\lambda \in (r_q, +\infty)$: Se cumple que $r_1 < r_2 < ... < r_q < \lambda$ luego para todo $j \in \{1, ..., q-1\}$ las funciones afines satisfacen que $A_{r_j, r_{j+1}}(\lambda) > M$ y por cómo se fijó M en 4.6 resulta que $\psi(A_{r_j, r_{j+1}}(\lambda)) > 1 - \frac{\varepsilon}{2q}$ concluyendo que para $\lambda \in (r_q, +\infty)$:

  $$1 \geq H_\varepsilon(\lambda) = \frac{1}{q}\sum_{j=1}^{q-1} \psi(A_{r_j, r_{j+1}}(\lambda)) > \frac{1}{q}\sum_{j=1}^{q-1} \left(1 - \frac{\varepsilon}{2q}\right) > \frac{(q-1)}{q}\left(1 - \frac{\varepsilon}{2q}\right)$$

  y por ende, como además $\frac{(q-1)}{q}\left(1 - \frac{\varepsilon}{2q}\right) < \frac{q-1}{q} \leq F(\lambda) \leq 1$ por cómo se seleccionaron los puntos r_j en 4.7 se tiene que

  $$|F(\lambda) - H_\varepsilon(\lambda)| \leq 1 - \frac{(q-1)}{q}\left(1 - \frac{\varepsilon}{2q}\right) = \frac{1}{q} + \frac{\varepsilon}{2q} < \varepsilon.$$

  Donde para acotar $\frac{1}{q}$ hemos usado la desigualdad 4.5.

- Si $\lambda \in (r_j, r_{j+1}]$ para $j \in \{1, \dots, q-1\}$:

  Tenemos por una parte que $\frac{j}{q} < F(\lambda) \leq \frac{j+1}{q}$ y podemos descomponer H_ε en las siguientes sumatorias:

$$qH_\varepsilon(\lambda) = \sum_{i=1}^{j-1} \psi(A_{r_i, r_{i+1}}(\lambda)) + \psi(A_{r_j, r_{j+1}}(\lambda)) + \sum_{i=j+1}^{q-1} \psi(A_{r_i, r_{i+1}}(\lambda))$$

  Nótese que así definida, si $j = q-2$ o $j = q-1$ el último sumando no aparece.

  Los términos de la primera sumatoria serán mayores que $\left(1 - \frac{\varepsilon}{2q}\right)$ y menores o iguales que la unidad, el segundo sumando satisface que $0 \leq q\psi(A_{r_j, r_{j+1}}(\lambda)) \leq 1$ y para la última sumatoria, todos sus términos serán menores que $\frac{\varepsilon}{2q}$ y mayores o iguales que cero. De donde resulta que :

$$\frac{j-1}{q}\left(1 - \frac{\varepsilon}{2q}\right) < H_\varepsilon(\lambda) < \frac{j-1}{q} + \frac{1}{q} + \frac{q-j}{q}\frac{\varepsilon}{2q},$$

  concluyendo que

$$F(\lambda), H_\varepsilon(\lambda) \in \left[\frac{j-1}{q}\left(1 - \frac{\varepsilon}{2q}\right), \frac{j+1}{q}\right]$$

  y por tanto:

$$|F(\lambda) - H_\varepsilon(\lambda)| \leq \frac{j+1}{q} - \frac{j-1}{q}\left(1 - \frac{\varepsilon}{2q}\right) = \frac{2}{q} + \frac{j-1}{q}\frac{\varepsilon}{2q} < \frac{\varepsilon}{2} + \frac{\varepsilon}{2} < \varepsilon.$$

La acotación $|F(\lambda) - H_\varepsilon(\lambda)| < \varepsilon$ se cumple para todo

$$\lambda \in (-\infty, r_1] \bigcup (r_q, +\infty) \bigcup_{j \in \{1, \dots, q-1\}} (r_j, r_{j+1}] = \mathbb{R},$$

probando con ello lo buscado. □

Teorema 4.4. *Para cualquier función de activación ψ, d natural positivo y medida de probabilidad μ en $(\mathbb{R}^d, B^d)$, se tiene que $\sum\prod^d(\psi)$ es uniformemente denso en compactos en $\mathcal{C}(\mathbb{R}^d)$ y denso en $\mathcal{M}(\mathbb{R}^d)$ para la distancia ρ_μ.*

Idea intuitiva teorema 4.4

Con una versión generalizada de una red neuronal que utilice cualquier función de activación (es decir que pertenezca a $\sum\prod^d(\psi)$) **podemos aproximar funciones continuas y funciones medibles**.
Esto ha supuesto relajar la hipótesis de G con respecto al último teorema 4.3 de convergencia a funciones.

Demostración. En virtud del lema 4.2 y del teorema 4.3 basta con probar que $\sum\prod^d(\psi)$ es uniformemente denso en compactos de $\sum\prod^d(F)$, donde F es una función de activación continua [3].

Para ello basta ver que cualquier función de la forma $\prod_{k=1}^l F(A_k(\cdot))$ puede ser uniformemente aproximada por una una sucesión de funciones de $\sum\prod^d(\psi)$.

Fijamos $\varepsilon > 0$. Por continuidad, existirá un $\delta > 0$ tal que, para cualesquiera números reales $0 \leq a_k, b_k \leq 1$, con $k \in \{1, ..., l\}$ cumpliendo que $|a_k - b_k| < \delta$ se tiene

$$\left|\prod_{k=1}^l a_k - \prod_{k=1}^l b_k\right| < \varepsilon. \tag{4.8}$$

[3] el razonamiento por el que con esta hipótesis es suficiente es idéntico al realizado para la demostración del teorema 4.3.

Por el lema 4.4 existe una función $H_\delta(\cdot) = \sum_{t=1}^{T} \beta_t \psi(A_t(\cdot))$ cumpliendo que

$$\sup_{\lambda \in \mathbb{R}} |F(\lambda) - H_\delta(\lambda)| < \delta.$$

Usando 4.8 para $a_k = F(A_k(x))$ y $b_k = H_\delta(A_k(x))$ obtenemos

$$\sup_{x \in \mathbb{R}^d} \left| \prod_{k=1}^{l} F(A_k(x)) - \prod_{k=1}^{l} H_\delta(A_k(x)) \right| < \varepsilon. \tag{4.9}$$

Puesto que H_δ es de la forma $\sum_{t=1}^{T} \beta_t \psi(A_t(\cdot))$ y porque $A_t(A_k(\cdot)) \in \mathcal{A}(\mathbb{R}^d)$ se tiene por la desigualdad 4.9 que $\prod_{k=1}^{l} H_\delta(A_k(\cdot)) \in \sum \prod^d(\psi)$.

Por lo tanto $\prod_{k=1}^{l} F(A_k(\cdot))$ puede ser aproximado por elementos de $\sum \prod^d(\psi)$ y acabamos de probar con ello lo buscado. □

Lema 4.5. *Para cada función de activación ψ, cada $\varepsilon > 0$ y cada $M > 0$ existe una función $\cos_{M,\varepsilon} \in \mathcal{H}_F(\mathbb{R}, \mathbb{R})$ tal que*

$$\sup_{\lambda \in [-M,M]} |\cos_{M,\varepsilon}(\lambda) - \cos(\lambda)| < \varepsilon.$$

Demostración. Sea F la función de activación *cosine squasher* de Gallant and White (1988) definida en 4.2 Comenzamos probando que para un intervalo acotado $[-M, M]$, existe $H_{[-M,M]} \in \mathcal{H}_F(\mathbb{R}, \mathbb{R})$ tal que para todo elemento $\lambda \in [-M, M]$ se cumple que

$$H_{[-M,M]}(\lambda) = \cos(\lambda).$$

Calculamos $H_{[-M,M]} \in \mathcal{H}_F(\mathbb{R}, \mathbb{R})$ de forma constructiva. Recordemos que

$$F(\lambda) = \left(1 + \cos\left(\lambda - \frac{\pi}{2}\right)\frac{1}{2}\right) 1_{\{\frac{-\pi}{2} \le \lambda \le \frac{\pi}{2}\}} + 1_{\{\frac{\pi}{2} < \lambda\}}.$$

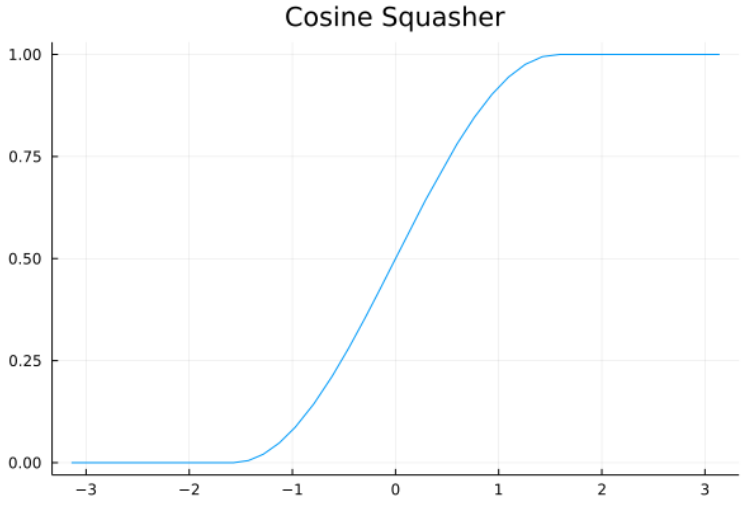


Figura 4.3: Función *cosine squasher*

Se tiene pues que para cualquier $\lambda \in \left[\frac{-\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right]$ se cumple

$$2F(\lambda) - 1 = \cos\left(\lambda - \frac{\pi}{2}\right)$$

y, haciendo $\mu = \lambda - \frac{\pi}{2}$, resulta que para cualquier $\mu \in [-\pi, 0]$ se tiene

$$\cos(\mu) = 2F\left(\mu + \frac{\pi}{2}\right) - 1$$

Además, puesto que $F(\mu + 2\pi M) = 1$ para todo $\mu \in [-M, M] \supset [-\pi, 0]$, para cada $\mu \in [-\pi, 0]$ podemos escribir

$$\cos(\mu) = 2F\left(\mu + \frac{\pi}{2}\right) - F(\mu + 2\pi M).$$

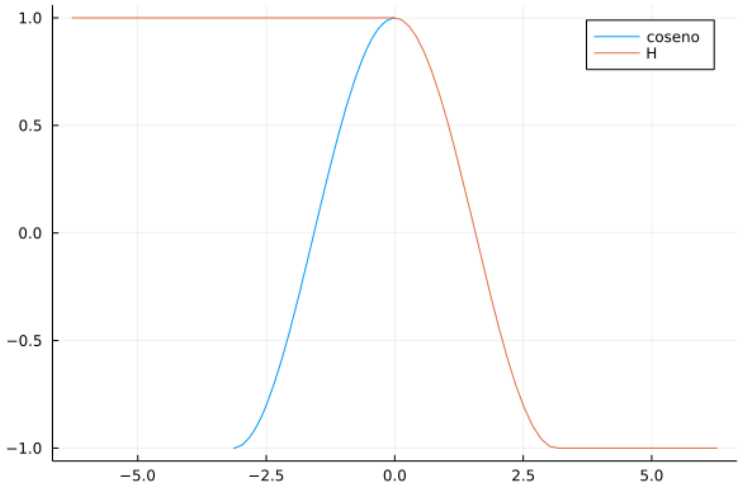


Figura 4.4: Comparativa $H_{[-\pi,0]}$ con la función coseno real.

Podemos definir entonces

$$H_{[-\pi,0]} = 2F\left(\mu + \frac{\pi}{2}\right) - F(\mu + 2\pi M)$$

que cumple que $H_{[-\pi,0]} = \cos$ en $[-\pi, 0]$

Por la simetría de la función coseno resulta que para todo $\mu \in [0, \pi]$ se tiene

$$\cos(\mu) = \cos(-\mu) = H_{[-\pi,0]}(-\mu).$$

Así pues podemos definir

$$\begin{aligned} H_{[-\pi,\pi]}(\mu) &= H_{[-\pi,0]}(\mu) + H_{[-\pi,0]}(-\mu) - 1 \\ &= H_{[-\pi,0]}(\mu) + H_{[-\pi,0]}(-\mu) - F(\mu + 2\pi M) \end{aligned}$$

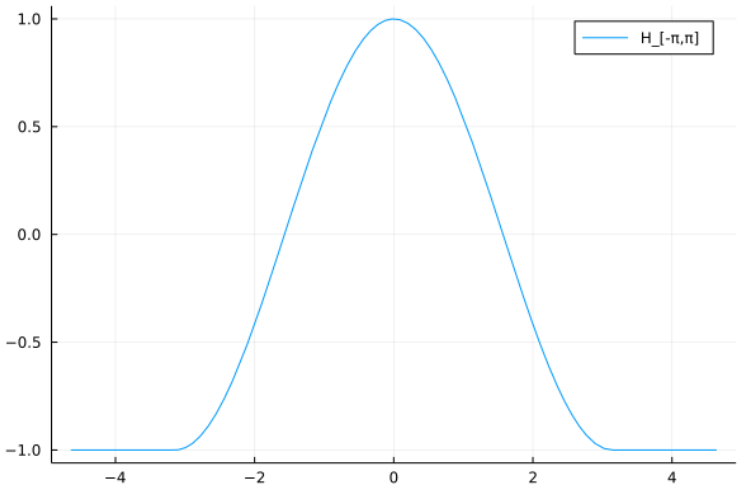


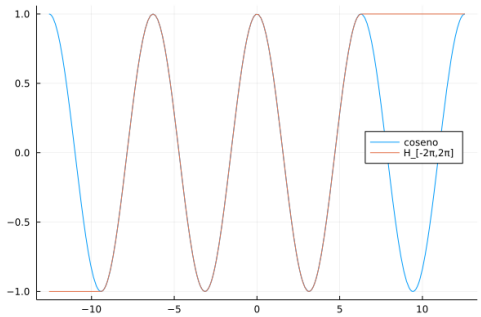
Figura 4.5: Función $H_{[-\pi,\pi]}$.

que cumple que $H_{[-\pi,\pi]} = \cos$ en $[-\pi, \pi]$. Fijamos un natural N cumpliendo que $2\pi N \geq M$ y definimos

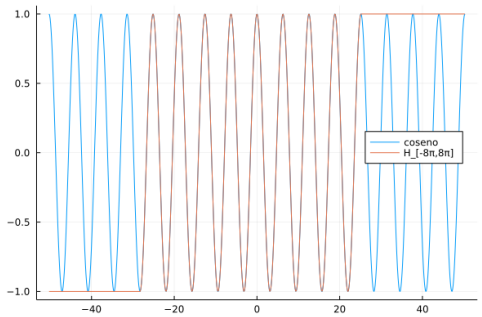
$$H_{[-2\pi N,2\pi N]}(\lambda) = \sum_{j=1}^{N}(H_{[-\pi,\pi]}(\lambda + 2\pi j) + 1) + H_{[-\pi,\pi]}(\lambda) - \sum_{j=1}^{N}(H_{[-\pi,\pi]}(-\lambda + 2\pi j - \pi) + 1),$$

$$H_{[-2\pi N,2\pi N]}(\lambda) = H_{[-\pi,\pi]}(\lambda) + \sum_{j=1}^{N}(H_{[-\pi,\pi]}(\lambda + 2\pi j) - H_{[-\pi,\pi]}(-\lambda + 2\pi j - \pi)).$$

Usando la periodicidad del coseno es fácil ver que $H_{[-2\pi N,2\pi N]} = \cos$ en $[-2\pi N, 2\pi N]$.



(a) Función $H_{[-2\pi,2\pi]}$ con $N = 1$.



(b) Función $H_{[-8\pi,8\pi]}$ con $N = 4$.

Figura 4.6: Ejemplos de funciones $H_{[-M,M]}$

Está claro que por ser $2\pi N \geq M$ podemos definir finalmente

$$H_{[-M,M]} = H_{[-2\pi N,2\pi N]}$$

lo que concluye finalmente la construcción de $H_{[-M,M]}$. La construcción anterior nos dice que $H_{[-M,M]} \in \mathcal{H}_F(\mathbb{R},\mathbb{R})$. De hecho existen $t \in \mathbb{N}$ y traslaciones A_j para $j \in \{1,\dots,t\}$ de modo que

$$H_{[-M,M]} = \sum_{j=1}^{t} \alpha_j A_j(\lambda) \quad \alpha_j \in \{-1,1\}.$$

Como F es una función de activación continua, el lema 4.4 nos da la existencia de $W_{\frac{\varepsilon}{t}} \in \mathcal{H}_\psi(\mathbb{R},\mathbb{R})$ cumpliendo que $|F - W_{\frac{\varepsilon}{t}}| < \frac{\varepsilon}{t}$ en todo $\mathbb{R}$. Por tanto

$$|F \circ A_i - W_{\frac{\varepsilon}{t}} \circ A_i| < \frac{\varepsilon}{t} \quad \forall j \in \{1,\dots,t\}.$$

Podemos ya definir la función que buscamos:

$$\cos_{M,\varepsilon}(\lambda) = \sum_{j=1}^{t} \alpha_j W_{\frac{\varepsilon}{t}}(A_j(\lambda)).$$

De esta manera, para cualquier $\lambda \in [-M,M]$

$$\begin{aligned} |\cos_{M,\varepsilon}(\lambda) - \cos(\lambda)| &\leq |\cos(\lambda) - H_{[-M,M]}(\lambda)| + |\cos_{M,\varepsilon}(\lambda) - H_{[-M,M]}(\lambda)| \\ &\leq 0 + |\cos_{M,\varepsilon}(\lambda) - H_{[-M,M]}(\lambda)| \\ &\leq \sum_{j=1}^{t} |W_{\frac{\varepsilon}{t}}(A_j(\lambda)) - F(A_j(\lambda))| \\ &< \sum_{j=1}^{t} \frac{\varepsilon}{t} = \varepsilon. \end{aligned}$$

Dando con esto por concluida la demostración. □

Lema 4.6. *Sea $g(\cdot) = \sum_{j=1}^{q} \beta_j \cos(A_j(\cdot))$ con $A_j \in \mathcal{A}(\mathbb{R}^d)$ y $\beta_j \in \mathbb{R}$. Para cualquier función de activación ψ, cualquier compacto $K \subset \mathbb{R}^d$ y cualquier $\varepsilon > 0$ existe $f \in \mathcal{H}_\psi(\mathbb{R}^d,\mathbb{R})$ para el cual se cumple que*

$$\sup_{x \in K} |g(x) - f(x)| < \varepsilon.$$

Demostración. Puesto que K es un compacto, el número de sumatorias q es finito y A_j son funciones continuas , existe M un número real positivo cumpliendo que

$$A_j(K) \subseteq [-M,M] \quad \text{para todo } j \in \{1,...,q\}.$$

Definimos

$$B = \max\{|\beta_j| : j \in \{1,...,q\}\},$$

en virtud del lema 4.5 podemos encontrar $\cos_{M,\frac{\varepsilon}{qB}} \in \sum(\psi)$ cumpliendo que

$$\sup_{\lambda \in [-M,M]} |\cos_{M,\frac{\varepsilon}{qB}}(\lambda) - \cos(\lambda)| < \frac{\varepsilon}{qB}$$

por lo que para cualquier $j \in \{1,...,q\}$ se tiene que

$$\sup_{x \in K} |\cos_{M,\frac{\varepsilon}{qB}}(A_j(x)) - \cos(A_j(x))| \leq \sup_{\lambda \in [-M,M]} |\cos_{M,\frac{\varepsilon}{qB}}(\lambda) - \cos(\lambda)| < \frac{\varepsilon}{qB}.$$

Definamos ahora f como

$$f(x) = \sum_{j=1}^{q} \beta_j \cos_{M,\frac{\varepsilon}{qB}}(A_j(x)),$$

que cumple $f \in \mathcal{H}_\psi(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ puesto que $\cos_{M,\frac{\varepsilon}{qB}} \in \mathcal{H}_\psi(\mathbb{R}, \mathbb{R})$, y satisface además que

$$\begin{aligned}
\sup_{x\in K} |f(x) - g(x)| &\leq \sup_{\lambda\in[-M,M]} |\sum_{j=1}^{q} \beta_j \cos_{M,\frac{\varepsilon}{qB}}(\lambda) - \sum_{j=1}^{q} \beta_j \cos(\lambda)| \\
&\leq \sup_{\lambda\in[-M,M]} \sum_{j=1}^{q} |\beta_j||\cos_{M,\frac{\varepsilon}{qB}}(\lambda) - \cos(\lambda)| \\
&< \sup_{\lambda\in[-M,M]} \sum_{j=1}^{q} B\frac{\varepsilon}{qB} = \varepsilon.
\end{aligned}$$

Con lo que acabamos de probar la tesis del lema. □

Lema 4.7. *Para cualquier función de activación ψ se tiene que $\mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ es uniformemente denso para compactos en $\mathcal{C}(\mathbb{R}^d)$.*

Demostración. En virtud del lema 4.6 bastaría probar que $\mathcal{H}_{\cos}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ es uniformemente denso en compactos, ya que hemos visto que $\mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ es denso en $\mathcal{H}_{\cos}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$.

Veamos ahora que $\mathcal{H}_{\cos}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}) = \sum\prod^d(\cos)$ donde recordamos que $\sum\prod^d(\cos)$ se correspondía con el espacio de los polinomios trigonométricos.

$$\sum\prod^{d}(\cos) = \left\{ \sum_{j=1}^{q} \beta_j \prod_{k=1}^{l_j} \cos(A_{j,k}(\cdot)) : q, l_j \in \mathbb{N}, \beta_j \in \mathbb{R}, A_{j,k} \in \mathcal{A}(\mathbb{R}^d) \right\},$$

y $\mathcal{H}_{\cos}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ el caso particular de los polinomios anteriores de grado uno. Luego está claro que $\mathcal{H}_{\cos}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}) \subseteq \sum\prod^d(\cos)$.

Para cualesquiera números reales A, B se tiene

$$\frac{1}{2}(\cos(A+B) + \cos(A-B)) = \cos(A)\cos(B).$$

y de manera general si definimos

$$\Lambda_l = \{(x_1, x_2, ..., x_l) : x_1 = 1, x_i \in \{-1, 1\} \text{ para cualquier } 1 < i \leq l\}$$

se cumple (por inducción)

$$\prod_{k=1}^{l} \cos(A_k) = \frac{1}{2^{l-1}} \left(\sum_{x\in\Lambda_l} \cos\left(\sum_{i=1}^{l} x_i A_i \right) \right).$$

Por lo que cada elemento $\sum_{j=1}^{q} \beta_j \prod_{k=1}^{l_j} \cos(A_{j,k}(\cdot)) \in \sum\prod^d(\cos)$ podrá ser expresado como $\sum_{j=1}^{q} \beta_j \prod_{k=1}^{l_j} \cos(A_{j,k}(\cdot)) = \sum_{j=1}^{t} \alpha_j \cos(A_{j,k}(\cdot))$, es decir, como un elemento de $\mathcal{H}_{\cos}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$. Concluimos como queríamos que son iguales los espacios $\mathcal{H}_{\cos}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ y $\sum\prod^d(\cos)$.

Finalmente gracias al teorema 4.2, por ser el coseno una función real continua no constante sabemos que $\sum\prod^d(\cos)$ es uniformemente denso en compactos en $\mathcal{C}(\mathbb{R}^d)$ probando con esto el resultado buscado.

□

Idea intuitiva lema 4.7:

Afirma que **podemos aproximar cualquier función continua definida con una red neuronal independientemente de la función de activación que use**. Además, si los valores de entrada está dentro de un rango acotado tendremos una cota de error única para todo el dominio.

Podría pensarse que la capacidad de aproximación de una red neuronal depende de su función de activación, este resultado con matices lo desmiente, **eso sí, siempre que se tenga el número suficiente de neuronas**.

Estamos ya en condiciones de probar el resultado clave del trabajo.

Teorema 4.5. *Para cualquier función de activación ψ, $d \in \mathbb{N}$ y medida de probabilidad μ en $(\mathbb{R}^d, B^d)$, se tiene que $\mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ es uniformemente denso para compactos en $\mathcal{C}(\mathbb{R}^d)$ y denso en $\mathcal{M}(\mathbb{R}^d)$ para la distancia ρ_μ.*

Idea intuitiva teorema 4.5:

Afirma que las **redes neuronales son capaces de aproximar funciones medibles**, es decir funciones muy generales con formas variopintas. La diferencia que guarda con el lema 4.7 es que si lo que estamos aproximando es una función medible, no tendremos una cota global del error, es decir **podemos asegurar que en casi todos los puntos esté muy próximo a la función que queremos aproximar**, pero pudiera ser que al evaluar un punto concreto el error sea muy grande.

Demostración. En el lema anterior acabamos de ver que $\mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ es uniformemente denso en compactos en $\mathcal{C}(\mathbb{R}^d)$ y gracias al lema 4.2 que recordemos que afirma que si $\{f_n\}$ es una sucesión de funciones en $\mathcal{M}(\mathbb{R}^d)$ que converge uniformemente en un compacto a f entonces $\rho_\mu(f_n, f) \longrightarrow 0$; esto implica que $\mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ sea ρ_μ-denso en $\mathcal{C}(\mathbb{R}^d)$.

Finalmente como consecuencia del lema 4.3 que indica que para cualquier medida finita μ se tiene que $\mathcal{C}(\mathbb{R}^d)$ es denso en $\mathcal{M}(\mathbb{R}^d)$ para la distancia ρ_μ se tiene por la transitividad de ser denso (ver mismo razonamiento que el usado para la demostración del teorema 4.3) que $\mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ es ρ_μ-denso en $\mathcal{M}(\mathbb{R}^d)$. □

4.4.1.1. Relevancia del teorema de aproximación de funciones medibles 4.5

Notemos que $\mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ representa el conjunto de las redes neuronales *feedforward* con tan solo una capa oculta, luego acabamos de probar que las redes neuronales *feedforward* con tan solo una capa oculta son capaces de aproximar aproximar uniformemente con un error prefijado cualquier función continua y aproximar *a secas* cualquier función medible con cualquier medida μ, distancia ρ_μ, independiente de la función de activación μ seleccionada (ya sea continua o no) y con cualquier dimensión d del espacio de entrada.

Reflexión sobre 4.5

Por lo que acabamos de ver no se *aproxima igual de bien* las funciones continuas a las medibles. La cuestión es la siguiente ¿la función que nosotros queremos aproximar con una red neuronal es continua o solo medible? A nivel práctico es ante todo desconocida, luego debemos suponer las hipótesis menos restrictivas, es decir, que sea solo medible.

Trataremos ahora de generalizar la tesis expuesta en el teorema 4.5 sobre las funciones medibles. Para ello recordaremos el teorema de Lusin.

Teorema 4.6 (Teorema de Lusin)**.** *Si μ es una medida regular de Borel, E un conjunto de medida finita y f una función medible en E entonces para cualquier $\varepsilon > 0$ existirá un conjunto compacto K en E tal que $\mu(E \setminus C) \leq \varepsilon$ y donde f es continua en K.*

Demostración. Demostración en páginas 242 y 243 de [Hal74]. □

Notemos los puntos clave de este teorema, nos va a permitir *trabajar* con una función medible como si fuera continua en un compacto todo lo parecido a $\mathbb{R}^r$ como se quiera.

Teorema 4.7. *(Caracterización de normalidad de Tietze) Sea X un espacio Hausdorff. Son equivalentes las siguientes afirmaciones:*

1. *X es normal.*
2. *Para cada conjunto cerrado $A \subset X$ y para cualquier función continua $f : A \longrightarrow \mathbb{R}$, f admite una extensión continua $F : X \longrightarrow \mathbb{R}$. Además, si para todo $a \in A$ se cumple que $|f(a)| < c \in \mathbb{R}$, se puede elegir F de tal forma que satisfaga que $|F(x)| < c$ para todo $x \in X$.*

(Demostración en páginas 149-151 de [Dug66])

Como el ambiente actual en el que estamos trabajando es el espacio $(\mathbb{R}^d, \mathcal{T})$ que sabemos que es normal y puesto que es habitual que nuestras funciones estén definidas en compactos de $\mathbb{R}^d$, las podremos extender a $\mathbb{R}^d$.

Corolario 4.2. *Para cada función $g \in \mathcal{M}(\mathbb{R}^d)$ existe un subconjunto compacto K de $\mathbb{R}^d$ y $f \in \mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ tal que para cualquier $\varepsilon > 0$ se tiene que $\mu(K) > 1 - \varepsilon$ y para cada $x \in K$ tenemos que*

$$|f(x) - g(x)| < \varepsilon,$$

independientemente de la función de activación ψ, dimensión d o medida μ.

Idea intuitiva corolario 4.2

Este teorema corrige la carencia sobre la precisión del error que describíamos en la idea intuitiva del teorema 4.5. Podemos encontrar una red neuronal que aproxime cualquier función medible que queramos en todos los puntos del espacio que deseados.

Demostración. Sea $\varepsilon > 0$ fijo pero arbitrario. Gracias al teorema de Lusin 4.6 existe un subconjunto compacto $K \subset \mathbb{R}^d$ de medida $\mu(K) > 1 - \varepsilon$ donde la restricción $g_{|K}$ es continua.

Por otra parte, en virtud de la caracterización de Tietze 4.7, por estar $g_{|K}$ definida en un compacto, admite una extensión continua $G : \mathbb{R}^d \longrightarrow \mathbb{R}$ tal que

$$G_{|K} = g_{|K}.$$

Por ser G continua en un compacto, por la densidad de las redes neuronales en compactos en $\mathcal{C}(\mathbb{R}^d)$(lema 4.7) se tiene que existirá $f \in \sum \prod^d(\psi)$ tal que

$$\sup_{x \in K} |G(x) - f(x)| < \varepsilon.$$

Por lo que podemos afirmar que para todo $x \in K$

$$|f(x) - g(x)| \leq |f(x) - G(x)| + |G(x) - g(x)| < \varepsilon + 0 = \varepsilon$$

como queríamos probar. □

4.5. Generalización a espacios L_p

Hasta ahora habíamos considerado el espacio de funciones continuas $\mathcal{C}(\mathbb{R}^d)$ como subespacio dentro del espacio de funciones medibles $\mathcal{M}(\mathbb{R}^d)$. Sin embargo, ser continua es una hipótesis muy estricta ya que existe una amplia gama de subespacios que contienen al de las funciones continuas y están contenidos en el de funciones medibles. Es por ello que vamos a realizar una generalización de los teoremas para espacios L_p. De manera intuitiva estos espacios nos van a permitir considerar funciones que no necesariamente sean continuas y que incluso no están acotadas.

Idea intuitiva de espacio L_p

Con esta definición lo que se trata es de considerar funciones que tomen un valor real en la mayoría de sus puntos. Ya que la integral no varía su valor si se aplican cambios puntuales.

Definición 4.10 (Espacios Lp)**.** Se llama espacio $L_p(\mathbb{R}^d, \mu)$ o simplemente L_p al conjunto de funciones $f \in \mathcal{M}(\mathbb{R}^d)$ tales que

$$\int |f(x)|^p d\mu < \infty.$$

Se define la norma de L_p como

$$\|f\|_p = \left(\int |f(x)|^p d\mu \right)^{\frac{1}{p}}$$

y la distancia asociada al espacio L_p se define como

$$\rho_p(f, g) = \|f - g\|_p.$$

Corolario 4.3. *Si existe un subconjunto compacto K en $\mathbb{R}^d$ de medida $\mu(K) = 1$ entonces $\mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ es ρ_p-denso en $L_p(\mathbb{R}^d, \mu)$ para cualquier $p \in [1, \infty)$, independientemente de ψ, d o μ.*

Demostración. Se quiere probar que para cualquier $g \in L_p$ y $\varepsilon > 0$ existe $f \in \mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ tal que

$$\rho_p(f, g) < \varepsilon.$$

Por pertenecer g a L_p existe una constante M real positiva lo suficientemente grande tal que si definimos la función $h = g1_{|g|<M}$ esta satisface que

$$\rho_p(g, h) < \frac{\varepsilon}{3}. \tag{4.10}$$

Además como h es una función acotada de L_p, podemos encontrar una función s continua que es límite de una sucesión de funciones simples (pag 241-242, teoremas 55C y 55D [Hal74]) y la cual cumple que

$$\rho_p(h, s) < \frac{\varepsilon}{3}. \tag{4.11}$$

Por el teorema 4.5, al estar en un compacto K y por ser $\mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ uniformemente denso en compactos hay una $f \in \mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ la cual cumple que

$$\sup_{x \in K} |f(x) - s(x)|^p < \left(\frac{\varepsilon}{3}\right)^p.$$

Y por hipótesis $\mu(K) = 1$ y definición de la distancia ρ_p se tiene la siguiente desigualdad:

$$\rho_p(f, s) = \left(\int |f(x) - s(x)|^p d\mu\right)^{\frac{1}{p}} \leq \left(\int \left(\frac{\varepsilon}{3}\right)^p d\mu\right)^{\frac{1}{p}} = \left(\mu(K)\left(\frac{\varepsilon}{3}\right)^p\right)^{\frac{1}{p}} = \frac{\varepsilon}{3}. \tag{4.12}$$

Gracias a la desigualdad triangular y las desigualdades (4.12), (4.10) y (4.11) tenemos

$$\rho_p(f, g) \leq \rho_p(f, s) + \rho_p(s, h) + \rho_p(h, g) < \frac{\varepsilon}{3} + \frac{\varepsilon}{3} + \frac{\varepsilon}{3} = \varepsilon.$$

Probando con ello lo buscado. □

Idea intuitiva corolario 4.3

Se prueba que des neuronales son de aproximar cualq ción de la clase reci ducida.

Corolario 4.4. *Si μ es una medida de probabilidad en $[0,1]^d$ entonces $\mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ es ρ_p-denso en $L_p([0,1]^d, \mu)$ para todo $p \in [1, \infty)$, independientemente de ψ, d, μ.*

Idea intuitiva corolario 4.4

A diferencia que con el corolario 4.3, aquí se afirma que las redes neuronales son capaces de aproximar cualquier función de la clase recién introducida cuyo dominio parta de $[0,1]^d$, es decir **se está concretando los valores de entrada que pueden tomar las funciones**.

Demostración. Es consecuencia directa del corolario previo 4.3 donde para este caso particular $K = [0,1]^d$ un compacto de $\mathbb{R}^d$ que cumple que $\mu(K) = 1$. □

Corolario 4.5. *Sea μ una medida, que para un conjunto finito de puntos O cumple que $\mu(O) = 1$, entonces, para cualquier función medible $g \in \mathcal{M}(\mathbb{R}^d)$ y sea cual sea $\varepsilon > 0$ existe $f \in \mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ la cual cumple que*

$$\mu\{x : |f(x) - g(x)| < \varepsilon\} = 1.$$

Demostración. Por el teorema 4.5 existe $f \in \mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ tal que para cualquier $\varepsilon_1, \varepsilon_2 > 0$ se cumple que $\mu\{x : |f(x) - g(x)| > \varepsilon_1\} < \varepsilon_2$. Sea O el conjunto de puntos tal que $\mu(O) = 1$. Por ser finito O podemos encontrar

$$\delta = \min_{x \in O}\{\mu(x) : \mu(x) > 0\}. \tag{4.13}$$

Sin pérdida de generalidad tomamos $\varepsilon < \delta$ y entonces para que la f fijada cumpla que

$$\rho_\mu(f,g) = \varepsilon$$

debe de cumplirse que

$$\rho_\mu(f,g) = \inf\{\varepsilon_1 > 0 : \mu\{x : |f(x) - g(x)| > \varepsilon_1\} < \varepsilon_1\} = \varepsilon,$$

pero por cómo tomamos ε en (4.13) se tiene que $\mu\{x : |f(x) - g(x)| > \varepsilon\} = 0$. Por lo que acabamos de probar, como queríamos, que

$$\mu\{x : |f(x) - g(x)| < \varepsilon\} = 1.$$

□

Nótese que con este corolario lo que se está indicando es que dado un conjunto finito y sus respectivas imágenes, se puede encontrar una red neuronal que para tales puntos *devuelva* el valor exacto.

Definición 4.11 (Función Booleana)**.** Decimos que una función es Booleana si su dominio es $\{0,1\}^d$ para algún $d \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$ y su codominio es $\{0,1\}$. Es decir,

$$f : \{0,1\}^d \longrightarrow \{0,1\}.$$

Ejemplos conocidos son la función $or : \{0,1\}^d \longrightarrow \{0,1\}$ que vale uno si alguno de su entrada es uno y la función $and : \{0,1\}^d \longrightarrow \{0,1\}$ que se define como $and(x_1,\ldots,x_d) = \prod_{i=1}^d x_i$.

Corolario 4.6. *Para cada función Booleana $g : \{0,1\}^d \longrightarrow \{0,1\}$ y cada $\varepsilon > 0$ existe una red neuronal $f \in \mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ tal que*

$$\max_{x \in \{0,1\}^d} |g(x) - f(x)| < \varepsilon.$$

Demostración. Se define la función $\mu : \mathbb{R}^d \longrightarrow [0,1]$ de forma que

$$\mu(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{2^d} & \text{si } x \in \{0,1\}^d \\ 0 & \text{si } x \notin \{0,1\}^d \end{cases}$$

Se tiene que μ es una medida ya que cumple que

1. Hipótesis de acotación: $0 \leq \mu(A) \leq 1$ para $A \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^d)$.
2. La probabilidad del vacío es nula y la del total es la unidad.
3. La probabilidad de la unión es la suma de la probabilidades.

$$P\left(\cup_{i=1}^n A_i\right) = \sum_{i=1}^n P(A_i). \quad \forall A_i \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^d).$$

Relevancia práctica del corolario 4.6
Este resultado nos permite **aproximar funciones que actúen como clasificadores discretos**. Por ejemplo sea g como una función que dada una imagen x indica si hay un perro haciendo valer $g(x) = 1$ y en caso contrario $g(x) = 0$.

Observación sobre la implementación del corolario 4.6
El resultado nos indica que podemos obtener una red neuronal h que aproxime tal clasificador, pero **tal red neuronal no necesariamente tomará valores discretos**, es decir, pudiera darse el caso en que las imágenes a un rango, por ejemplo:

$$h(\{x : g(x) = 0\}) \subset [-0.2, 0.3]$$

y que

$$h(\{x : g(x) = 1\}) \subset [0.9, 1.2],$$

por lo que se pone de manifiesto en este resultado, que en caso de requerirse de una salida completamente discreta debería de componerse con otra función θ tal que

$$\theta \circ h(\{x : g(x) = 0\}) = 0$$

y

$$\theta \circ h(\{x : g(x) = 1\}) = 1$$

.

Como la cardinalidad de $\{0,1\}^d$ es 2^d podemos aplicar el corolario 4.5 y entonces sabemos que existe $f \in \mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ tal que

$$\mu\{x : |f(x) - g(x)| < \varepsilon\} = 1,$$

es decir que

$$\max_{x \in \{0,1\}^d} |g(x) - f(x)| < \varepsilon$$

como queríamos probar. □

Lema 4.8. *Si una función de activación ψ alcanza el cero y el uno, esto es si existen dos constantes reales M_1, M_2 tales que*

$$\psi(M_1) = 0 \text{ y } \psi(M_2) = 1$$

entonces existe una constante real positiva M tal que

$$\psi(-M) = 1 - \psi(M) = 0.$$

Demostración. Sea $M = \max\{|M_1|, |M_2|\}$ y por ser ψ una función de activación sabemos que es no decreciente y que su imagen pertenece al intervalo $[0,1]$.

Por tanto

$$\begin{aligned} 0 \leq \psi(-M) \leq \psi(M_1) = 0 \quad &\text{luego} \quad \psi(-M) = 0, \\ 1 \geq \psi(M) \geq \psi(M_2) = 1 \quad &\text{luego} \quad \psi(M) = 1. \end{aligned}$$

Gracias a estas desigualdades es fácil ver que

$$\psi(-M) = 1 - \psi(M) = 0$$

como queríamos probar. □

Es interesante percatarse de que de no exigirse la hipótesis de que ψ alcanza el cero y el uno no puede asegurarse la igualdad demostrada. Pongamos como ejemplo la siguiente función de activación

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & si \quad x \leq 0 \\ \frac{|x|}{1+|x|} & si \quad 0 < x. \end{cases}$$

Lema 4.9. *Dado un conjunto finito de vectores $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ con d natural positivo. Existe un vector $p \in \mathbb{R}^d$ que satisface que para cualesquiera $x, y \in \Lambda$ diferentes*

$$p \cdot (x - y) \neq 0.$$

Idea clave teorema 4.8

Podemos conseguir una red neuronal que *valga* lo que queramos en un conjunto finito de puntos.

Demostración. Si n es el cardinal de Λ, consideramos el conjunto U definido como la unión de $n(n-1)$ hiperplanos de $\mathbb{R}^d$

$$U = \bigcup_{\substack{x,y \in \Lambda \\ x \neq y}} \{p \in \mathbb{R}^d : p \cdot (x - y) = 0\}.$$

Puesto que $\mathbb{R}^d$ no puede ser expresado como unión finita de hiperplanos, $U \subsetneq \mathbb{R}^d$ y por tanto existirá $p \in \mathbb{R}^d \setminus U$ tal que

$$p \cdot (x - y) \neq 0 \text{ para cualesquiera } x, y \in \Lambda \text{ diferentes},$$

como queríamos probar. □

Idea de la demostración del teorema 4.8

Es interesante reparar en que la demostración se basa en añadir una neurona por cada punto que queramos que tome un valor concreto, esa neurona se activará (es decir, no será nula) cuando la entrada x *sea mayor* que el valor que la activa x_i y vale la diferencia con el valor anterior x_{i-1}, es decir $g(x_i) - g(x_{i-1})$, como el nodo x_{i-1} también se activará por ser menor, el término $g(x_{i-1})$ se suma a la salida de la red y así como una serie telescópica al final solo resultará el valor $g(x_i)$.

Teorema 4.8 (Sobre el entrenamiento práctico de redes neuronales)**.** *Sea $\Lambda = \{x_1, \dots, x_n\}$ un conjunto de puntos distintos de $\mathbb{R}^d$ y sea $g : \mathbb{R}^d \longrightarrow \mathbb{R}$ una función arbitraria. Si ψ alcanza el cero y el uno, entonces existe una red neuronal $f \in \mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ con n neuronas ocultas tal que*

$$f(x_i) = g(x_i) \text{ para todo } i \in \{1, \dots, n\}.$$

Demostración. Con el fin de facilitar la comprensión dividiremos la demostración en dos casos, primero uno particular, cuando $d = 1$ y después el caso general.

Caso primero

Suponemos que $\{x_1, \dots, x_n\} \subset \mathbb{R}$ y tras renombrar podemos suponer que

$$x_1 < x_2 < \cdots < x_n.$$

Por alcanzar la función de activación ψ el cero y el uno, gracias al lema 4.8 existe una constante M tal que $\psi(-M) = 1 - \psi(M) = 0$.

Definiremos de manera recursiva la red neuronal buscada f_n.

Nueva hipótesis de optimización

El teorema 4.8 nos brinda una heurística de inicialización de los pesos de una red neuronal. La cual se tratará en la sección 7.

- Red neuronal f_1.

  Sea A_1 la función afín constante $A_1 = M$. Fijamos $\beta_1 = g(x_1)$. De esta manera la red neuronal f_1 queda definida como $f_1(x) = \beta_1 \psi(A_1(x))$.

- Red neuronal f_k con $1 < k \leq n$.

  Se define A_k como la única función afín que cumple que

  $$A_k(x_{k-1}) = -M \quad \text{y} \quad A_k(x_k) = M.$$

  Fijamos $\beta_k = g(x_k) - g(x_{k-1})$. La red neuronal f_k se calcula como

  $$f_k(x) = \sum_{j=1}^{k} \beta_j \psi(A_j(x)) = (g(x_k) - g(x_{k-1}))\psi(A_k(x)) + f_{k-1}(x).$$

  Observemos que así construida se tiene que para cualquier $y > x_k$ la evaluación con la red neuronal resulta $f_k(y) = g(x_k)$.

Veamos por inducción sobre n que así definida para cualquier $1 \leq i \leq n$ se tiene que $f_n(x_i) = g(x_i)$. Además de que tiene un total de n neuronas ocultas.

- Caso base, $n = 1$.

  $$f_1(x_1) = \beta_1 \psi(A_1(x_1)) = g(x_1)\psi(M) = g(x_1).$$

- Supuesto que es cierto para $n - 1$ veamos que lo es para n. Evaluación de x_n

  $$\begin{aligned} f_n(x_n) &= (g(x_n) - g(x_{n-1}))\psi(A_n(x_n)) + f_{n-1}(x_n) \\ &= (g(x_n) - g(x_{n-1}))\psi(M) + g(x_{n-1}) \\ &= (g(x_n) - g(x_{n-1})) + g(x_{n-1}) \\ &= g(x_n). \end{aligned}$$

Evaluación de x_i con $1 \leq i < n$.

Usando que $0 \leq \psi(A_n(x_i)) < \psi(A_n(-M)) = 0$ y la hipótesis de inducción se tiene que

$$\begin{aligned} f_n(x_i) &= (g(x_n) - g(x_{n-1}))\psi(A_n(x_i)) + f_{n-1}(x_i) \\ &= 0 + g(x_i) \\ &= g(x_i). \end{aligned}$$

Acabamos de probar por inducción que $f_n(x) = g(x)$ para cualquier $x \in \Lambda$, lo que termina la demostración.

Caso segundo

Se tiene para este caso que $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ con $d > 1$. Seleccionamos $p \in \mathbb{R}^d$ cumpliendo que para cualesquiera $x, y \in \Lambda$ distintos $p(x - y) \neq 0$ (es posible de encontrar por el lema 4.9). Gracias a esta condición cada producto $p \cdot x$ con $x \in \Lambda$ es distinto y podemos establecer con ello una relación de orden, que tras renombrar los elementos de Λ queda

$$p \cdot x_1 < p \cdot x_2 < \cdots < p \cdot x_n,$$

y como procedimos en el caso primero, definimos de manera recursiva la red neuronal f_n buscada:

- Red neuronal f_1.

  Sea B_1 la función afín de $\mathbb{R}$ a $\mathbb{R}$ constante $B_1 = M$. Fijamos $\beta_1 = g(x_1)$. De esta manera la red neuronal f_1 definida como $f_1(x) = \beta_1 \psi(B_1(p \cdot x))$.

- Red neuronal f_k con $1 < k \leq n$.

  Se define B_k como la única función afín de $\mathbb{R}$ en $\mathbb{R}$ que cumple que

  $$B_k(p \cdot x_{k-1}) = -M \quad \text{y} \quad B_k(p \cdot x_k) = M.$$

  Podemos definir entonces $A \in \mathcal{A}(\mathbb{R}^d)$ por $A_k(x) = B_k(p \cdot x)$. Fijamos también

  $$\beta_k = g(x_k) - g(x_{k-1}).$$

  La red neuronal f_k se calcula como

  $$f_k(x) = \sum_{j=1}^{k} \beta_j \psi(B_j(p \cdot x)) = (g(x_k) - g(x_{k-1}))\psi(B_k(p \cdot x)) + f_{k-1}(x)$$

  $$= \sum_{j=1}^{k} \beta_j \psi(A_j(x)) = (g(x_k) - g(x_{k-1}))\psi(A_k(x)) + f_{k-1}(x).$$

Así definida, la prueba por inducción es idéntica a la del caso primero y hemos encontrado por tanto la red neuronal f_n buscada. □

4.5.1. Reflexión sobre el número de neuronas

Ante la pregunta natural de *¿cuántas neuronas son necesarias?* el recién probado teorema nos responde que si estamos entrenando con n datos, con n neuronas es suficiente para volver a reproducir esos datos. Pero esto carece de sentido a nivel práctico por los siguientes motivos.

Naturaleza de los datos

Recordemos que el problema al que nos enfrentamos es el siguiente: queremos ser capaces de predecir cierto fenómeno regido por g una *función* desconocida. Para ello tenemos un *conjunto de muestras* compuestas por pares $(x, g(x))$, es decir, ante la situación x hemos observado que el fenómeno se comporta como $g(x)$. Todo esta situación experimental puede producir incoherencias teóricas, como por ejemplo que se tengan dos muestras $(x_1, y_1), (x_2, y_2)$ tales que $x_1 = x_2$ pero $y_1 \neq y_2$ o que la medición contenga errores, es decir $(x, g(x) + \delta)$.

Se podría paliar esta situación con un preprocesado de los datos.

Naturaleza de la regla subyacente

Supongamos que los datos de entrenamiento son perfectos. Existen infinitas aplicaciones que evalúan de la misma manera un conjunto finito de puntos. ¿Cuáles tomar?

Podríamos, siguiendo el principio de economía de Ockham optar por modelos que reduzcan el número de neuronas, pero entonces la pregunta sería ¿qué número mínimo de neuronas serían necesarios para representar el modelo? Una solución sería tomar un número de neuronas menor que el tamaño del conjunto de entrenamiento y utilizar esa *redundancia* de datos para *afinar*.

Coste computacional inasumible

Supongamos que los datos son idílicos, el modelo se conoce y se establece un tamaño de datos de entrenamiento suficiente y un número de neuronas acorde ¿podríamos asumir el coste computacional?

4.6. Generalización para *multi-output neural networks*

En las secciones anteriores se han provisto resultados para redes neuronales de salida real. Vamos a generalizar los resultados vistos para ser capaces de aproximar funciones continuas o medibles de $\mathbb{R}^d$ a $\mathbb{R}^s$ con $d, s \in \mathbb{N}$.

Denotaremos por $\mathcal{C}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s)$ al conjunto de funciones continuas definidas de $\mathbb{R}^d$ a $\mathbb{R}^s$ y al de funciones medibles de $\mathbb{R}^d$ a $\mathbb{R}^s$ por $\mathcal{M}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s)$. La distancia asociada a estos espacios se define como

$$\rho_\mu^s(f, g) = \sum_{i=1}^{s} \rho_\mu(f_i, g_i).$$

Con la siguiente definición buscamos abstraer el modelo de una red neuronal de una capa oculta y salida múltiple.

Nótese que los vectores $(w_{0i}, w_{1i}, \ldots, w_{ri})$ representan a la aplicación afín $A_i((x_1, x_2, \ldots x_r)) = w_{0i} + \sum_{j=1}^{d} w_{ji} x_j$ con $i \in \{1, \ldots, h\}$.

Definición 4.12 (Abstracción de una red neuronal con una capa oculta y múltiple salida)**.** Para cualquier función Borel medible G, definida de $\mathbb{R}$ a $\mathbb{R}$ y cualesquiera naturales positivos

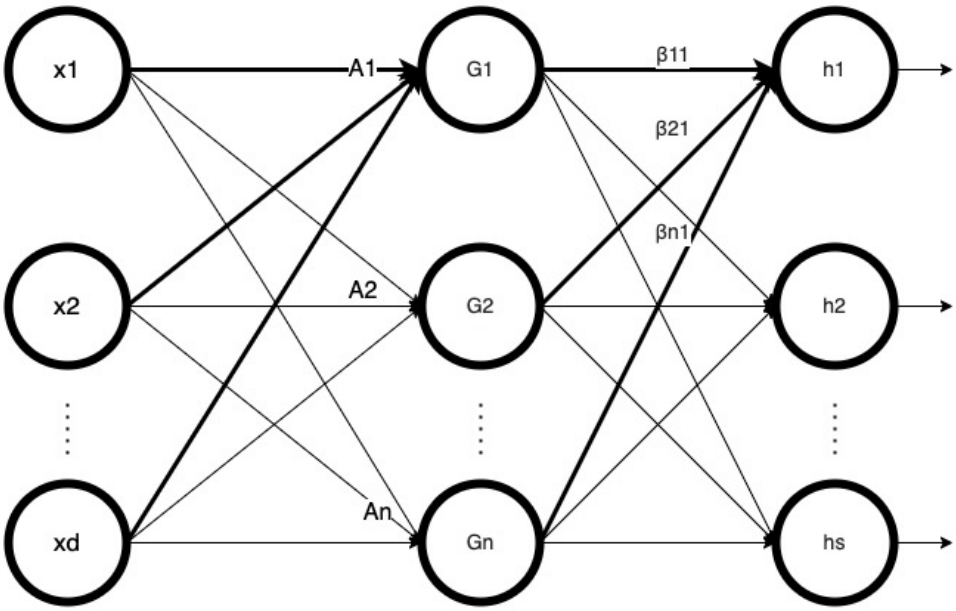


Figura 4.7: Ejemplo de red neuronal de una capa oculta con n nodos, de dimensión de entrada d y salida s.

$d, s \in \mathbb{N}$ se define a la clase de funciones $\mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s)$ como

$$\begin{aligned}\mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s) = \{h : \mathbb{R}^d \longrightarrow \mathbb{R}^s, h = (h_1, h_2, \ldots, h_s)/ \\ \text{con } h_i : \mathbb{R}^d \longrightarrow \mathbb{R}, h_i(x) = \sum_{j=1}^{n_i} (\beta_{ji} G(A_j(x)) \quad i \in \{1, 2, \ldots, s\}, \\ x \in \mathbb{R}^d, \beta_{ji} \in \mathbb{R}, A_j \in \mathcal{A}(\mathbb{R}^d), n_i \in \mathbb{N}, i \in \{1, \ldots, s\}\}.\end{aligned}$$

Por qué se ha destacado la observación Se destaca tal observación para remarcar que una red neural con salidas en varias dimensiones tiene una definición mucho más estricta y que podría dar a confusión.

Observación:

Es interesante apreciar que se tiene que

$$\begin{aligned}\mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s) \subsetneq \{h : \mathbb{R}^d \longrightarrow \mathbb{R}^s, h = (h_1, h_2, \ldots, h_s)/ \\ h_i \in \mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}) \quad \forall i \in \{1, \ldots, s\}\}.\end{aligned} \tag{4.14}$$

aunque como veremos en el corolario 4.7 $\mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s)$ es un espacio denso en el conjunto que acabamos de presentar. Si tenemos presente que de acorde a nuestras definiciones una red neuronal h_i viene determinada por un conjunto de funciones afines $A_j^{(i)}$ y escalares $\beta^{(i)_j}$, se daría la igualdad en 4.14 si imponemos que para cualquier par de redes neuronales h_k, h_j se satisface que $A_i^{(k)} = A_i^{(j)}$.

No es difícil pensar que su versión generalizada sea:

Definición 4.13. Dadas las mismas hipótesis que en la definición anterior, se define la si-

guiente clase de funciones como

$$\sum\prod^{d,s}(G) = \{f : \mathbb{R}^d \longrightarrow \mathbb{R}^s, f = (f_1, f_2, \ldots, f_s)/$$
$$\text{con } f_i : \mathbb{R}^d \longrightarrow \mathbb{R}, f_i(x) = \sum_{j=1}^{h} \left(\beta_{ji} \prod_{k=1}^{l_{ji}} G(A_{ji}(x)) \right) \quad i \in \{1, 2, \ldots, s\},$$
$$x \in \mathbb{R}^d, \beta_{ji} \in \mathbb{R}, A_{ji} \in \mathcal{A}(\mathbb{R}^d); h, l_{ji} \in \mathbb{N}\}.$$

Corolario 4.7. *Los teoremas 4.4, 4.5 y los corolarios 4.2, 4.3, 4.4, 4.5 y 4.6 permanecen válidos si se sustituye $\mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ por $\mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s)$,$\sum\prod^d(\psi)$ por $\sum\prod^{d,s}(\psi)$, los espacios de funciones continuas y medibles por $\mathcal{C}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s)$ y $\mathcal{M}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s)$ respectivamente.*

Idea clave corolario 4.7

En esencia, todos los resultados probados hasta ahora para redes neuronales con salida real de dimensión uno son válidos para cualquier tamaño de salida, es decir, **lo que a nosotros nos interesa podemos aproximar cualquier función medible que vaya entre espacios de dimensión finita**.

Demostración. Observemos que todos los teoremas y lemas mencionados basan su tesis en la existencia de una red neuronal es decir, que si llamamos según convenga $\mathcal{F}^{d,s}$ a $\mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s)$ o $\sum\prod^{d,s}(\psi)$ deberemos de encontrar $f \in \mathcal{F}^{d,s}$ que cumplan las respectivas tesis para salidas múltiples.

Nueva hipótesis de optimización

La demostración del corolario nos da una **técnica constructiva** de obtener redes neuronales de varias salidas, que puede ser de valía para aplicarla **como heurística para inicializar los pesos de la red neuronal** como ya apuntábamos en las notas del teorema 4.8.

La prueba se construirá por inducción sobre el número de salidas s.

El caso base $s = 1$ viene dado por los respectivos teoremas y lemas ya probados. Supuesto cierto para $s = n$ veamos que se cumple para $s = n + 1$:

Se quiere encontrar $f = (f_1, f_2, \ldots, f_n, f_{n+1})$ de $n + 1$ salidas, por hipótesis de inducción existe $g_n \in \mathcal{F}^{d,n}$ con $g_n = (f_1, f_2, \ldots, f_n)$ y con h_n sumandos. Denotamos a los pesos de las transformaciones afines $w_{ij} \in \mathbb{R}$ con $i \in \{0, 1, \ldots, d\}$ y $j \in \{1, \ldots, h_n\}$ y $\beta_{kl} \in \mathbb{R}$ con $k \in \{1, \ldots, h_n\}$ y $l \in \{1, \ldots, n\}$.

También existe $g_1 \in \mathcal{F}^{d,1}$ cumpliendo que $g_1 = f_{n+1}$ con h_1 sumandos en la capa oculta y pesos $w'_{ij} \in \mathbb{R}$ con $i \in \{0, 1, \ldots, d\}$ y $j \in \{1, \ldots, h_1\}$ y $\beta'_{kl} \in \mathbb{R}$ con $k \in \{1, \ldots, h_1\}$ y $l = n + 1$ (Ver figura 4.7 para orientarse en la notación tomada).

Considerando f compuesta por $h_n + h_1$ sumandos y donde sus pesos son los siguientes:

El peso $\tilde{w}$ de las funciones afines: Para cualesquiera $i \in \{0, 1, \ldots, d\}$ y $j \in \{1, \ldots, h_n, h_n + 1, \ldots, h_n + h_1\}$ determinaremos la siguiente casuística

1. Si $1 \leq j \leq h_n$ entonces $\tilde{w}_{ij} = w_{ij}$.
2. Si $h_n < j \leq h_n + h_1$ entonces $\tilde{w}_{ij} = w_{i(j-h_n)}$.

Para los pesos $\tilde{\beta}$, para cualquier $k \in \{1, \ldots, h_n, h_n + 1, \ldots, h_n + h_1\}$ y $l \in \{1, \ldots, n + 1\}$:

1. Si $k \in \{1, \ldots, h_n\}$ y $l \in \{1, \ldots, n\}$ entonces $\tilde{\beta}_{kl} = \beta_{kl}$.
2. Si $k \in \{1, \ldots, h_n\}$ y $l = n + 1$ entonces $\tilde{\beta}_{kl} = 0$.
3. Si $k \in \{h_n + 1, \ldots, h_n + h_1\}$ y $l \in \{1, \ldots, n\}$ entonces $\tilde{\beta}_{kl} = 0$.
4. Si $k \in \{h_n + 1, \ldots, h_n + h_1\}$ y $l = n + 1$ entonces $\tilde{\beta}_{kl} = \beta'_{(k-h_n)l}$.

Notemos que $f = (f_1, f_2, \ldots, f_n, f_{n+1})$, es decir $f \in \mathcal{F}^{d,s}$, y que para cada teorema o lema cada una de las proyecciones de f cumple la tesis, es decir f cumple lo buscado. □

Idea clave demostración corolario 4.7

La demostración del corolario es totalmente constructiva: si se desea una red neuronal de salida $s \in \mathbb{N}$, se construyen de manera independiente s redes neuronales de salida de dimensión uno (una para cada salida buscada) y las concatenamos haciendo valer cero las conexiones entre nodos que no pertenecieran a las redes de partida.

Conclusión sobre el teorema anterior

A la vista de la demostración constructiva se nos acaba de decir de manera indirecta que si queremos construir una red neuronal a partir de un tamaño de conjunto entrenamiento E y de salida de dimensión s, con una red neuronal de $E \times s$ neuronas en la ocultas será suficiente y para este caso la reflexión expuesta en la sección 4.5.1 es idéntica.

4.7. Consideración sobre la capacidad de cálculo

Suele pasar peligrosamente desapercibido que el teorema 4.7 recién probado asegura que se podrá encontrar una red neuronal en $\mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s)$ que aproxime todo lo bien que queramos la función ideal; sin embargo, destaquemos que los parámetros que caracterizan a la red neuronal encontrada son reales. Es decir, si nuestra red neuronal toma valores irracionales difícilmente será computable en un ordenador por su infinitud.

Esto nos impone una nueva restricción en el espacio de búsqueda, ya que no solo debe de reducirse el error, si no que los parámetros que representan la red deben de estar limitados a cierta precisión: la propia de un ordenador.

Comenzaremos viendo que, en efecto, una red neuronal con parámetros en el cuerpo de los racionales es factible como aproximador universal.

Ojalá hubiera un lenguaje de programación que permitiera trabajar explícitamente con tipos racionales
De hecho el lenguaje de programación Julia, el que hemos seleccionado para nuestra implementación sí lo permite. (Véase la documentación oficial de Julia sobre *Rational numbers*, consultada por última ver el 30 de mayo del 2022).

Aportación original

Teorema 4.9. *El espacio $\mathcal{H}(\mathbb{Q}^d, \mathbb{Q}^s)$ es denso en el espacio $\mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s)$.*

Demostración. Se quiere probar que para todo $h^r \in \mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s)$, dado cualquier $\varepsilon \in \mathbb{R}^+$ existirá $h^q \in \mathcal{H}(\mathbb{Q}^d, \mathbb{Q}^s)$ tal que $\rho_\mu(h^r, h^q) < \varepsilon$.

La red neuronal h^r está determinada por un conjunto finito de parámetros supongamos que hay q y que están determinados por un índice del conjunto Λ.

Sea $\alpha_i^0 \in \mathbb{R}$, el primer índice h^r definimos la red neuronal h^1 con coeficientes α_i^1 con $i \in \Lambda$ de tal forma que los parámetros que la determinan vienen dados por

$$\alpha_i^1 = \alpha_i^0 \text{ con } i \in \Lambda \text{ y } i \neq 1.$$

El primer parámetro α_1^1, será un número racional seleccionado de tal forma que se satisfaga que

$$\rho_\mu(h^r, h^1) < \frac{\varepsilon}{q}.$$

Por la densidad de los racionales en los reales sabemos que existe α_1^1.

Siguiendo la misma idea, para $j \in \{2, \ldots, q\}$ se define la red neuronal h^j cuyos parámetros vienen dados por

$$\alpha_i^j = \alpha_i^{j-1} \text{ con } i \in \Lambda \text{ y } i \neq j;$$

y $\alpha_j^j \in \mathbb{Q}$ seleccionado de tal forma que

$$\rho_\mu(h^j, h^{j-1}) < \frac{\varepsilon}{q}.$$

De esta forma, en virtud de la desigualdad triangular, se ha encontrado una red neuronal h^q de modo que todos sus parámetros son racionales y satisface $\rho_\mu(h^r, h^q) < \varepsilon$. □

Si bien los números racionales tienen el potencial de ser computados, seguimos sujetos a que el número de decimales y tamaño de su parte entera *sean lo suficientemente pequeños* como para poder ser representados y calculados con un ordenador. Esto no tiene que ser, cierto y de hecho abre una nueva cuestión: Al aumentar el número de neuronas, ¿la precisión demandada por una red neuronal también disminuye?

De ser cierto este resultado, podría empezar a denominarse el espacio de las redes neuronales de n neuronas y d bits de precisión.

Es más, una vez limitados los decimales con los que se puede representar una red neuronal; puesto que los números racionales son isomorfos a los enteros, se podría plantear establecer un isomorfismo entre las redes neuronales con parámetros en los racionales y el de las redes neuronales con entradas en los enteros.

Todas estas pesquisas tienen su interés ya que por las arquitecturas actuales, los números flotantes (racionales con un límite de decimales y parte en entera) se calculan en las GPUs, mientras que los enteros en las CPUs, siendo más rápidas la segundas[4] [LKC+10].

[4]En el blog del investigador Long Zhou, se da una visión favorable sobre las CPUs y cómo en la actualidad se comenten errores a la hora de comparar las GPUs y CPUs, dejo link a la publicación. Consultada por última vez el 23 de mayo del 2022, URL: https://long-zhou.github.io/2013/02/12/CPU-GPU-comparison.html

5 Construcción técnica de las redes neuronales de una sola capa

Vista la formulación teórica de una red neuronal de una sola capa introducida en 4.1 estaremos en condiciones se comparará y estudiará la relación teórica entre nuestra propuesta de modelo y los modelos usuales de redes neuronales. Además se justificará, la selección de nuestro modelo en la sección 5.2.

Explicaremos también una construcción técnica junto con un análisis del costo necesario y beneficio obtenido del modelo (ver sección 5.3); así como los algoritmos necesarios para su evaluación (ver 5.3.1) y aprendizaje (ver 5.4). Los algoritmos presentados son las adaptaciones naturales a nuestro enfoque teórico de técnicas como *forward propagation* y *backpropagation* explicadas en [Biso6].

Además, puesto que nuestro objetivo es optimizar seremos muy meticulosos en cuanto a analizar el coste computacional tanto de cómputo como de memoria.

5.1. Componentes de una red neuronal de una capa oculta

Como ya habíamos definido en 4.1 para nosotros una red neuronal será una función $h : X \longrightarrow Y$ con $X \subseteq \mathbb{R}^d, Y \subseteq \mathbb{R}^s$ cuya proyección $k-$ésima viene dada por

$$h_k(x) = \sum_{i=1}^{n} \beta_{ik}\gamma_i(A_i(x)) = \sum_{i=1}^{n} \beta_{ik}\gamma_i\left(w_{0i} + \sum_{j=1}^{d} w_{ji}x_i\right)$$

donde n es el número de neuronas, $\gamma_i \in \Gamma$, funciones medibles definidas de $\mathbb{R}$ a $\mathbb{R}$, $\beta_{ik} \in \mathbb{R}$ y $A_i \in \mathcal{A}(\mathbb{R}^d)$.

Ante esta definición el número de parámetros a ajustar son:

- De la forma β_{ik}: ns.
- De la forma w_{ij}: $n(d+1)$.

Lo que hace un total de $n(s+d+1)$ parámetros, donde n es el número de neuronas, s la dimensión de salida y d la dimensión de entrada. **Por lo general d y s son fijos ya que se suponen requisitos del problema, luego si se desea reducir el coste en memoria deberá de hacerse disminuyendo el número de neuronas.**

Analizaremos más a fondo su componentes.

Construcción de la primera capa

La primera capa está compuesta por el conjunto de n combinaciones lineales del vector de entrada $(x_1, \ldots, x_d)$ a las cuales denominaremos *activaciones*, n será el número de sumandos definidos en 4.1 que equivale al número de neuronas en la capa oculta.

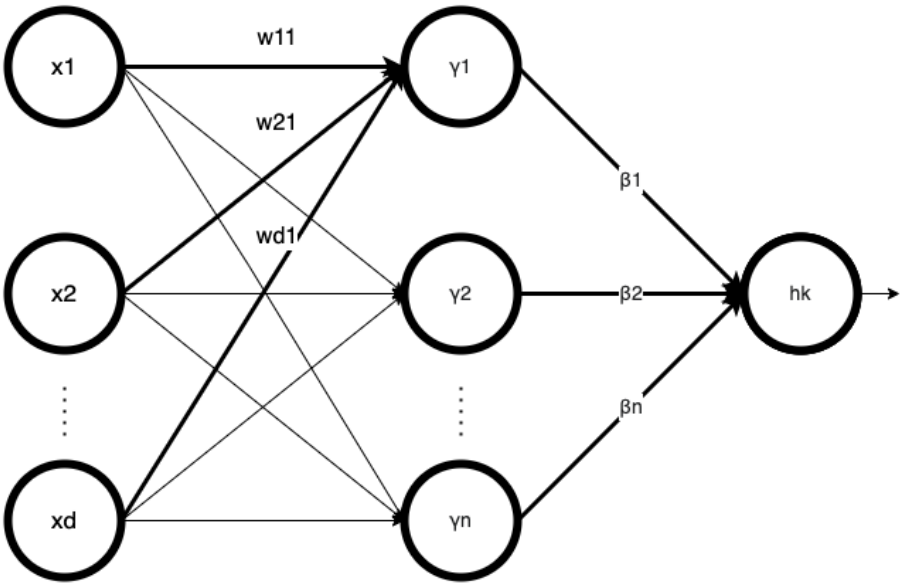


Figura 5.1: *Grafo* de una red neuronal de una capa oculta

$$a_i = w_{0i} + \sum_{i=j}^{d} w_{ji} x_j \text{ con } j \in \{1, \ldots, n\}.$$

Nos referiremos a los parámetros w_{ji} como *pesos* y al parámetro w_{0i} como *sesgo*.

La memoria necesaria será $(d+1)n\mathfrak{F}$ con $\mathfrak{F}$ es el espacio requerido por un peso. El coste computacional es además de d multiplicaciones y $d+1$ sumas.

Unidades ocultas

Cada una de esas *activaciones* será transformada utilizando una *función de activación* γ_j

$$z_i = \gamma_i(a_i).$$

En el contexto de las redes neuronales a z_i se le conoce como *unidad oculta*. Ésta podría ser de nuevo transformada por una combinación lineal, en nuestro caso tan solo por el producto de un escalar, ya que como se adelantó en la sección 4.1, frente a la transformación afín usualmente propuesta, esta transformación no es necesaria para asegurar la convergencia, profundizaremos sobre esto más adelante.

Finalmente la salida vendrá dada por

$$h_k = \sum_{i=1}^{n} \beta_{ik} z_i \text{ con } k \in \{1, \ldots, s\}.$$

Nótese que ahora el tamaño de variables de entrada es M y hay un total de s unidades de activación, tanto M como s son valores fijados por el diseñador de la red ya que a priori no tenemos otra información.

5.1.1. Criterio de selección de funciones de activación

Los aspectos a tener en cuenta a la hora de seleccionar una función de activación frente a otra serían los siguientes:

1. Espacio de memoria que ocupe.
2. Coste computacional.
3. Efectividad en cuanto a reducir el error de aproximación.

Sobre la primera consideración está claro que el uso de una única función ahorraría el tener que almacenar el tipo de función que se va emplear en cada neurona.

Respecto al coste computacional puede uno basarse en una análisis teórico del número de operaciones y su complejidad o realizar un estudio empírico se ha realizado en al sección 6.2.2.

Fijado cierto número de neuronas, en lo que respecta a la precisión que nos puedan aportar las funciones de activación; por la idea intuitiva del funcionamiento de las funciones de activación mostrado en mostrada en 4.3 es un factor que repercute en los resultados pero desconocido a priori.

Estrategia de selección de funciones de activación.

Esta idea abre la puerta a determinar mediante algoritmos de optimización qué funciones de activación podrían resultar más beneficiosas. Ideas similares usando algoritmos genéticos se encuentra en artículos como [KSB18] y [Zha15] sin embargo expondremos nuestra versión en el capítulo 8.

5.2. Justificación del modelo seleccionado

A continuación presentaremos una serie de resultados propios que justificarán nuestro modelo frente a los usuales, a la par que probarán la relación que hay entre uno y otro.

Con el fin de motivarlos tengamos presente la definición de los modelos usuales presentada en 4.1 y la demostración de que el modelo planteado es un aproximador universal del teorema 4.1.

Si bien el teorema de convergencia universal nos asegura que los elementos adicionales de los modelos usuales no son necesarios, hay que tener presente que esto es un resultado de convergencia, es decir, se construye bajo hipótesis de que se disponen de todas las neuronas que sean necesarias para hallar una red neuronal los suficientemente próxima a la función a aproximar.

Podría entonces uno plantearse si a niveles prácticos verdaderamente esas adiciones contribuyen en alguna mejora de precisión o tiempo o verdaderamente son un lastre. Como justificaremos en esta sección los cambios realizados han sido los siguientes:

- **Desaparece la función de clasificación** θ. El motivo es que es un artificio innecesario como mostramos en 5.2.2 y como indica el teorema 4.1.
- **Se elimina un parámetro** de la transformación afín de la última capa; puesto que no es necesario para la convergencia de nuevo por el teorema 4.1 y como veremos en 5.2.1 tampoco aporta beneficios de precisión.

5.2.1. Consideraciones sobre la irrelevancia del sesgo

Aportación original

Dados $X \subseteq \mathbb{R}^d, Y \subseteq \mathbb{R}^s$ y Γ un conjunto no vacío de funciones medibles definidas de $\mathbb{R}$

a $\mathbb{R}$, denotaremos como $\mathcal{H}^+(X,Y)$ al conjunto de redes neuronales a las cuales se le ha añadido un sesgo.

$$\mathcal{H}^+(X,Y) = \{h : X \longrightarrow Y / \quad h_k(x) = \sum_{i=1}^{n} (\beta_{ik}\gamma_i(A_i(x)) + \alpha_{ik}),$$
donde h_k es la proyección k-ésima de h con $k \in \{1,\dots,s\}$,
$n \in \mathbb{N}, \gamma_i \in \Gamma, \beta_{ik} \in \mathbb{R}$ y A_i una aplicación afín de $\mathbb{R}^d$ a $\mathbb{R}\}$.

Está claro que al introducir tal sesgo se añade en memoria un coste de $n\mathfrak{F}$ con n el número de neuronas en la capa oculta y que además el costo de cómputo se ve aumentado en la misma proporción. Sin embargo podría obtenerse un beneficio en cuanto a precisión, vamos a proceder a analizar esta idea. Es evidente que

$$\mathcal{H}(X,Y) \subseteq \mathcal{H}^+(X,Y) \tag{5.1}$$

Además al estar trabajando con una sola capa, se tiene que para cualquier $h^+ \in \mathcal{H}^+(X,Y)$

$$h^+ = \sum_{i=1}^{n} (\beta_{ik}\gamma_i(A_i(x)) + \alpha_{ik}) = \sum_{i=1}^{n} (\beta_{ik}\gamma_i(A_i(x))) + O,$$

con $O \in \mathbb{R}$ un parámetro libre.

Ante esto, al igual que se hacía en el lema 4.5 es fácil obtener una neurona de valor constante y por tanto, para un conjunto fijo de neuronas n, se tiene que

$$\mathcal{H}_n^+(X,Y) \subsetneq \mathcal{H}_{n+1}(X,Y),$$

de esta relación se obtienen dos cosas: puesto que n era arbitrario y

$$\mathcal{H}(X,Y) = \bigcup_{n\in\mathbb{N}} \mathcal{H}_n(X,Y)$$

entonces como espacios de funciones

$$\mathcal{H}(X,Y) = \mathcal{H}^+(X,Y).$$

Por otra parte, la precisión que pueda aportar el sesgo es superada añadiendo una neurona más a un modelo sin sesgo, es más, también se obtiene una mejora en memoria, ya que $\mathcal{H}_n^+(X,Y)$ requiere de $n\mathfrak{F}$ espacio de memoria adicional con respecto a $\mathcal{H}_n(X,Y)$ mientras que $\mathcal{H}_{n+1}(X,Y)$ de $(d+1)\mathfrak{F}$ y por lo visto en el teorema de convergencia universal 4.1, la precisión se consigue añadiendo neuronas (la dimensión de los datos es fija), luego podemos suponer que n será mayor que $d+1$.

Hasta ahora hemos comparado la capacidad de expresión por la forma de los elementos de los conjuntos, para comparar su bondad aproximando, vamos a fijar un número de neuronas en la capa oculta n y y una función de error cualquiera que mida el error dentro del conjunto de entrenamiento $E_{\mathcal{D}} : \mathcal{H}^+(X,Y) \longrightarrow \mathbb{R}_0^+$.

Todas las normas en $\mathbb{R}^n$ son equivalentes luego no hay pérdida de generalidad fijando una cualquiera.

Definimos también el error dentro del espacio Λ como

$$\mathcal{E}_{\mathcal{D}}(\Lambda) = \inf\{E_{\mathcal{D}}(h) : h \in \Lambda\}.$$

Está claro por la relación (5.1) que

$$\mathcal{E}_{\mathcal{D}}(\mathcal{H}^+(X,Y)) \leq \mathcal{E}_{\mathcal{D}}(\mathcal{H}(X,Y)).$$

La clave ahora reside en si se satisface la desigualdad opuesta, es decir, dada cualquier $h^+ \in \mathcal{H}_n^+(X,Y)$ con un error de $E_D(h^+)$ existe $h \in \mathcal{H}_n(X,Y)$ tal que $E_D(h) \leq E_D(h^+)$.

Esto no es posible y para darse cuenta basta con considerar el caso de una neurona, con $G(x)$ su función de activación y $k \in \mathbb{R}^+$ definimos la función ideal como $f(x) = G(x) + k$. Tomando tan solo dos puntos convenientemente seleccionados (por ejemplo M y $-M$ tal que $G(-M) = 0$ y $G(M) = 1$) aprecia que $H_1(\mathbb{R},\mathbb{R})$ no puede aproximar f y sin embargo $f \in H_1^+(\mathbb{R},\mathbb{R})$.

Concluimos tras todo esto que aunque la precisión que se pueda obtener con funciones de $\mathcal{H}_n(X,Y)$ y $\mathcal{H}_n^+(X,Y)$ es diferente para un mismo número de neuronas n, añadiendo una más el sesgo es irrelevante y además $\mathcal{H}_n^+(X,Y)$ tiene mayor coste computacional, por lo que afirmamos que es un artificio de las redes neuronales multicapa para enlazar una capa con otra y que en redes neuronales de una capa oculta carece de sentido.

5.2.2. *Modus operandi* ante problemas que requieran un dominio de salida discreto

Es usual en la literatura presentar las redes neuronales con la salida compuesta con una función θ, de tal manera que una red neuronal sea de la forma

$$h_k(x) = \theta_k\left(\sum_{i=1}^{n} \beta_{ik}\gamma_i\left(w_{0i} + \sum_{j=1}^{d} w_{ji}x_i\right)\right) \text{ para cada } k \in \{1,\dots,s\}. \tag{5.2}$$

El teorema universal de convergencia 4.1 nos asegura que dado un número lo suficientemente grande de neuronas tal composición no es necesaria. Sin embargo, a nivel práctico ese número de neuronas puede no alcanzarse y, por cómo se produce la convergencia, el resultado serán funciones con imágenes con forma de dominios contenidos en $\mathbb{R}^n$.

Por la naturaleza de la imagen de ciertos problemas no sería necesaria mayor modificación y con nuestra definición sería más que suficiente. Pero en caso de que la salida tenga que cumplir alguna restricción, como por ejemplo en problemas de clasificación que necesiten de una salida discreta; sería necesario la composición con una función θ que discretice la imagen como observábamos en 4.6.

La situación por tanto es la siguiente, si procedemos como en 5.2, se tendría que si f es el patrón subyacente de la clasificación y θ la función que discretiza el dominio se deberá de encontrar $h \in \mathcal{H}(\mathbb{R}^d,\mathbb{R}^s)$ tal que h aproxime a $\theta^{-1} \circ f$.

Lo cual exige que θ tenga inversa y que sea medible, además de la cuestión de qué θ es la más conveniente ...

Aportación original

Es por ello que en nuestra aproximación descartamos este modo de proceder y proponemos el siguiente:

1. Entrenamos $h \in \mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s)$, esto dará una salida que no necesariamente será discreta.
2. Una vez que se ha calculado h, θ se determina a partir de h.

Construcción de θ

Una vez fijada h, para $A \subseteq \mathcal{D}$ se define el conjunto

$$\Lambda = \{(h(x), y) : (x, y) \in A\}.$$

A partir del cual θ será una función que se ha obtenido por el método de clasificación supervisada de los k-vecinos más cercanos ($k-$NN) donde el conjunto de entrenamiento es Λ.

El motivo por el que se ha optado por esta aproximación es que si consideráramos θ como una función a trozos usual definida como

$$\tilde{\theta}(x) = y \text{ si } h(x) \in I_y.$$

Donde I_y puede no ser un intervalo conexo y que introduciría complejidad al cálculo y determinación de $\tilde{\theta}$, es por ello que lo natural sería entonces construir un función que discretice a partir de los valores conocidos más cercanos, esto es el algoritmo $k-$NN.

Construcción de $k-$NN

Si la dimensión de salida con la que se ha entrenado h es uno, es decir $s = 1$. Por ser $\mathbb{R}$ de una dimensión lo natural sería hacer $k = 1$, es decir

$$\theta(h(x)) = y_{cercano},$$
$$\text{donde } (h(a), y_{cercano}) \in A \text{ y } h(a) = \min\{|h(x) - h(b)| : (h(b), y) \in A\}.$$

La implementación de la fórmula anterior sería la siguiente:

Algoritmo 1: Cálculo de la función θ como clasificador $1-$NN

Input: Conjunto de datos Λ.
Output: Función $\theta : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$
{Definimos θ como}
Function $\theta(h_x)$**:**
  distancia mínima $\leftarrow \infty$
  clase $\leftarrow NADA$
  {Encontramos el más cercano}
  para todo *cada* (h, y) **hacer**
    si *distancia*(h, h_x) $<$*distancia mínima* **entonces**
      clase $\leftarrow y$
  devolver *clase*
devolver θ

5.3. Construcción explícita y evaluación de una red neuronal

A pesar de que cada neurona puede estar constituida por una función de activación diferente, con el fin de simplificar notación, para nosotros una red neuronal vendrá determinada por dos matrices de pesos y una función de evaluación.

Es decir siguiendo la idea constructiva expuesta en manuales tales como [CM07] cualquier $h \in \mathcal{H}_n(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s)$ de n neuronas en la capa oculta se implementa como $(\gamma, M_{n\times(1+r)}, M_{(n+1)\times s})$ con $M_{f\times c}$ matrices de dimensiones f filas y c columnas. Donde γ representa la función de activación en cada nodo. $M_{n\times(1+r)}$ son los pesos de la primera capa y $M_{(n+1)\times s}$ son los pesos de la salida.

Tomando como $\mathfrak{I}_{r+1} : \mathbb{R}^r \longrightarrow M_{(r+1)\times 1}(\mathbb{R})$ a la aplicación inyección que a cada vector $(x_1, \ldots, x_d)$ le hace corresponder el vector columna $(1, x_1, \ldots x_d)^T$. Además entendemos para una función $\gamma : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ que la imagen de la composición de una matriz con γ es evaluar cada una de sus entradas por γ. Con esta representación evaluar una red neuronal consistiría en el producto matricial de

$$h(x) = M_{(n+1)\times s} \cdot \mathfrak{I}_{n+1}\left(\gamma\left(M_{n\times(1+d)} \cdot \mathfrak{I}_{d+1}(x)\right)\right).$$

El coste computacional de tal operación es

Operación	Apariciones
$+$	$nd + ns = n(d+s)$
$\times$	$n(d+1) + (n+1)s = n(d+s+2)$
γ	n
$\mathfrak{I}$	2

Tabla 5.1: Coste computacional de la implementación propuesta en [AMMIL12]

Primera optimización reformulando la implementación de una red neuronal

Sin embargo de acorde a nuestro modelo definido en 4.1, nuestra propuesta de representación es al siguiente:

$$(\gamma, A, S, B) \text{ donde } A \in M_{n\times d}(\mathbb{R}), S \in M_{n\times 1}(\mathbb{R}) \text{ y } B \in M_{s\times n}(\mathbb{R}),$$

con esta representación la evaluación sería

$$h(x) = B \cdot \gamma\left(A \cdot x + S\right),$$

que tiene un coste computacional que mostramos en la siguiente tabla:

Operación	Apariciones
$+$	$nd + n(s-1) = n(d+s-1)$
$\times$	$nd + ns = n(d+s)$
γ	n
$\mathfrak{I}$	0

Tabla 5.2: Coste computacional de nuestra implementación de red neuronal de una capa

Que como vemos ha supuesto una mejora de:

Operación	Coste formulación usual 5.1	Coste nuestra propuesta 5.2	Operaciones reducidas
$+$	$n(d+s)$	$n(d+s-1)$	n
$\times$	$n(d+s+2)$	$n(d+s)$	$2n$
γ	n	n	0
$\mathfrak{I}$	2	0	2

Tabla 5.3: Comparativas de coste computacional entre la implementación usual de una red neuronal y la nuestra

Además se ha reducido el espacio de memoria en n unidades del tipo de datos que utilicen las redes neuronales.

Ejemplo de evaluación de una red neuronal

A continuación vamos a dar un ejemplo basado en la red neuronal mostrada en la imagen 5.2, La red neuronal viene dada por las matrices: la matriz de la primera capa asociada es

$$A = \begin{bmatrix} 0.1 & -0.2 \\ -0.3 & -0.1 \end{bmatrix}$$

la matriz de sesgos

$$S = \begin{bmatrix} 0.3 \\ 0.5 \end{bmatrix}$$

La matriz de pesos de la capa oculta sería

$$B = \begin{bmatrix} 0.1 & -0.6 \\ -0.6 & 0.5 \end{bmatrix}.$$

Para la entrada $x = (0.3, 0.1)$ los sucesivos cálculos serían

$$Ax = \begin{bmatrix} 0.1 & -0.2 \\ -0.3 & -0.1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.3 \\ 0.1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.01 \\ -0.1 \end{bmatrix}.$$

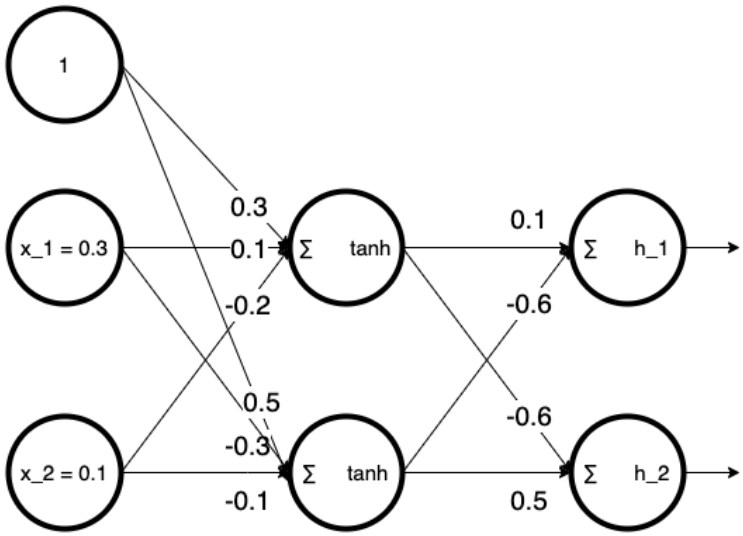


Figura 5.2: Ejemplo de evaluación de una red neuronal de una capa con entrada y salida de tamaño dos y dos neuronas en la capa oculta

$$Ax + S = \begin{bmatrix} 0.01 \\ -0.1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0.3 \\ 0.5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.31 \\ 0.4 \end{bmatrix}.$$

$$\gamma(Ax + S) = \gamma\left(\begin{bmatrix} 0.31 \\ 0.4 \end{bmatrix}\right) = \begin{bmatrix} \gamma(0.31) \\ \gamma(0.4) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.3004 \\ 0.3799 \end{bmatrix}.$$

Finalmente las respectivas salidas de las capas ocultas serían

$$B\gamma(Ax + S) = \begin{bmatrix} 0.1 & -0.6 \\ -0.6 & 0.5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.3004 \\ 0.3799 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.1979 \\ 0.0097 \end{bmatrix}.$$

5.3.1. Implementación de una red neuronal y evaluación

A la hora de abstraer una red neuronal y como conclusión a todo lo explicado una red neuronal no sería más que una estructura que almacenara (A, S, B), esto es

Aclaración de la estructura. Notemos que no se ha introducido la función de activación en la estructura, esto se ha hecho con vista a la implementación. Tal estructura definirá un tipo de dato y serán las funciones que las utilicen o modifiquen las que a conveniencia determinen un tipo de función de activación u otro, de esta manera se tendrá una mayor flexibilidad en la arquitectura y un ahorro en memoria.
Supondría además un nuevo paradigma de trabajo y definición de redes neuronales.

Algoritmo 2: Estructura de una red neuronal

1 **Entrada**:

- d: Dimensión de los datos de entrada.
- s: Dimensión que define una red neuronal.
- n: Número de nodos en la capa oculta.

struct {
  $A \leftarrow$ Matriz n filas d columnas
  $S \leftarrow$ Matriz n filas 1 columnas
  $B \leftarrow$ Matriz s filas n columnas
} *Red neuronal(d,s,n)*

y si quisiéramos evaluar la red neuronal el algoritmo sería el siguiente

Algoritmo 3: Evaluación de una red neuronal, *Forward propagation*

1 **Entrada**:

- x: Vector de atributos que se desea evaluar con la red neuronal.
- $h = (\gamma, A, S, B)$ representa la red neuronal que se desea evaluar y la función de activación γ con la que se va a evaluar.

Function `ForwardPropagation`(h, x)**:**
  sensibilidad $\leftarrow A \cdot x + S$;
  primeraCapa $\leftarrow$ Se crea vector del mismo tamaño que *sensibilidad* ;
  para cada *entrada-Iésima-Neurona* $\in$ *sensibilidad* **hacer**
    primeraCapa$[i] \leftarrow \gamma($ entrada-Iésima-Neurona $)$
  ;
  salida $\leftarrow B \cdot$ *primeraCapa* ;
  devolver *salida* ;

5.4. Aprendizaje

Se entiende por aprendizaje de una red neuronal como el proceso por el cual se determina o actualiza el valor sus parámetros, es decir, lo que en el ejemplo 5.2 consistía en las matrices A, S y B.

A lo largo de esta sección se deducirá un algoritmo de aprendizaje para nuestro modelo de red neuronal; concretamente éste método se basa en el algoritmo de *backpropagation*, esto es, se implementa una basada en descenso de gradiente y programación dinámica.

También se discute en la subsección 5.4.4 porqué no se han utilizado otras alternativas al gradiente descendente.

5.4.1. Método de gradiente descendente y *backpropagation*

De acorde a los capítulos uno y dos del libro [CM07], una vez concretado el problema y sus elementos (véase la sección 2.1.1) es necesario definir un método con el que aproximar la función ideal f, para ello introduciremos el algoritmo de gradiente descendente. Se trata de un método iterativo de minimización de funciones diferenciables.

Consecuencia del requisito de diferenciabilidad de $E(h)$
$E(h)$ será diferenciable si y sólo si las funciones de activación lo son.

En nuestro caso particular se quiere aproximar la función ideal desconocida f a partir de funciones (redes neuronales) $h \in \mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s)$, concretamente se fijará un número n de neuronas en la capa oculta. Dada también una función de error diferenciable y que no presente puntos de inflexión $E : \mathcal{H}_n(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s) \longrightarrow \mathbb{R}$, se toma red neuronal cualquiera $h_0 \in \mathcal{H}_n(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s)$ y fijado $\eta \in \mathbb{R}^+$.

Se define la sucesión

$$h_{t+1} = h_t - \eta \nabla E(h_t). \tag{5.3}$$

Donde h_n es una sucesión cuyos términos convergen a un mínimo local.

Aclaración gradiente red neuronal
Puede a priori uno confundirse con la notación, pero recordemos que las redes neuronales estaban determinadas por sus parámetros (matrices), luego lo único que se está haciendo es derivar con respecto a tales parámetros.

Idea general del algoritmo gradiente descendente
Cada iteración se obtendrá una nueva red neuronal con un error menor dentro de los datos de entrenamiento del conjunto.

Observaciones sobre el algoritmo

- El algoritmo solo encuentra óptimos locales con una dependencia crucial del valor de inicio.
- La convergencia no es segura en un tiempo finito y requiere de criterios de parada.
- Debe de fijarse el número de neuronas en la capa oculta a priori.
- Si la función es convexa el mínimo será global.
- El parámetro η puede ser cualquiera y debe de ser fijado o controlado por el diseñador.

Con el fin de reducir el coste del cálculo del gradiente, se utiliza generalmente el algoritmo conocido como *backpropagation* que fue publicado en 1989 en el artículo [RHW86b]. Las hipótesis bajo las que fue diseñado tal algoritmo fueron: redes neuronales con varias capas y entendiendo por red neuronal un modelo más costoso al nuestro. **Es por ello que a continuación plantearemos una versión propia deducida y optimizada de acorde a nuestro modelo**.

Sea $E_{in} : \mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s) \longrightarrow \mathbb{R}_0^+$ la función para medir error habitualmente usada, la cual tomaremos como el error dentro del conjunto de entrenamiento, esto es, si el conjunto de entrenamiento $\mathcal{D}$ está constituido por N datos de la forma (x_i, y_i) con x_i el vector de entrada o atributos y y_i el estado o valor deseado para cualquier $k \in \{1, \ldots, N\}$. Para cualquier

$h \in \mathcal{H}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s)$ denotando por h_k a su $k-$ésima proyección, se define como métrica de error dentro de $\mathcal{D}$ como

$$E_{in}(h) = \frac{1}{N} \sum_{(x,y)\in\mathcal{D}} \sum_{k=1}^{s} (h_k(x) - y_k)^2.$$

puesto que $\frac{1}{N}$ no es más que una constante de proporcionalidad (y que por tanto no afecta a la minimización) del error y que además puede ser corregida en 5.3 con η, con el fin de ahorrar coste computacional la fijaremos a conveniencia. Es decir, podemos suponer que nuestra función de error a minimizar es

$$E_{in}(h) = \frac{1}{2} \sum_{(x,y)\in\mathcal{D}} \sum_{k=1}^{s} (h_k(x) - y_k)^2.$$

Antes de adentrarnos en los cálculos tengamos presente que hemos definido una red neuronal $h \in \mathcal{H}_n(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s)$ como $h = (h_1, \ldots, h_s)$ con cada proyección $k-$ésima dada por:

$$h_k(x) = \sum_{j=1}^{n} \beta_{jk} \sigma \left(\alpha_{0j} + \sum_{i=1}^{d} \alpha_{ij} x_i \right) \tag{5.4}$$

para la cual hemos impuesto que la función de activación σ sea diferenciable.

Denotaremos como $\chi_{[c]}$ a la función característica:

$$\chi_{[c]} = \begin{cases} 1 & si \quad \text{se satisface c} \\ \\ 0 & si \quad \text{no se satisface c.} \end{cases}$$

Así pues, en base al modelo expuesto en 5.4 a la hora de calcular el gradiente del error con respecto a los parámetros que determinan la red, tendríamos tres tipos de derivadas parciales, las dependientes de β_{jk}, las de α_{0j} y las de α_{ij}, para cada caso concreto y en virtud de la regla de la cadena, se tiene:

- Derivada parcial del error con respecto a β_{vw} donde $v \in \{1, \ldots, n\}$ y $w \in \{1, \ldots, s\}$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E(h)}{\partial \beta_{vw}} =& \frac{\partial}{\partial \beta_{vw}} \left[\frac{1}{2} \sum_{(x,y)\in\mathcal{D}} \sum_{k=1}^{s} (h_k(x) - y_k)^2 \right] \\ =& \frac{1}{2} \sum_{(x,y)\in\mathcal{D}} \sum_{k=1}^{s} 2 (h_k(x) - y_k) \frac{\partial h_k(x)}{\partial \beta_{vw}} \\ =& \sum_{(x,y)\in\mathcal{D}} \sum_{k=1}^{s} (h_k(x) - y_k) \frac{\partial}{\partial \beta_{vw}} \left[\sum_{j=1}^{n} \beta_{jk} \sigma \left(\alpha_{0j} + \sum_{i=1}^{d} \alpha_{ij} x_i \right) \right] \\ =& \sum_{(x,y)\in\mathcal{D}} \sum_{k=1}^{s} (h_k(x) - y_k) \left(\sum_{j=1}^{n} \frac{\partial}{\partial \beta_{vw}} \left[\beta_{jk} \sigma \left(\alpha_{0j} + \sum_{i=1}^{d} \alpha_{ij} x_i \right) \right] \right) \\ =& \sum_{(x,y)\in\mathcal{D}} \sum_{k=1}^{s} (h_k(x) - y_k) \left(\sum_{j=1}^{n} \chi_{[j=v \wedge k=w]} \sigma \left(\alpha_{0j} + \sum_{j=1}^{d} \alpha_{ij} x_i \right) \right) \\ =& \sum_{(x,y)\in\mathcal{D}} (h_w(x) - y_w) \left(\sigma \left(\alpha_{0v} + \sum_{i=1}^{d} \alpha_{iv} x_i \right) \right). \end{aligned} \tag{5.5}$$

- Derivada parcial del error con respecto a α_{0v} donde $v \in \{1, \ldots, n\}$:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E(h)}{\partial \alpha_{0v}} =& \frac{\partial}{\partial \alpha_{0v}} \left[\frac{1}{2} \sum_{(x,y)\in\mathcal{D}} \sum_{k=1}^{s} \left(h_k(x) - y\right)^2 \right] \\
=& \frac{1}{2} \sum_{(x,y)\in\mathcal{D}} \sum_{k=1}^{s} 2 \left(h_k(x) - y_k\right) \frac{\partial h_k(x)}{\partial \alpha_{0v}} \\
=& \sum_{(x,y)\in\mathcal{D}} \sum_{k=1}^{s} \left(h_k(x) - y_k\right) \frac{\partial}{\partial \alpha_{0v}} \left[\sum_{j=1}^{n} \beta_{jk} \sigma \left(\alpha_{0j} + \sum_{i=1}^{d} \alpha_{ij} x_i \right) \right] \\
=& \sum_{(x,y)\in\mathcal{D}} \sum_{k=1}^{s} \left(h_k(x) - y_k\right) \left(\sum_{j=1}^{n} \beta_{jk} \frac{\partial}{\partial \alpha_{0v}} \left[\sigma \left(\alpha_{0j} + \sum_{i=1}^{d} \alpha_{ij} x_i \right) \right] \right) \\
=& \sum_{(x,y)\in\mathcal{D}} \sum_{k=1}^{s} \left(h_k(x) - y_k\right) \left(\sum_{j=1}^{n} \beta_{jk} \sigma' \left(\alpha_{0j} + \sum_{i=1}^{d} \alpha_{ij} x_i \right) \frac{\partial}{\partial \alpha_{0v}} \left[\alpha_{0j} + \sum_{i=1}^{d} \alpha_{ij} x_i \right] \right) \\
=& \sum_{(x,y)\in\mathcal{D}} \sum_{k=1}^{s} \left(h_k(x) - y_k\right) \left(\sum_{j=1}^{n} \beta_{jk} \sigma' \left(\alpha_{0j} + \sum_{i=1}^{d} \alpha_{ij} x_i \right) \chi_{[j=v]} \right) \\
=& \sum_{(x,y)\in\mathcal{D}} \sum_{k=1}^{s} \left(h_k(x) - y_k\right) \left(\beta_{vk} \sigma' \left(\alpha_{0v} + \sum_{i=1}^{d} \alpha_{iv} x_i \right) \right).
\end{aligned} \tag{5.6}$$

- Derivada parcial del error con respecto a α_{uv} donde $u \in \{1, \ldots, d\}$ y $v \in \{1, \ldots, n\}$:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E(h)}{\partial \alpha_{uv}} =& \frac{\partial}{\partial \alpha_{uv}} \left[\frac{1}{2} \sum_{(x,y)\in\mathcal{D}} \sum_{k=1}^{s} \left(h_k(x) - y_k\right)^2 \right] \\
=& \frac{1}{2} \sum_{(x,y)\in\mathcal{D}} \sum_{k=1}^{s} 2 \left(h_k(x) - y_k\right) \frac{\partial h_k(x)}{\partial \alpha_{uv}} \\
=& \sum_{(x,y)\in\mathcal{D}} \sum_{k=1}^{s} \left(h_k(x) - y_k\right) \frac{\partial}{\partial \alpha_{uv}} \left[\sum_{j=1}^{n} \beta_{jk} \sigma \left(\alpha_{0j} + \sum_{i=1}^{d} \alpha_{ij} x_i \right) \right] \\
=& \sum_{(x,y)\in\mathcal{D}} \sum_{k=1}^{s} \left(h_k(x) - y_k\right) \left(\sum_{j=1}^{n} \beta_{jk} \frac{\partial}{\partial \alpha_{uv}} \left[\sigma \left(\alpha_{0j} + \sum_{i=1}^{d} \alpha_{ij} x_i \right) \right] \right) \\
=& \sum_{(x,y)\in\mathcal{D}} \sum_{k=1}^{s} \left(h_k(x) - y_k\right) \left(\sum_{j=1}^{n} \beta_{jk} \sigma' \left(\alpha_{0j} + \sum_{i=1}^{d} \alpha_{ij} x_i \right) \frac{\partial}{\partial \alpha_{uv}} \left[\alpha_{0j} + \sum_{i=1}^{d} \alpha_{ij} x_i \right] \right) \\
=& \sum_{(x,y)\in\mathcal{D}} \sum_{k=1}^{s} \left(h_k(x) - y_k\right) \left(\sum_{j=1}^{n} \beta_{jk} \sigma' \left(\alpha_{0j} + \sum_{i=1}^{d} \alpha_{ij} x_i \right) \chi_{[i=u \wedge j=v]} x_i \right) \\
=& \sum_{(x,y)\in\mathcal{D}} \sum_{k=1}^{s} \left(h_k(x) - y_k\right) \left(\beta_{vk} \sigma' \left(\alpha_{0v} + \sum_{i=1}^{d} \alpha_{iv} x_i \right) x_u \right).
\end{aligned} \tag{5.7}$$

Recapitulando los resultados, el cálculo de las derivadas parciales con $u \in \{1, \ldots, d\}$, $v \in \{1, \ldots, n\}$ y $w \in \{1, \ldots, s\}$ consiste en:

- Por el desarrollo (5.5) la derivada parcial del error con respecto a β_{vw} es:

$$\frac{\partial E(h)}{\partial \beta_{vw}} = \sum_{(x,y)\in\mathcal{D}} (h_w(x) - y_w) \left(\sigma \left(\alpha_{0v} + \sum_{i=1}^{d} \alpha_{iv} x_i \right) \right).$$

- Por el desarrollo (5.6) derivada parcial del error con respecto a α_{0v} es :

$$\frac{\partial E(h)}{\partial \alpha_{0v}} = \sum_{(x,y)\in\mathcal{D}} \sum_{k=1}^{s} (h_k(x) - y_k) \left(\beta_{vk} \sigma' \left(\alpha_{0v} + \sum_{i=1}^{d} \alpha_{iv} x_i \right) \right).$$

- Por el desarrollo (5.7) derivada parcial del error con respecto a α_{uv}:

$$\frac{\partial E(h)}{\partial \alpha_{uv}} = \sum_{(x,y)\in\mathcal{D}} \sum_{k=1}^{s} (h_k(x) - y_k) \left(\beta_{vk} \sigma' \left(\alpha_{0v} + \sum_{i=1}^{d} \alpha_{iv} x_i \right) x_u \right).$$

Si el cálculo se hiciera sin tener más consideración alguna que la propia expresión e incluso obviando el coste de aplicar *forward propagation*, la diferencia y el producto supondría el cómputo que mostramos en la tabla 5.4.

	Número de parámetros	$+/-$	$\times/\div$	σ	σ'
(5.5) $\frac{\partial h(x))}{\partial \beta_{jk}}$	ns	$ns(d+1)$	nsd	ns	o
(5.6) $\frac{\partial h(x)}{\partial \alpha_{0i}}$	n	nd	$n(d+1)$	o	n
(5.7) $\frac{\partial h(x)}{\partial \alpha_{ij}}$	nd	nd^2	$nd(d+2)$	o	nd
forward propagation	$n(s+1+d)$	$n^2(d+s)(s-1+d)$	$n^2(s+1+d)(d+s)$	n	o

Tabla 5.4: Coste computacional de aplicar directamente el algoritmo de gradiente descendente para actualizar $h \in \mathcal{H}_n(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s)$

Abordar el problema de manera directa es muy ineficiente. Basta fijar un par $(x, y) \in \mathcal{D}$ para darse cuenta de que el cálculo de $h(x) - y$ se repite $n(s+1+d)$ veces y que además, como mostramos en la tabla 5.5 hay cálculos que se repiten en (5.5), (5.6) y (5.7).

Expresión repetida en	$\frac{\partial E(h)}{\partial \beta_i}$	$\frac{\partial E(h)}{\partial \alpha_{0i}}$	$\frac{\partial E(h)}{\partial \alpha_{ji}}$	Total apariciones para i	Coste total	Coste en memoria
$\alpha_{0i} \sum_{j=1}^{d} \alpha_{ji} x_j$	1	1	d	$d+2$	$n(d+2)$	n
$\beta_{ik} \sigma' \left(\alpha_{0i} \sum_{j=1}^{d} \alpha_{ji} x_j \right)$	o	1	d	$d+1$	$ns(d+1)$	ns

Tabla 5.5: Veces que se calcula una misma expresión para el cálculo de gradiente descendente fijado un i y coste en memoria en unidades si se almacenara el cálculo de todos esos parámetros.

Notemos además que las expresiones del tipo $\alpha_{0j} + \sum_{i=1}^{d} \alpha_{ij} x_i$ son las que denotábamos como *sensibilidades* en el algoritmo de *forward propagation* 3.

5.4.2. Motivación para almacenar cálculos parciales

A la vista de las repeticiones de cálculos, su coste computacional, ofrece un gran beneficio almacenar $h_k(x) - y_k$, ya que el coste de cálculo aumenta de manera lineal conforme aumenta el número de neuronas mientras que se mantiene constante el costo en memoria.

Para el resto de expresiones podría no estar tan claro su beneficio, ya que estamos en una situación en la que el coste en memoria y de cálculo aumentan de manera lineal con respecto al número de neuronas.

Sin embargo, para un cálculo directo sin almacenar operaciones intermedias, sería necesario reservar en memoria espacio para $n(s+1+d)$ parámetros, ya que no se debería de sobreescribir los parámetros antiguos con los nuevos ya que afectaría al cálculo.

Por otra parte, hemos observado que el coste en memoria de ir almacenando los resultados parciales 5.5 y el propio coste en memoria de nuestro algoritmo 5 supondrían un espacio de $n(d+2s+3)+1$. Así pues se acaba de probar que un algoritmo directo es peor en coste de cálculo y ligeramente mejor en memoria frente a otro que almacene los resultados parciales.

Por lo que los algoritmos que proponemos a continuación se basarán en almacenar estos resultados.

5.4.3. Algoritmos de actualización de pesos de una neurona

Nuestro objetivo es aplicar el algoritmo de gradiente descendente, codificaremos una red neuronal $h \in \mathcal{H}_n(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s)$ de estructura (A, S, B), como dos matrices de parámetros α y β y de respectivos tamaños $d \times (n+1)$ y $s \times n$:

$$
\begin{aligned}
A &= (\alpha_{ij}) \text{ con } i \in \{1, \dots d\},\ j \in \{1, \dots n\}. \\
S &= (\alpha_{0j}) \text{ con } j \in \{1, \dots, n\}. \\
B &= (\beta_{jk}) \text{ con } j \in \{1, \dots n\},\ k \in \{1, \dots s\}.
\end{aligned}
$$

De esta manera h modificará el valor de sus pesos de acorde al algoritmo de gradiente descendente 5.3 que viene dado por

Algoritmo 4: Algoritmo gradiente descendente conocidas las derivadas parciales.

1 **Input**:h red neuronal y conjunto de entrenamiento
2 **Output:** h actualizada de acorde al algoritmo de gradiente descendente.

1: Debe de calcularse previamente $\nabla E(h)$, es decir cada una de las derivadas parciales, esto se hará en el algoritmo 5.
2: Actualización de los pesos de A
para $j \in \{1, \dots n\}$ **hacer**
para $i \in \{1, \dots d\}$ **hacer**

$$\alpha_{ij} \leftarrow \alpha_{ij} - \eta \frac{\partial E(h)}{\partial \alpha_{ij}}$$

3: Actualización de los pesos de S
para $j \in \{1, \dots n\}$ **hacer**

$$\alpha_{0j} \leftarrow \alpha_{0j} - \eta \frac{\partial E(h)}{\partial \alpha_{0j}}$$

4: Actualización de los pesos de B
para $k \in \{1, \dots s\}$ **hacer**
para $j \in \{1, \dots n\}$ **hacer**

$$\beta_{jk} \leftarrow \beta_{jk} - \eta \frac{\partial E(h)}{\partial \beta_{jk}}$$

Notemos la necesidad de una variable $\eta \in \mathbb{R}$ que es prefijada. En la terminología de aprendizaje automático se suele referir a ester término como tasa de aprendizaje o *learning rate*. Una amplia literatura sobre cómo debe seleccionarse y variantes adaptativas del mismo, se puede encontrar en [AMMIL12]. El algoritmo como hemos visto se divide en

1. Ejecución del algoritmo de gradiente descendente.

2. Actualización de los pesos.

La complejidad por tanto será el máximo de esos dos procesos; puesto que el segundo son tres grandes asignaciones de costo nd, n, ns respectivamente, la complejidad recae principalmente en el coste de calcular los gradientes, la cual calculamos en la sección 2. En resumen su complejidad es

$$\begin{aligned} &\mathcal{O}(\max\{nd, n, ns, \text{coste cálculo de los gradientes}\}) = \\ &= \mathcal{O}(\text{coste cálculo de los gradientes}) = \\ &= \mathcal{O}(|\mathcal{D}|nds). \end{aligned}$$

Procederemos ahora a determinar el cálculo del gradiente, como hemos visto, éste viene determinado por la expresión.

El algoritmo que se muestra a continuación supone que la memoria no es un problema así que se plantea para que no haya ningún cálculo repetido.

Algoritmo 5: Algoritmo cálculo del gradiente $\nabla E(h)$.

Input:$h \in \mathcal{H}_n(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s)$ red neuronal que representaremos como en 5.4.3 y $\mathcal{D}$ conjunto de entrenamiento, con pares (x, y).

Output: Gradiente del error, esto es $\nabla E(h)$ que se almacena en las siguientes variables:

- parcialα_{ij} hace referencia a $\frac{\partial E(h)}{\partial \alpha_{ij}}$.
- parcialβ_{ij} hace referencia a $\frac{\partial E(h)}{\partial \beta_{ij}}$.

Inicializamos respectivamente las variable que contendrán a las derivadas parciales

- parcial$\alpha_{ij} \leftarrow$ matriz de reales de tamaño $n + 1 \times d$ con entradas a cero.
- parcial$\beta_{ij} \leftarrow$ matriz de reales de tamaño $s \times n$ con entradas a cero.

para *cada para* $(x, y) \in \mathcal{D}$ **hacer**
Calculamos *forward propagation* **para** *cada* $i \in \{1, \dots n\}$ **hacer**
Cálculo de las sensibilidades vector δ donde su componente $i-$ésima viene dada por
$\delta_i \leftarrow \alpha_{0i} + \sum_{j=1}^{d} \alpha_{ji} x_j$.
Cálculo de la salida de los nodos, vector s donde cada componente es
$s_i \leftarrow \sigma(\delta_i)$.
Almacenamos las derivadas
$\text{ds}_i \leftarrow \sigma'(\delta_i)$.
para *cada* $k \in \{1, \dots s\}$ **hacer**
derivada$\beta_{ik} \leftarrow \beta_{ik} \text{ds}_i$
$h_x \leftarrow Bs$ (se multiplica la matriz de coeficientes de la red neuronal por la salida previamente calculada)
diferencia $\leftarrow h_x - y$
Cálculo de gradiente de $\frac{\partial E(h)}{\partial \beta_{uv}}$
para $u \in \{1, \dots n\}$ **hacer**
para $v \in \{1, \dots s\}$ **hacer**
parcial$\beta_{uv} \leftarrow$ parcial$\beta_{uv} +$ diferencia$_v s_u$.
Cálculo del tipo $\frac{\partial E(h)}{\partial \alpha_{uv}}$
para $v \in \{1, \dots n\}$ **hacer**
para $k \in \{1, \dots s\}$ **hacer**
auxiliarDiferenciaPorDerivada $\leftarrow$ diferencia$_k$ derivadaβ_{vk}.
parcial$\alpha_{0v} \leftarrow$ parcial$\alpha_{0v} +$ auxiliarDiferenciaPorDerivada.
para $u \in \{1, \dots d\}$ **hacer**
parcial$\alpha_{uv} \leftarrow$ parcial$\alpha_{uv} +$ auxiliarDiferenciaPorDerivada x_u.

Análisis de la complejidad

Notemos que la complejidad computacional del algoritmo 5 es:

- **Coste de cálculo**: Entendiendo suma, productos y evaluaciones como constante de

valor 1 el resultado es:

$$\begin{aligned}\text{coste} &= |\mathcal{D}|\,(n(1+1+1+s)+1+1+ns+ns(1+1+d))\\ &= |\mathcal{D}|(n(3+s)+3ns+nsd)\\ &= |\mathcal{D}|(4ns+dns+3n)\\ &\leq |\mathcal{D}|3\max\{4,d\}ns.\end{aligned}$$

La complejidad del algoritmo resulta por tanto $\mathcal{O}(|\mathcal{D}|nds)$. De aquí se deduce, puesto que s, d son constantes fijas que a nivel práctico serán mucho menor que el número de neuronas n y el número de datos de entrenamiento $|\mathcal{D}|$, que lo que afecta primordialmente al coste es $|\mathcal{D}|$ y n.

Si queremos converger con cierta precisión, el teorema de aproximación no nos permite reducir n. Sin embargo, si suponemos que $\mathcal{D}$ presenta datos independientes e idénticamente distribuidos tomar un subconjunto aleatorio mantendría un buen estimador del error actual y por ende del aprendizaje.

La clave entonces reside en qué tamaño de subconjunto tomar, en artículos como [PKK+19] se ofrece una posible estimación basada en reducir el número de épocas, es decir ejecuciones del algoritmo de gradiente descendiente.

- **Coste en memoria**: El coste total de memoria, entendiendo por una unidad aquella que almacene un parámetro concreto de la red neuronal será:

$$\begin{aligned}\text{Coste en memoria} =& nd+n(s+1) && \textit{parciales}\\ &+n(1+1+s) && \textit{cálculo de } \delta, s, ds \text{ y derivada} \beta\\ &+1 && \textit{variable auxiliar}\\ &=n(d+2s+3)+1.\end{aligned}$$

5.4.4. Otras alternativas al algoritmo de gradiente descendente

Recordemos que nuestro enfoque partía de fundamentar toda decisión de diseño de manera rigurosa. Destaquemos por tanto que en el algoritmo de gradiente descendente se introduce la restricción de que las funciones de activación deben de ser diferenciables.

Esto, a priori, no es de extrañar, ya que si buscamos optimizar algún aspecto, en algún momento deberemos de particularizar o reenfocar algunos de los componentes del problema, sin embargo ¿exigir tales restricciones está sustentado teóricamente?

Desde un punto de vista analítico la forma por excelencia de minimizar radica en la derivación. Pudiéndose relajar el concepto de derivada a derivada débil o incluso trabajar en el ambiente de teoría de distribuciones, donde *casi todo* se puede derivar [Lig58]. La clave sería poder implementar los cálculos y obtener buenos resultados experimentales.

La cuestión reside entonces si existen otras alternativas al algoritmo de gradiente descendente que podrían reducir el costo computacional del proceso de aprendizaje.

Para ello se ha consultado el estado del arte actual encontrando publicaciones como:

5.4.4.1. *Gradients without Backpropagations*

A principios de este mismo año, se publicó el artículo *Gradients without Backpropagations* [BPS+22], en él se introduce el algoritmo al que acuñan como *forward propagation* y al que

posicionan los propios autores como una alternativa *más eficiente en coste* que el algoritmo de *Backpropagation*.

Por desgracia, en este artículo no se da una demostración formal que verdaderamente explique el beneficio computacional, sino que se basan en meras experimentaciones.

Sin embargo, tiene su interés y es por ello que lo mencionamos, en que indica que existe margen de mejora imponiendo como restricción el que las funciones de activación sean diferenciables. Esta tendencia se puede ver también en artículos como [WY10].

6 Democratización de las funciones de activación

A lo largo de este capítulo se esclarecerá la idea que se planteó en 4.2 de si hay alguna función de activación mejor que otra. Para ello se han aportado dos nuevos resultados originales: el teorema 6.1 y el corolario 6.1. Gracias a ellos se puede establecer cuándo dos espacios de redes neuronales con funciones de activación distintas pueden aproximar con la misma precisión una función. Cabe mencionar que estos resultados son además independientes del modelo de red neuronal seleccionado gracias a los resultados teóricos descubiertos en 5.2.1 y 5.2.2.

El teorema 6.1 y el corolario 6.1 tienen su importancia ya que si sabemos que dos funciones de activación producen los mismos resultados, conociendo su coste computacional podremos seleccionar el que sea menor y de esta manera optimizar el tiempo de cálculo y disminuir el número de operaciones sin perder precisión en los resultados.

Es por ello que tras establecer las clases de funciones que producen resultados similares, en la sección 6.2.2 se ha formulado un test para determinar las funciones de menor costo.

6.1. Caracterización de las funciones de activación

Por conveniencia teórica definimos las funciones de activación en 4.2 como una función de $\phi : \mathbb{R} \longrightarrow [0, 1]$, no decreciente, con uno como límite en infinito y cero como límite a menos infinito; nos basaremos en el concepto *actual* de función de activación: basta con que sea una función no polinómica (véanse los artículos [SM15], [ADIP20] y [Fun89]).

Funciones no polinómicas hay infinitas y reincidimos en que a priori no hay una mejor que otra; por tanto, como criterio de selección nos guiaremos por la intuición que nos brinda la demostración del teorema 4.4. La imagen de una función de activación es relevante a la hora de aproximar la función ideal desconocida, ya que reduce el número de neuronas si se usa convenientemente. Por lo tanto, una buena heurística sería disponer de un repertorio básico de funciones de activación que contemplen distintas imágenes no polinómicas.

Además de las propuestas en 4.2, añadimos a nuestra colección las que mostramos en la tabla 6.1. El criterio de selección ha sido contar con funciones de activación de formas diversas y que además sean las utilizadas de acorde (motivados por 4.3)

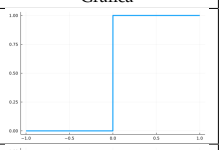
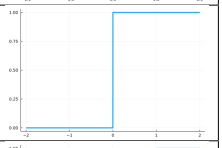
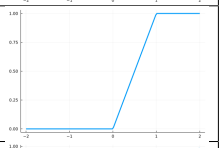
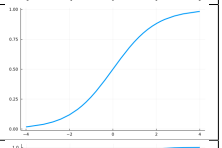
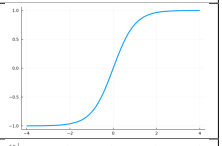
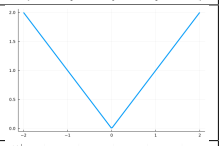
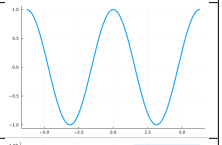
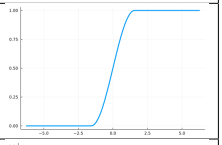
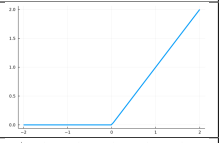
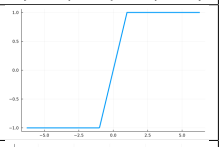
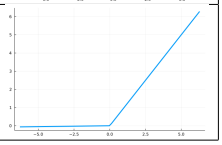
Nombre	Expresión	Rango imagen	Gráfica
Indicadora $\lambda \in \mathbb{R}$	$Indicadora_\lambda(x) = 1_{\{x>\lambda\}}$	$\{0,1\}$	
Función umbral p polinomio	$Umbral(x) = 1_{\{p(x)>0\}}$	$\{0,1\}$	
Función rampa	$Rampa(x) = x1_{\{0<x<1\}} + 1_{\{x\geq 1\}}$	$[0,1]$	
Sigmoidea	$\sigma(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$	$(0,1)$	
Tangente hiperbólica	tanh	$(-1,1)$	
Valor absoluto	$abs(x) = \lvert x \rvert$	$[0,+\infty]$	
Coseno	cos	$[-1,1]$	
Cosine Squasher	$CosineSquasher(x) = \left(1+\cos\left(x+3\frac{\pi}{2}\right)\frac{1}{2}\right)1_{\{\frac{-\pi}{2}\leq x\leq\frac{\pi}{2}\}} + 1_{\{\frac{\pi}{2}<\lambda\}}.$	$[0,1]$	
ReLU	$ReLU(x) = \max(0,x)$	$[0,+\infty)$	
Hard Hyperbolic Function	$Hardtanh(x) = \begin{cases} -1 & si \quad x \leq -1 \\ x & si \quad -1 < x < 1 \\ 1 & si \quad x \geq 1 \end{cases}$	$[-1,1]$	
Leaky ReLU	$LReLU_\alpha(x) = \begin{cases} \alpha x & si \quad x \leq 0 \\ x & si \quad x > 0 \end{cases}$ con $\alpha \in \mathbb{R}^+$valor *pequeño*.	$[0,+\infty)$	

Tabla 6.1: Compendio de funciones de activación

Aportación original

Teorema 6.1. *Sea $\phi \in \mathcal{A}(\mathbb{R}^2)$ una función afín cuya forma matricial asociada es de la forma:*

$$\phi((x,y)) = \begin{bmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} t_x & t_y \end{bmatrix}$$

con $a, b \in \mathbb{R}^*$ y $t_x, t_y \in \mathbb{R}$.

Sean dos funciones de activación σ, γ tales que

$$\phi(Grafo(\sigma)) = Grafo(\gamma),$$

entonces el espacio de redes neuronales de n neuronas creado a partir de la función de activación σ es igual al espacio de redes neuronales creado a partir la función de activación γ.

Demostración. Sea $\mathcal{H}^+_{\sigma,n}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s)$ el espacio de redes neuronales con n neuronas con sesgo.

Está claro que $\mathcal{H}^+_{\gamma,n}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s)$ y $\mathcal{H}^+_{\sigma,n}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s)$ son biyectivos.

Ya que basta con tomar una red neuronal de una y cambiarle la función de activación por la de la otra. Veamos que se da la igualdad viendo que una está contenida en la otra.

Para cualquier $h \in \mathcal{H}^+_{\sigma,n}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s)$ la proyección i-ésima de h será de la forma

$$h_i(x) = \sum_{j=1}^{n} (\beta_j \sigma(A_j(x)) + k_j),$$

con $x \in \mathbb{R}^d, \beta_j, k_j \in \mathbb{R}, A_j \in \mathcal{A}(\mathbb{R}^d)$. Procedemos a definir $\tilde{h}_i(x)$ como sigue

$$\tilde{h}_i(x) = \sum_{j=1}^{n} (\beta_j (b\sigma(aA_j(x) + t_x) + t_y) + k_j) = \sum_{j=1}^{n} (\tilde{\beta}_j \sigma(\tilde{A}_j(x)) + \tilde{k}_j), \tag{6.1}$$

con $x \in \mathbb{R}^d, \tilde{\beta}_j, \tilde{k}_j \in \mathbb{R}, \tilde{A}_j \in \mathcal{A}(\mathbb{R}^d)$, por lo que está claro que $\tilde{h}(x) \in \mathcal{H}^+_{\sigma,n}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s)$.

Observemos que la hipótesis del enunciado establece que

$$\begin{aligned} Grafo(\gamma) &= \{(x, \gamma(x)) : x \in \mathbb{R}\} \\ &= Grafo(\gamma) = \phi(Grafo(\sigma)) \\ &= \phi(\{(x, \sigma(x)) : x \in \mathbb{R}\}) \\ &= \{(ax + t_x, b\sigma(x) + t_y) : x \in \mathbb{R}\}. \end{aligned}$$

Por lo que $\tilde{h}$ así definida (6.1) es a su vez

$$\tilde{h}_i(x) = \sum_{j=1}^{n} (\beta_j \gamma A_j(x) + k_j)$$

Qué hace la función ϕ

Tal función significa aplicar traslaciones, simetrías, reescalados o composiciones de estos movimientos a la imagen de la función afín.

Utilidad práctica del teorema

Gracias a este resultado sabremos cuándo dos funciones de activación producirán exactamente los mismos resultados. Por lo tanto podremos seleccionar la más oportuna, por ejemplo la que tenga menos coste.

es decir que $\tilde{h}(x) \in \mathcal{H}^+_{\gamma,n}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s)$. Así que vía ϕ se ha definido una inyección de $\mathcal{H}^+_{\sigma,n}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s)$ a $\mathcal{H}^+_{\gamma,n}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s)$, esto es

$$\mathcal{H}^+_{\sigma,n}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s) \subseteq \mathcal{H}^+_{\gamma,n}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s).$$

Además, ϕ con las hipótesis exigidas es invertible, con inversa:

$$\phi^{-1}((x,y)) = \begin{bmatrix} \frac{1}{a} & 0 \\ 0 & \frac{1}{b} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -\frac{t_x}{a} & -\frac{t_y}{b} \end{bmatrix}.$$

Así que razonando de igual manera que en el apartado anterior se tiene la inclusión

$$\mathcal{H}^+_{\sigma,n}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s) \supseteq \mathcal{H}^+_{\gamma,n}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s),$$

por lo que podemos concluir que

$$\mathcal{H}^+_{\gamma,n}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s) = \mathcal{H}^+_{\sigma,n}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s).$$

Como demostramos en 5.2.1 se tiene que

$$\mathcal{H}^+_{\sigma,n}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s) = \mathcal{H}^+_{\gamma,n}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s) \subset \mathcal{H}_{\gamma,n+1}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s) \subset \mathcal{H}^+_{\gamma,n+1}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s) = \mathcal{H}^+_{\sigma,n+1}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s).$$

Por lo que para un n arbitrariamente grande, se acaba de probar lo buscado.

$$\mathcal{H}_\gamma(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s) = \mathcal{H}_\sigma(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s).$$

□

Relevancia práctica del teorema

Este teorema lo que nos está diciendo es que si dos funciones de activación tienen *la misma forma* (independientemente de su grafo) entonces **aproximarán igual de bien**, es decir, con el mismo error dentro de un conjunto de datos. Esto a nivel práctico significa que **si se tienen dos funciones de activación *con la misma forma* (*o muy parecida*) elige la que tenga menor costo computacional**, porque a nivel teórico aproximarán igual de bien y de esta manera ahorraremos recursos.

Notemos además que la demostración nos enseña que la igualdad se da independientemente del número de neuronas fijado, es decir que no es un resultado asintótico (lo asintótico en términos prácticos significa que sea resultado de una serie de aproximaciones).

Relevancia corolario 6.1 Simplifica las comparativas entre funciones de activación sin necesidad de conocer su imagen.

Corolario 6.1. *Sea $\phi \in \mathcal{A}(\mathbb{R})$ una transformación afín e invertible, esto es de la forma*

$$\phi(x) = ax + b \text{ con } a \in \mathbb{R}^*, b \in \mathbb{R}.$$

Dadas dos funciones de activación σ y γ que satisfagan que

$$\phi \circ \sigma = \gamma,$$

entonces el espacio de redes neuronales de n neuronas creado con la función de activación σ es igual al espacio de redes neuronales creado con la función de activación γ.

Demostración. En base a que $\phi(x) = ax + b$, con $a \in \mathbb{R}^*, b \in \mathbb{R}$ basta con definir $\psi \in \mathcal{A}(\mathbb{R}^2)$ como

$$\psi((x,y)) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & b \end{bmatrix}.$$

A partir definición se tiene que

$$\begin{aligned} Grafo(\gamma) &= \{(x, \gamma(x)) \colon x \in \mathbb{R}\} \\ &= \{(x, \phi(\sigma(x))) \colon x \in \mathbb{R}\} \\ &= \psi(\{(x, \sigma(x)) \colon x \in \mathbb{R}\}) = \psi(Grafo(\sigma)). \end{aligned}$$

Se satisfacen las hipótesis del teorema 6.1 y en virtud de él se tiene el resultado buscado. □

6.2. Selección de las mejores funciones de activación

Así pues, a la vista de la imágenes de las distintas funciones de activación recogidas en la tabla 6.1, y por el recién probado teorema 6.1, podemos determinar a priori que de manera teórica existen conjuntos de funciones que aproximadamente pueden producir los mismos resultados.

A la vista de del resultado, si las funciones de activación son similares entonces actuarán con una precisión similar, es por ello que el la table 6.2 establecemos las siguientes clases de funciones de activación

Grupo escalera	*Grupo sigmoide*	*Grupo ReLU*
Indicadora Umbral	Rampa Sigmoidea *Cosine Squasher* tanh *Hard Hyperbolic Function*	ReLU LReLU

Tabla 6.2: Agrupaciones de funciones de activación con forma similar

Compararemos entonces su coste computacional y tomaremos como representante de la clase aquel que sea de menor coste.

6.2.1. Implementación de las funciones de activación en la biblioteca de redes neuronales

Las funciones de activación han sido implementadas con cuidado de que sean eficientes y valiéndose de las características propias de Julia, para ello se han utilizado técnicas como:

- **Programación modular**: Tal y como se recomienda en la documentación de Julia [1] se ha utilizado un módulo en la implementación de la biblioteca, esto aporta los siguientes beneficios:
  - Los módulos pueden ser precompilados y de esta manera se aceleraría la carga y el tiempo de inicialización.

[1] Consultada en la página web oficial de Julia a día 23 de mayo del 2022 con URL: https://docs.julialang.org/en/v1/manual/modules/

Significado indirección
La indirección es una técnica de programación que consiste en hacer una referencia indirecta a los datos usando direcciones en memoria. Esto conlleva el almacenamiento en memoria no solo de los datos, si no de las direcciones (que no dejan de ser un dato más).

Significado *overhead*
Hace referencia a el coste computacional adicional que conllevan resolver las indirecciones en este caso.

  - Encapsulamiento de los métodos y facilidades de uso del espacio de nombres, lo cual forma parte de una buena metodología de programación.

- **Macros**[2]: que permiten sustituciones de código cuando éste es analizado por el compilador; de esta manera, funciones que devuelven otras funciones dependientes de un parámetro se verán beneficiadas, ya que hace que se ejecute código más rápido evitando indirecciones [3] y el overhead correspondiente. Puede encontrar la implementación de esto en la biblioteca de redes neuronales implementada en nuestro repositorio [4].

- Funtores o como son llamados en Julia *Function-like objects*. Junto con las macros son una forma eficiente definir funciones de funciones y valores por defecto.

Además la implementación de la biblioteca se ha hecho de acorde al **principio de sustitución de Liskov** (publicado en el artículo [LW94]) que dice así:

« Sea $\phi(x)$ una propiedad comprobable acerca de los objetos x de tipo T. Entonces $\phi(y)$ debe ser verdad para los objetos y del tipo S, donde S es un subtipo de T. »

Esto significa que todas deben de comportarse como una función de activación abstracta y poder intercambiarse entre ellas. Lo que en un principio suena obvio, ha supuesto un diseño cuidadoso y un uso de las herramientas que brinda Julia en toda su plenitud, puesto que tengamos en cuenta que la variabilidad a la hora de definir y caracterizar a una función de activación, ya que algunas no dependen de ningún parámetro mientras que otras lo hacen incluso de otras funciones (ver definiciones en la tabla 6.1).

Tipos estáticos y dinámicos
El tipo de dato **estático** se define en memoria antes de la ejecución del código (durante la compilación del código), no pudiendo cambiar durante la ejecución del programa.
Un tipo de dato **dinámico** puede cambiar y el tipo es determinado mediante la ejecución.
Por lo general las ventajas del estático son mayor eficiencia y prevención de errores, por el contrario, tipos dinámicos permiten más flexibilidad a la hora de diseñar y escribir el código.

Tipo de dato nominal
Dos tipos de datos diferentes serán equivalentes o compatibles, si y solo si se ha hecho de manera explícita. Por ejemplo si definiéramos un tipo de datos de número real y otro de número racional, solo podríamos sumarlos si le explicáramos al ordenador cómo hacerlo.

Tipos de datos paramétricos Hace referencia al polimorfismo paramétrico, esto es que una misma función se puede programar para que actúe en consecuencia al tipo de datos que recibe como argumento.

Interés de controlar el dominio de una función
Lo cual permitiría optimizar la evaluación de la función; ya que si la función tuviera comportamientos diferentes en función del rango, habría que estudiarlos con condiciones interiores que aumentan el costo computacional.

Sobre el sistema de tipos de Julia

Julia posee un sistema de tipos muy rico [5] dinámico, nominal y paramétrico; pero que ofrece la posibilidad de obtener beneficio de los tipos estáticos. Podría entonces uno plantearse sacar provecho de esto en la declaración del dominio e imagen de una función de activación y prevención de errores.

Ante esta situación hemos determinado que el tipo más conveniente a usar en nuestras implementaciones es el racional no sólo por por la observación que comentábamos en la nota marginal del teorema 4.9 ; ya que como procedemos a explicar un tipo más restrictivo plantea los siguientes problemas:

- Los datos se conocen en tiempo real, luego no es posible discriminar su tipo en tiempo de compilación. La única hipótesis que tenemos de los mismos es que son racionales.

- En caso de determinar su tipo en tiempo real estaríamos trasladando la condición de rango que queríamos evitar a otro lugar de la implementación, por lo tanto seguiría existiendo tal coste.

[2] La información consultada de macros ha sido de la página oficial de Julia, a día 23 de mayo del 2022, URL: https://docs.julialang.org/en/v1/manual/metaprogramming

[3] La fuente bibliográfica ha sido la Wikipedia, a día 26 de mayo del 2022. También recomendamos especialmente la entrada en inglés de la misma: *Indirection* consultada también el día 26 de mayo del 2022.

[4] Esto es en https://github.com/BlancaCC/TFG-Estudio-de-las-redes-neuronales/tree/main/OptimizedNeuralNetwork.jl/src/activation_functions.jl

[5] Véase la documentación oficial de Julia sobre *Types*: https://docs.julialang.org/en/v1/manual/types/. Esta URL fue consultada el 26 de mayo de 2022.

- En nuestra implementación concreta solo beneficiaría a la función de activación *HardTanh* y su implementación no sería satisfactoria porque no habría forma de implementar eficientemente el rango. Ejemplificamos lo que se quiere decir en el código que mostramos a continuación:
  - Entre las líneas 1 y 9 puede verse cómo definir un tipo de dato dominio en Julia.
  - Entre las líneas 11-13 y las 16-18 cómo se declaran funciones en dominios concretos.
  - La línea 14 daría error, la hemos dejado para mostrar que no es posible una declaración de rangos que cumpla el principio de sustitución de Liskov y adapte eficientemente los rangos indicados.

```
1   struct IntervaloCentral{T<:Real} <: Real
2   x::T
3   function IntervaloCentral{T}(x::T) where T<:Real
4       if(-1 > x || x > 1)
5           error("No está en intervalo")
6       end
7       new(x)
8   end
9   end
10
11   function HardTanh(x::IntervaloCentral)
12      x.x
13  end
14  HardTanh(x::Real)=HardTanh(convert(::IntervaloCentral,x))
15
16   function HardTanh(x::Real)::Int
17      sign(x)
18  end
```

Sobre la implementación definitiva y ejemplo de uso

Puede encontrar la implementación definitiva de las funciones de activación en el directorio y fichero `OptimizedNeuralNetwork.jl/src/activation_function.jl` de nuestro repositorio. Además en directorio y fichero `Memoria/capitulos/Ejemplo-uso-biblioteca.ipynb` encontrará un *Jupyter notebook* de Julia con ejemplos de cómo llamar y utilizar las funciones de activación.

6.2.2. Coste computacional funciones activación

6.2.2.1. Diseño del experimento

El experimento para comparar los resultados ha consistido en: Se ha evaluado cada función a comparar 20.000.000 veces y se ha medido cuanto tarda. Esto se ha repetido 15 veces. Puede encontrar la implementación concreta y los resultados concretos de cada iteración en el repositorio del proyecto [6]. Además, puesto que las funciones más simples que se pueden construir son la identidad y la constante, las hemos añadido para poder comparar el costo.

[6] En el directorio de experimentos de `https://github.com/BlancaCC/TFG-Estudio-de-las-redes-neuronales`.

6.2.2.2. Test de hipótesis

Compararemos si los resultados son significativos utilizando la **prueba de los rangos con signo de Wilcoxon** (véase [DD22], [McD14], o la web de cienciadedatos.net [7]).

La motivación de realizar esta prueba es la siguiente:

- Las muestras son independientes.
- Los datos tomados permiten ser ordenados.
- El tamaño de muestra es pequeño y no podemos asegurar normalidad de la datos.

Hipótesis

- H_0: La mediana de las diferencias de cada par de datos es 0.
- H_a: La mediana de las diferencias entre cada par de datos es diferente de cero.

La utilidad de este test es que si rechaza la hipótesis nula sabremos que con un 95 % de certeza tendrán medianas diferentes, es decir, **existe una diferencia de tiempos**. En caso de que no se rechace no podremos afirmar nada. Puede encontrar la implementación en el repositorio del proyecto [8].

Los resultados del test de Wilcoxon han sido los siguientes:

	cte 1	Identidad	Umbral de $2x$	CosineSquasher	Indicadora de 0
cte 1	-	**No rechaza** H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0
Identidad	**No rechaza** H_0	-	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0
Umbral de $2x$	Rechaza H_0	Rechaza H_0	-	Rechaza H_0	**No rechaza** H_0
CosineSquasher	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0	-	Rechaza H_0
Indicadora de 0	Rechaza H_0	Rechaza H_0	**No rechaza** H_0	Rechaza H_0	-
Rampa	Rechaza H_0	Rechaza H_0	**No rechaza** H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0
ReLU	Rechaza H_0	Rechaza H_0	**No rechaza** H_0	Rechaza H_0	**No rechaza** H_0
Sigmoidea	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0
Tangente hiperbólica	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0
Valor absoluto	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0
Coseno	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0
Hardtanh	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0
LReLU	Rechaza H_0	Rechaza H_0	**No rechaza** H_0	Rechaza H_0	**No rechaza** H_0

Tabla 6.3: Resultados 1 de 3: Rechazos con un 95 % de confianza en el test Wilcoxon.

[7] Prueba de los rangos con signo de Wilcoxon by Joaquín Amat Rodrigo, available under a Attribution 4.0 International (CC BY 4.0) at https://www.cienciadedatos.net/documentos/18_prueba_de_los_rangos_con_signo_de_wilcoxon Con fecha de visita el 22 de mayo del 2022.

[8] En el directorio de experimentos de https://github.com/BlancaCC/TFG-Estudio-de-las-redes-neuronales.

	Rampa	ReLU	Sigmoidea	Tangente hiperbólica
cte 1	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0
Identidad	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0
Umbral de $2x$	**No rechaza** H_0	**No rechaza** H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0
CosineSquasher	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0
Indicadora de 0	Rechaza H_0	**No rechaza** H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0
Rampa	-	**No rechaza** H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0
ReLU	**No rechaza** H_0	-	Rechaza H_0	Rechaza H_0
Sigmoidea	Rechaza H_0	Rechaza H_0	-	Rechaza H_0
Tangente hiperbólica	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0	-
Valor absoluto	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0
Coseno	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0
Hardtanh	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0
LReLU	**No rechaza** H_0	**No rechaza** H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0

Tabla 6.4: Resultados 2 de 3: Rechazos con un 95 % de confianza en el test Wilcoxon.

	Valor absoluto	Coseno	Hardtanh	LReLU
cte 1	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0
Identidad	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0
Umbral de $2x$	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0	**No rechaza** H_0
CosineSquasher	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0
Indicadora de 0	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0	**No rechaza** H_0
Rampa	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0	**No rechaza** H_0
ReLU	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0	**No rechaza** H_0
Sigmoidea	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0
Tangente hiperbólica	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0	Rechaza H_0
Valor absoluto	-	Rechaza H_0	Rechaza H_0	**No rechaza** H_0
Coseno	Rechaza H_0	-	Rechaza H_0	Rechaza H_0
Hardtanh	Rechaza H_0	Rechaza H_0	-	Rechaza H_0
LReLU	Rechaza H_0	**No rechaza** H_0	Rechaza H_0	-

Tabla 6.5: Resultados 3 de 3: Rechazos con un 95 % de confianza en el test Wilcoxon.

Como ya comentábamos, si la hipótesis nula es rechazada podemos suponer que hay una diferencia de tiempo significativa; en caso contrario no podemos saber nada.

Sin embargo, podemos entender estos rechazos como una clase de equivalencia; es decir, la diferencia en coste computacional no es tan significativa, dentro de ese grupo. De hecho, como podemos apreciar en la tabla 6.6, que está ordenada de menor tiempo a mayor, estos se encuentran en posiciones consecutivas y en los mismos rango de tiempos de la respectiva gráfica de caja y bigote figura 6.1.

Función	Mediana	Media tiempo
cte 1 (para comparar)	1475,959	1473,478 ± 26,332
Identidad (para comparar)	1479,817	1467,311 ± 27,021
Hardtanh	1495,105	1491,046 ± 21,334
CosineSquasher	1522,128	1521,117 ± 19,223
ReLU	1546,379	1552,049 ± 21,435
Indicadora de 0	1554,432	1556,114 ± 21,814
Rampa	1557,449	1552,169 ± 25,043
Umbral de $2x$	1562,809	1556,669 ± 23,029
LReLU	1564,124	1561,367 ± 21,722
Valor absoluto	1583,266	1580,545 ± 23,464
Sigmoid	1608,797	1601,079 ± 21,938
Coseno	1630,392	1629,634 ± 26,113
Tangente hiperbólica	1664,006	1653,295 ± 23,025

Tabla 6.6: Tiempo de ejecución en segundos

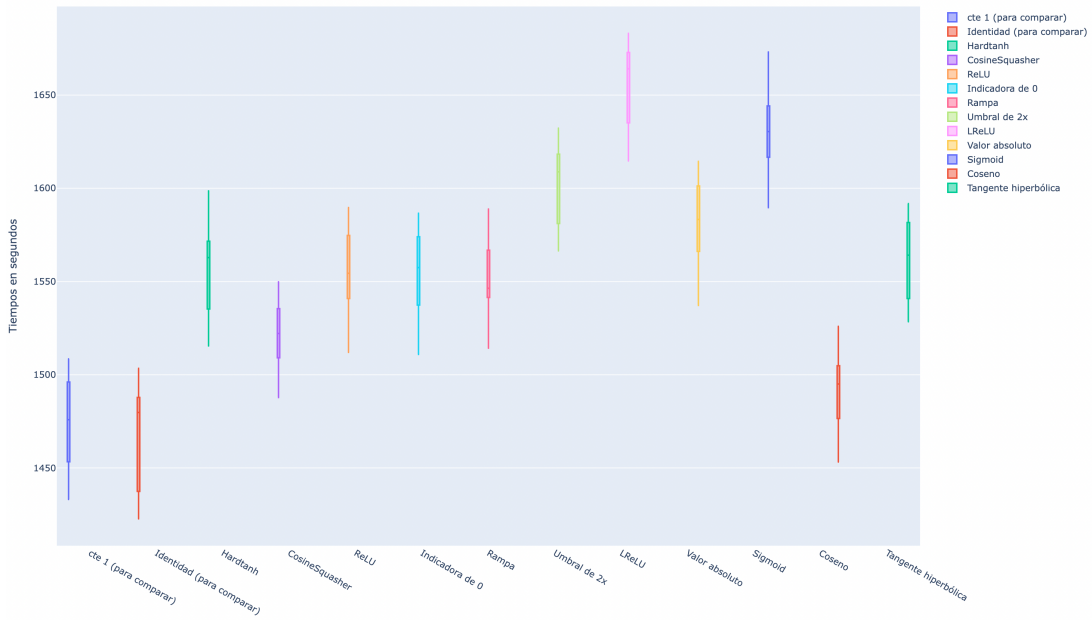


Figura 6.1: Gráfico de cajas y bigotes con los tiempo de las respectivas funciones

Si volvemos a nuestro objetivo, que era encontrar el representante de menor costo entre las agrupaciones dispuestas en la tabla 6.2. Concluimos que los mejores candidatos son:

- Para el *grupo escalera*: No se ha rechazado la hipótesis nula, luego a priori no hay deferencia significativa y podemos seleccionar el candidato que queramos.

- Para el *grupo sigmoide*: La mejor opción ha sido *Hard Hyperbolic Function* y después en orden de mejor a peor: *Cosine Squasher*, rampa, sigmoidea y tangente hiperbólica.
- Pare el *grupo ReLU*: No se ha rechazado la hipótesis nula, así que no podemos decir nada.

7 Mejora en la inicialización de los pesos de una red neuronal

Como observábamos en la sección 5.4.1, el gradiente descendente pretende en cada iteración mejorar la solución encontrada, pero es totalmente sensible a la posición inicial de los pesos. Presentamos por tanto una propuesta para inicializar una red neuronal con el objetivo de que sus pesos se encuentren ya cerca de la solución. Destaquemos que este algoritmo no solo servirá exclusivamente para el método de gradiente descendente sino para cualquier otro dependiente del punto inicial.

Contenido y objetivo del capítulo

- Establecimiento del estado del arte en 7.1.
- Descripción del algoritmo y demostración de su corrección 7.2.
  - Determinación de su complejidad algorítmica.
  - Selección de parámetros y generalización.
- Descripción de la implementación.
- Beneficios obtenidos.

7.1. Estado del arte relacionado

Se ha comprobado en la práctica que el uso de *backbones* reporta mejoras sustanciales en el entrenamiento de redes neuronales, véanse artículos como [LCL+21], [GCZ+19] y sus referencias.

Cuando se carece de *backbones* o no es posible utilizarlos, una buena técnica para dar un valor inicial a los pesos consiste en basarse en metaheurísticas tales como algoritmos genéticos, ver [Mono2], sin embargo, éstos tienen un coste computacional importante.

Ante esta situación, nuestro algoritmo propone una inicialización de bajo coste computacional y que no necesita de más valores que los del conjunto de entrenamiento.

Qué es un *backbone*
Se denomina *backbone* a los nodos de una red neuronal que han sido **inicializados con valores de otras redes neuronales ya entrenadas**. Por ejemplo si quisiéramos clasificar insectos y partiéramos de una red neuronal que se entrenó para clasificar frutas.

7.2. Descripción del método propuesto

Aportación original

La idea proviene de la demostración casi constructiva del teorema 4.8.

Se desea inicializar los pesos de $h \in \mathcal{H}_n(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^s)$, para la cual, una vez fijado el número n de neuronas de nuestra red neuronal, será necesario determinar un subconjunto $\Lambda \subset \mathcal{D}$ de datos de entrenamiento.

La bondad del resultado depende en gran medida de Λ, puesto que a priori se carece de hipótesis, se seleccionará de manera aleatoria bajo el supuesto de una distribución independiente e idénticamente distribuida de los datos.

Como apunta la demostración, debe encontrarse un $p \in \mathbb{R}^d$ satisfaciendo que

$$p \cdot (x_i - x_j) \neq 0$$

para cualesquiera atributos x_i, x_j distintos de Λ.

Es decir que se estaría considerando un vector que no pertenezca a una unión finita de hiperplanos ortogonales de $\mathbb{R}^r$. De manera teórica la probabilidad de seleccionar un p y que pertenezca al espacio ortogonal es 0, sin embargo esto no quiere decir que no pueda pasar.

Tomaremos por tanto un p aleatorio y a partir de él seleccionaremos Λ lo suficientemente grande para que al menos n vectores admitan de manera estricta la ordenación:

$$p \cdot x_1 < p \cdot x_2 < \cdots < p \cdot x_n. \tag{7.1}$$

Para continuar, para la función de activación seleccionada γ, por cómo se definen existirá un $M \in \mathbb{R}^+$ tal que

$$\gamma(K) = 1 \text{ y } \gamma(-K) = 0 \text{ sean constantes para todo } K \geq M. \tag{7.2}$$

Una vez concretados los valores p, Λ y M que satisfagan las condiciones (7.1) y (7.2) falta concretar los valores iniciales de la red neuronal.

Para ello debemos calcular el valor de las matrices (A, S, B) que definen a una red neuronal y que presentamos en la sección 5.3.1.

Recordemos que A y S tienen tantas filas como neuronas y B tantas columnas como neuronas.

Usado la notación vectorial $p_{[i,j]} = (p_i, p_{i+1}, \ldots, p_j)$ donde $(p_0, p_1, \ldots, p_d) = p$, comenzaremos definiendo el valor de la primera fila como

$$\begin{aligned} S_1 &= 0, \\ A_{1*} &= 0_{[1,d]}, \\ B_{*1} &= y_1. \end{aligned}$$

Los valores de la fila k-ésima de las matrices (A, S), vendrán determinados por la única función afín $A \in \mathcal{A}(\mathbb{R}^d)$, dada por $A_k(x) = B_k(p \cdot x)$, con B_k como la única función afín de $\mathbb{R}$ en $\mathbb{R}$ que cumple que

$$B_k(p \cdot x_{k-1}) = -M \quad \text{y} \quad B_k(p \cdot x_k) = M.$$

Esto equivale a calcular las constantes reales $\tilde{\alpha}$.

Si tenemos presente que

$$\tilde{\alpha}_{kp}(p \cdot x_{k-1}) + \tilde{\alpha}_{ks} = -M \quad \text{y} \quad \tilde{\alpha}_{kp}(p \cdot x_k) + \tilde{\alpha}_{ks} = M.$$

Resolviendo el sistema resulta que

$$\begin{cases} \tilde{\alpha}_{kp} = \frac{2M}{p\cdot(x_k - x_{k-1})} \\ \tilde{\alpha}_{ks} = M - \tilde{\alpha}_{kp}(p \cdot x_k) = M - \frac{2M}{p\cdot(x_k - x_{k-1})}(p \cdot x_k) \end{cases}$$

Luego los coeficientes de la red neuronal A, S se deducirían de

$$\begin{cases} \alpha_{k0} = \tilde{\alpha}_{ks} = M - \frac{2M}{p\cdot(x_k - x_{k-1})}(p \cdot x_k) \\ \alpha_{ki} = \tilde{\alpha}_{kp} p_i = \frac{2M}{p\cdot(x_k - x_{k-1})} p_i \end{cases}$$

Esto define un sistema lineal compatible cuya solución son las respectivas filas y columnas:

$$\begin{cases} S_k = M - \frac{2M}{p\cdot(x_k - x_{k-1})}(p \cdot x_k) \\ A_{ki} = \frac{2M}{p\cdot(x_k - x_{k-1})} p_i \\ B_{*k} = y_k - y_{k-1} \end{cases}$$

Con todo esto el proceso algorítmico resultante es:

Algoritmo 6: Inicialización de pesos de una red neuronal

Input: Tamaño red neuronal n, conjunto de datos de entrenamiento $\mathcal{D}$, constate M involucrada en 7.2.

Input: Red neuronal, representada con las matrices (A, S, B).

1: *Inicializamos p.*
$p \leftarrow$ vector de $\mathbb{R}^{d+1}$. {Como heurística será generado con distribución uniforme en $[0,1]^{d+1}$}

2: *Selección de los datos de inicialización $\Lambda \subset \mathcal{D}$.*

$$\Lambda \leftarrow \{\emptyset\}$$

mientras *tamaño de* $\Lambda < n$ **hacer**
Tomamos de manera aleatoria (x, y) de $\mathcal{D}$.
si *para todo* $(a, b) \in \Lambda$ *se satisface que* $p \cdot (x - a) \neq 0$ **entonces**

$$\Lambda \leftarrow \Lambda \cup \{(x, y)\}.$$

{Λ está ordenado conforme a la propiedad 7.1 }

3: *Cálculo de los parámetros base de la red neuronal.*
Para el primer $(x_1, y_1) \in \Lambda$

$$\begin{aligned} S_1 &= Mp_0, \\ A_{1*} &= Mp_{[1,d]}, \\ B_{*1} &= y_1. \end{aligned}$$

$\Lambda \leftarrow \Lambda \setminus \{(x_1, y_1)\}$

4: *Cálculo del resto de neuronas.* **para** *cada* $(x_k, y_k) \in \Lambda$ **hacer**

$$\begin{aligned} S_k &= M - \frac{2M}{p \cdot (x_k - x_{k-1})}(p \cdot x_k), \\ A_{ki} &= \frac{2M}{p \cdot (x_k - x_{k-1})} p_i \quad i \in \{1, \dots d\}, \\ B_{*k} &= y_k - y_{k-1}. \end{aligned}$$

5: **return** (A, S, B).

7.2.1. Coste computacional algoritmo de inicialización de pesos

El algoritmo se divide en tres pasos bien identificados:

1. Inicialización del vector aleatorio.
2. Selección de los datos iniciales.
3. Cálculo de los parámetros de la red neuronal.

Notemos que la complejidad del primero es constante y la del tercero lineal.

Para conocer la complejidad del paso segundo debemos de apreciar que el algoritmo tiene un componente aleatorio introducido en la selección del p; y que en el peor (y con probabilidad nula) de los casos podría suponer $|\mathcal{D}|$ iteraciones en el bucle interior al paso 2.

Sin embargo, en virtud de las observaciones hechas en la descripción del método, la peor situación tiene probabilidad nula de ocurrir; es decir, la mayoría de los datos del conjunto de entrenamiento tomados para inicializar la red neuronal cumplirán la propiedad de ortogonalidad y por tanto una buena heurística es suponer que el paso 2 del algoritmo repetirá su bucle n veces. De esta manera el algoritmo de inicialización de pesos propuesto tendía la misma complejidad que el coste de tener los datos ordenados. Si se utilizan sistemas como insertar de manera ordenada los datos, por ejemplo en un *set*, el coste de cada inserción sería de $log(n)$; esto haría que el orden total del algoritmo sea:

$$\mathcal{O}(nlog(n)).$$

Cabe destacar que este coste es bastante menor al de realizar *backpropagation* y que además éste debería de realizarse repetidamente pare mejorar el error considerablemente, mientras que el nuestro se realiza tan solo una vez.

7.2.2. Observaciones

Observemos que nuestro algoritmo, para un mismo conjunto de entrenamiento es capaz de producir infinitas soluciones diferentes ya que existen dos variables libres M y p.

La constante M depende de la función de activación seleccionada y recordemos que debe escogerse para que satisfaga la condición 7.2.

Presentamos a continuación en la tabla 7.1 el valor M para algunas funciones de activación.

Función de activación	Valor mínimo de M
Función rampa	1
Cosine Squasher	$\frac{\pi}{2}$
Función indicadora 0	0

Tabla 7.1: Valor mínimo del parámetro M en algoritmo de inicialización de redes neuronales según la función de activación seleccionada.

7.2.3. Generalización del método para funciones de activación

A priori si la función de activación no cumple las propiedades demandadas no podría ser utilizada en el algoritmo. Sin embargo, es posible ver que se puede generalizar para otras funciones de activación menos restrictivas como las definidas en 6.1.

- Por el teorema 6.1 también será valido para **funciones de activación cuyas imágenes sean afines a una que satisface 7.2**. El proceso constructivo consistiría en: (1) hacer que la red aprenda con la función que cumple los requisitos 7.2. (2) Los pesos obtenidos transformarlos con la misma técnica que se aplica en la demostración del teorema 6.1.
- **Funciones de activación asintóticas a 0 o 1**, esto es funciones que satisfacen que:
  1. $\lim_{x\to\infty} \psi(x) = 1$.
  2. $\lim_{x\to-\infty} \psi(x) = 0$.

3. Que cumpla que $\psi(x) \neq 1$ para todo $x \in \mathbb{R}$ o $\psi(x) \neq 0$ para todo $x \in \mathbb{R}$.

Bastará con tomar un M lo suficientemente grande.

- Para funciones del tipo anterior, pero asintóticas a $a, b \in \mathbb{R}$, con alguno de los extremos a, b distintos de 0 y 1, bastará con realizar una transformación afín de f cumpliendo que $f(a) = 0$ y $f(b) = 1$ y aplicar el teorema 6.1.

De esta manera se pueden ampliar las funciones de activación válidas, añadiendo algunas como:

Función de activación	**Valor mínimo de M**
Función rampa	1
Cosine Squasher	$\frac{\pi}{2}$
Función indicadora o	o
Función de activación	Valor mínimo de M
Sigmoidea	con $M = 10$ el error será menor que 10^{-5}
Tangente hiperbólica	con $M = 7$ el error será menor que 10^{-5}
Hardtanh	1

Tabla 7.2: Valor mínimo del parámetro M en algoritmo de inicialización de redes neuronales según la función de activación seleccionada (con más resultados).

7.3. Implementación

Los requisitos mínimos necesarios para una implementación adecuada son los siguientes

- Implementación de red neuronal y tipos de constructores.
- Implementación del algoritmo.

7.3.1. Implementación de redes neuronales

El modelo a implementar es el presentado en el algoritmo 2. En virtud del *composite type* de Julia [o] la forma más simple y eficiente de declarar una red neuronal es como un nuevo tipo de dato: *red neuronal* cuyos atributos sean las matrices que definen el modelo.

En vista a la optimización en evaluación y entrenamiento más eficiente las matrices A y S se han escrito en una sola permitiendo así una evaluación más compacta. Puede encontrar la implementación en nuestro repositorio.

7.3.1.1. Diseño de test

Para las redes neuronales generadas de manera aleatoria se debe de satisfacer que:

- Las dimensiones de salida son las requeridas.
- Las matrices no deben de tener todas sus entradas idénticas, ya que ese caso tiene probabilidad nula de ocurrir.

[o] Véase la documentación oficial

Para las redes neuronales generadas a partir de ciertas matrices:

- Que exista comprobación de tipos en la entrada.
- Que se cerciore de la coherencia de las matrices.
- La estructura se almacena correctamente.

7.3.1.2. Ejemplo de uso

Como ya comentamos puede encontrar un ejemplo completo de uso en el directorio y fichero `Memoria/capitulos/Ejemplo-uso-biblioteca.ipynb` de nuestro repositorio; sin embargo, para mejorar la comprensión de la sección vamos a mostrar algunos ejemplo breves aquí.

Para construir una **red neuronal inicializada aleatoriamente** a partir de nuestra biblioteca podría usarse el siguiente código:

```
# Dimensiones requeridas
entry_dimension = 2
number_of_hidden_units = 3
output_dimension = 2
# Creación de la red neuronal
RandomWeightsNN(
    entry_dimension,
    number_of_hidden_units,
    output_dimension
)
```

Que tendrá como resultado la siguiente salida red neuronal de coeficientes aleatorios:

```
La matrix de pesos de las neuronas, W1, es:
3×3 Matrix{Float64}:
0.705454   0.305242  0.46417
0.0991484  0.720979  0.231972
0.46869    0.683745  0.981889

La matrix de pesos de la salida, W2, es:
2×3 Matrix{Float64}:
0.651893  0.227729  0.0385169
0.937148  0.596889  0.0810362
```

Veamos ahora la **creación de una red neuronal a partir de matrices**

```
S = [1,2,3] # Matriz de sesgos
A = [3 4 1; 4 6 3; 1 1 1] # Matriz de pesos entre entrada y capa oculta
B = [1 2 3; 3 2 3] # Matriz de pesos entre capa oculta y salida
FromMatrixNN(S, A, B)
```

Que tendrá como salida:

```
La matrix de pesos de las neuronas, W1, es:
3×4 Matrix{Int64}:
3  4  1  1
4  6  3  2
1  1  1  3

La matrix de pesos de la salida, W2, es:
2×3 Matrix{Int64}:
1  2  3
3  2  3
```

7.3.2. Implementación del algoritmo de *Forward propagation*

La evaluación de una red neuronal se realizará por medio de una función que recibe como parámetros un tipo de dato *red neuronal*. Puede encontrar la implementación en nuestro repositorio.

7.3.2.1. Diseño de los tests

De acorde al modelo 4.1 tomando como función de activación la identidad (aunque no sería una función de activación como tal) se podrían construir fácilmente redes neuronales que:

- Sean la función identidad.
- Actúen como una traslación.
- Actúen como un escalado.

Sabiendo esto es fácil predecir para cierta entrada cual debiera de ser su salida con el algoritmo de *forward propagation*, esto nos va a permitir comprobar la correcta evaluación para:

- Redes neuronales con matrices A y B diagonales.
- Redes neuronales con S no nulo.
- Combinaciones de tipos anteriores.

Faltaría comprobar el caso en que A y B no fueran diagonales, a sabiendas de que para los casos anteriores su funcionamiento es correcto, basta con comprobarlo con un ejemplo aleatorio.

Como la evaluación es correcta falta por cerciorarse de que se comporta como es debido con las funciones de activación definidas.

7.3.2.2. Ejemplo de uso

```
# Variables auxiliares
# S,A,B son las matrices del ejemplo anterior
v = [1,2,2]
h = FromMatrixNN(S, A, B)
# Ejemplo de evaluación h(v)
# con función de activación ReLU y ForwardPropagation
ForwardPropagation(h, ReLU,v )
```

El resultado de las líneas anteriores sería:

```
2-element Vector{Int64}:
86
114
```

7.3.3. Implementación del algoritmo de inicialización aprendida de pesos

Se ha realizado la implementación de acorde al algoritmo descrito en 6. Para un desarrollo optimizado se han tenido en cuenta tres factores esenciales:

- Adaptación de los tipos de datos y *dispatch methods* de Julia en función de las dimensiones de entrada y salida del conjunto de datos de entrenamiento.
- Estructuras de datos propias de Julia.
- Tipo de datos de variables auxiliares.

7.3.3.1. Uso de los tipos de datos y *dispatch methods*

Las entradas y salidas de dimensión uno son codificadas como vectores en lugar de matrices, es por ello que vamos a hacer uso de la variedad de tipos que ofrece Julia y de sus *dispatch methods* que ya comentamos en la sección 6.2.1 con profundidad.

Gracias a esta manera de implementar polimorfismo en Julia, tendremos una sola función que recoja a nuestro algoritmo de inicialización aprendida de pesos y diversas implementaciones adaptadas a la dimensión de entrada y salida.

Puede consultar la implementación en la carpeta *weight-initializer-algorithm* de nuestra biblioteca. Cabe mencionar que el caso de entrada y salida de dimensión uno ha sido el que más reducción de costo ha permitido, ya que en vez de realizar el diseño directo recogido en 6 puede uno consultar el caso primero de la demostración 4.8 y darse cuenta de que la

existencia del vector p es una argucia para conseguir un orden en los vectores de entrada. Como $\mathbb{R}$ ya es un cuerpo ordenado, se puede prescindir tanto de p como de toda la estructura de datos que ello conlleva. Esta cuestión guarda relación con el apartado siguiente.

7.3.3.2. Selección de la estructuras de datos adecuada

Como ya observamos en la sección 7.2.1 el coste computacional recae principalmente en conseguir una ordenación del conjunto denominado como Λ en el pseudo código 6.

La forma más eficiente de proceder en estos casos es con una estructura de datos pertinente. En lenguajes como C++ una solución eficaz sería introducir los datos en un *set*, que por estar construidos sobre un *red-black tree* [1] tienen como efecto la ordenación eficiente de los mismos.

Por desgracia, en Julia esto no es posible sin hacer uso de bibliotecas externas o una implementación propia; ya que el tipo conjunto está construido sobre diccionarios (ver la línea 40 de la implementación del tipo *set* de Julia que puede encontrar en sus fuentes en GitHub)[2].

Para resolver el problema hemos optado por usar el tipo de dato de Julia *Array* [3] ya que tiene los siguientes beneficios:

- Permite declarar directamente la dimensión requerida (que es conocida de antemano por tratarse del número de neuronas); esto ahorraría en evitar tener que estar redimensionando en cada inserción.
- Permite introducir el tipo de dato que contendrá. En la propia documentación de Julia [4] se nos indica que evitar el uso de tipo abstractos mejora la eficiencia.
- Mantiene el mismo coste computacional. Concretamente para ordenar Julia dispone de dos algoritmos: *Quick Sort* y *Merge Sort*[5] .

  Nosotros hemos optado por usar *Quick Sort* [Hoa62] porque a pesar de tener ambos algoritmos la misma complejidad media $\mathcal{O}(n\log(n))$, la constante oculta de *Quick Sort* es menor con *arrays* y además no necesita de memoria adicional, (*Merge Sort* [Knu98] tiene complejidad $\mathcal{O}(n)$ en memoria) (véase el artículo comparativo [ALK+18]).

Estructura de datos *red-black tree* Se trata de un árbol binario de búsqueda equilibrado, esto es un grafo no cíclico que partiendo de uno concreto denominado raíz la *altura* (número máximo de nodos hasta llegar a un extremo partiendo de la raíz) es mínima.
Esta estructura es muy interesante ya que no solo guarda los datos ordenados si no que su coste de búsqueda es $\mathcal{O}(n\log(n))$, pero su inserción y consulta de media términos de análisis de amortización tiene complejidad constante. En el peor de los casos sería $\mathcal{O}(n\log(n))$.

Contribución a Julia Sería interesante explorar si se podría contribuir a Julia a partir de esta implementación, ya que a priori el uso de un diccionario solo aporta simpleza en la implementación, CONTRIBUTING.

7.3.3.3. Tipo de datos de variables auxiliares

Se ha seleccionado cuidadosamente el tipo de las variables auxiliares.

- Tipo de dato de p: Se ha seleccionado como un vector aleatorio de *Float32*, mientras que el resto de operaciones vectoriales son de *Float64*, el motivo de esto es que p se operará como *Float64* con una precisión mayor al no tener tantas cifras decimales.
- Para otras variables auxiliares que sabemos que van a ser pequeñas se han especificado tipos como *Int8*.

[1] Puede consultar la implementación del tipo de dato *set* de la STL en https://github.com/gcc-mirror/gcc/blob/master/libstdc%2B%2B-v3/include/bits/stl_set.h (fuente consultada por última vez el 8 de junio de 2022).
[2] Las fuentes se encuentran concretamente en https://github.com/JuliaLang/julia/blob/master/base/set.jl y han sido consultadas por última vez el 8 de junio de 2022.
[3] Véase su documentación oficial https://docs.julialang.org/en/v1/base/arrays/ Consultada por última vez el 8 de junio de 2022.
[4] Consultar https://docs.julialang.org/en/v1/manual/performance-tips/. Fue visitada por última vez el 8 de Junio de 2022.
[5] Consúltese https://docs.julialang.org/en/v1/base/sort/

7.3.4. Diseño de los tests

Deberá comprobarse que las dimensiones de salida de la red neuronal son las adecuadas con respecto a la entrada y salida de los datos.

De acorde a la propiedad del teorema 6.1 todos los datos con los que se construya la red neuronal al evaluarse deben de tener la misma imagen.

7.3.5. Ejemplo de uso

Para crear la red neuronal bastará con llamar a la función

```
nn_from_data(X_train, Y_train, n, M)
```

con n el número de neuronas y M una constante elegida según los criterios ya mencionados en 7.1 y 7.2.

Veamos un ejemplo de ejecución:

```
# Declaramos las variables que vamos a seguir
# Función ideal que queremos aproximar
f_regression(x)=(x<1) ? exp(-x)-4 : log(x)
data_set_size = 5
n = data_set_size # Número de neuronas
                  # coincide con el tamaño del conjunto
#Partición homogénea del dominio [-3,3]
K_range = 3
X_train= Vector(LinRange(-K_range, K_range, n))
Y_train = map(f_regression, X_train) # Imágenes de la partición

M = 1
# USO DE LA FUNCIÓN DE INICIALIZACIÓN DE LOS PESOS
h = nn_from_data(X_train, Y_train, n, M)
```

```
# Imprimimos la red neuronal
display(Text("La red neuronal obtenida es :"))
println(h)

# Vamos a ver cómo aproxima los resultados
# Función que dado un punto lo evalúa con ForwardPropagation
# y la función de activación Rampa
evaluate(x)=ForwardPropagation(h,
        RampFunction,x)

# Mostramos gráfica comparativa
entre el resultado y la función ideal

plot(x->evaluate([x])[1],
     -K_range,K_range,
     label="red neuronal n=$n")
plot!(f_regression,
    label="f ideal",
    title="Comparativa función ideal y red neuronal n=$n")
```

El resultado ha sido el siguientes

```
La red neuronal obtenida es :
La matrix de pesos de las neuronas, W1, es:
5×2 Matrix{Float64}:
 0.0       1.0
 1.33333   3.0
 1.33333   1.0
 1.33333  -1.0
 1.33333  -3.0

La matrix de pesos de la salida, W2, es:
1×5 Matrix{Float64}:
 16.0855  -15.6038  -3.48169  3.40547  0.693147
```

Además de la imagen 7.1

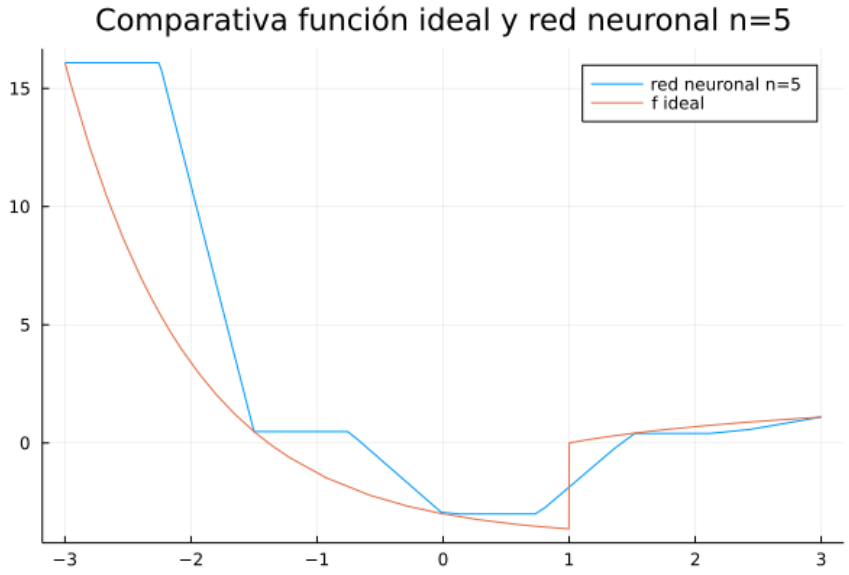


Figura 7.1: Ejemplo de ejecución del algoritmo de inicialización aprendida de pesos

En la siguiente sección trataremos sobre la bondad del algoritmo expuesto

7.4. Contraste de hipótesis con inicialización aleatoria

Las preguntas a resolver son ¿mejora nuestro algoritmo? ¿Cuánto mejora?

La primera observación es que como hemos observado en el modelado de una red neuronal en la sección 5.3 una red neuronal depende de varios parámetros: la dimensión de entrada d, el número de neuronas en la capa oculta n, la dimensión de salida s y la funciones de activación de cada neurona.

Por simplicidad fijaremos una función de activación.

7.4.1. Descripción experimento

El experimento consta de los siguientes pasos:

1. Dado un conjunto de datos de entrenamiento $\mathcal{D}$ se separará el conjunto en:
   - $\mathcal{D}_i$ **Conjunto de datos de entrenamiento e inicialización.** Debe de ser mayor que n y lo suficientemente grande para que el algoritmo diseñado funcione correctamente.
   - $\mathcal{D}_t$ **Conjunto de datos de test.** Se utilizarán para el cálculo del error.

   En particular hemos utilizado el conjunto de datos Airfoil Self-Noise obtenido del repositorio de datos libres para aprendizaje automático UCI. El conjunto elegido se corresponde a un problema de regresión con 1503 instancias y 6 atributos. Para la implementación realizada podría utilizarse cualquier otra que provenga de un problema de regresión.

Notemos que d viene determinado por el número de atributos, s será uno ya que estamos frente a un problema de regresión de variable real y n vendrá dado como $n = \lfloor \alpha |\mathcal{D}_i| \rfloor$ con $\alpha \in (0,1)$; concretamente, en virtud de la observaciones mostradas en la sección 7 de que la probabilidad de que un dato no pueda ser utilizado para el algoritmo es nula; suponer que el 90 % de los datos sí serán válidos es una estimación lo suficientemente precavida como para que el algoritmo no *falle*, es decir haremos $\alpha = 0.9$.

2. Fijados n, d y s se generarán dos redes neuronales:
   - Una inicializada de manera aleatoria con valores dentro de un rango de valores.
   - Otra inicializada con nuestro algoritmo, se medirá el t_i tiempo y el error ε_i en $\mathcal{D}_t$.
3. Con los datos de entrenamiento D_i y el algoritmo de aprendizaje de *backpropagation* se entrenará la red neuronal inicializada aleatoriamente hasta que iguale o sea menor que el error del algoritmo de inicialización aprendida ε_i.

   Puesto que puede darse el caso de quedar estancados en un mínimo local superior al error encontrado con el algoritmo de inicialización aprendida ε_i o que oscile entorno a un mínimo si el η no es lo suficientemente pequeño (ver propiedades del gradiente descendente 5.4.1); se ha añadido también como criterio de parada el que el error del algoritmo de *backpropagation* se estanque o empeore durante 5 [6] iteraciones consecutivas.

   Durante el experimento se medirá el tiempo que necesita hasta su fin t_b y el error en entrenamiento y test.

   Los tiempos t_i y t_b serán los que compararemos con el test de hipótesis.

Los pasos 2 y 3 se repetirán tantas veces como muestras se desee tomar.

7.4.2. Contraste de hipótesis

Se desea comparar si las diferencias en los tiempos observados efectivamente son notables:
Para ello se realizará un test de Wilcoxon, con las siguientes hipótesis

- H_0: La mediana de la diferencia de tiempos t_i y t_b de cada par de muestras es cero.
- H_a: La mediana de las diferencia de tiempos t_i y t_b entre cada par de muestras es diferente de cero.

La utilidad de este test es que si rechaza la hipótesis nula sabremos que con un 95 % de certeza tendrán medianas diferentes, es decir, **existe una diferencia en los errores**. En caso de que no se rechace no podremos afirmar nada. Puede encontrar la implementación en el repositorio del proyecto [7].

7.4.3. Requisitos técnicos

A la vista de todo el proceso descrito surgen las siguientes necesidades técnicas que deberemos de implementar:

[6] El valor de 5 iteraciones consecutivas es una heurística observada en ejecuciones anteriores y dependiente de η y del problema. Pude observar la traza de de ejecución si ejecuta el experimento.
[7] En el directorio de experimentos de https://github.com/BlancaCC/TFG-Estudio-de-las-redes-neuronales.

7.4.3.1. Lectura y tratamiento de los datos

Se necesita ser capaces de leer los datos desde los ficheros descargados, es decir, ser capaces de transformar el formato *.dat* en un *.csv*. Además, es necesario un tratamiento previo de los datos:

- Comprobación de que no hay valores nulos o perdidos.
- Normalización de los datos.

7.4.3.2. Capacidad de crear una red neuronal aleatoria

Deberá de crearse una red neuronal con entradas dentro de un rango $[a, b]$ con $a < b$ reales, que tenga una entrada de tamaño d, n neuronas en la capa oculta y una dimensión de salida d.

7.4.3.3. Implementación del algoritmo de inicialización aprendida

Deberá implementarse el algoritmo 6 con todos los requisitos y atributos que ahí se describe.

7.4.3.4. Función para medir el error

Deberá implementarse una función para medir el error, puesto que nos hayamos frente a un problema de regresión utilizaremos el error cuadrático medio.

7.4.3.5. Forma de evaluar las redes neuronales

Dados una red neuronal, una función de evaluación y un vector de atributos de dimensiones adecuadas a la red neuronal debe ser capaz de aplicar el algoritmo de *forward propagation* descrito en 3.

7.4.3.6. Implementación del aprendizaje de una red neuronal

Se implementará el algoritmo propio de aprendizaje basado en *backpropagation* y ya optimizado que describimos en los algoritmos 4 y 5. Cabe destacar que para este algoritmo es necesario usar la derivada de las funciones de las funciones de activación. Se ha implementado la derivada débil de ellas. Además se ha seguido el mismo criterio de diseño que ya se tuvo con las funciones de activación en la sección 6.2.1.

Qué es una derivada débil. Es una generalización de las derivadas para funciones del espacio L_p, esto nos permite definir derivadas aunque no lo sea en algunos puntos (recodemos que demostremos el teorema de aproximación universal para estos espacios en la sección 4.5).

7.4.3.7. Implementación del experimento

Deberá implementarse una función que realice el experimento tal cual hemos descrito en 7.4.

7.4.4. Resultados obtenidos

Concretamente de el experimentos se ha realizado con una partición del conjunto de datos $\frac{3}{4}|\mathcal{D}|$ para entrenamiento entrenamiento y el resto de test. Se ha repetido además 15 veces (por tratarse de un número conveniente de muestras para el Test de los signos de Wilcoxon como vimos en la sección 6.2.2.2 donde se usó por primera vez).

Durante cada iteración los datos del conjunto han sido desordenados y el tiempo medido ha sido estrictamente el de creación y aprendizaje de la red neuronal.

Puede consultar los resultados obtenidos en la carpeta de experimentos de air self noise de nuestro repositorio, es más para obtener una información detallada del mismo ejecute los experimentos y observe la información que van mostrando.

De donde se tiene que para nuestro algoritmo de inicialización aprendida el tiempo medio de ejecución es de

$$0,044 \pm 0,064 \text{ segundos},$$

mientras que para la inicialización aleatoria y aprendizaje con el método de *backpropagation* es de

$$5,284 \pm 0,407 \text{ segundos}.$$

Además el test de los signos de Wilcoxon ha rechazado la hipótesis nula con un 95 % de confianza, por lo que podemos afirmar que efectivamente la diferencia de tiempos es significativa.

El gráfico de caja bigote con los tiempos es el siguiente:

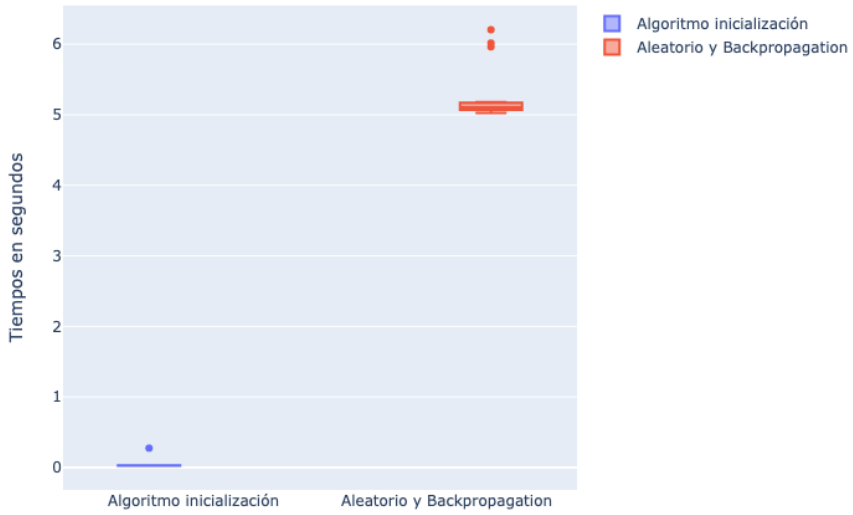


Figura 7.2: Gráfico de caja y bigotes del tiempo requerido por el algoritmo de inicialización aprendida de pesos y el de *backpropagation*.

Debemos ser cautos antes de afirmar que tal relación entre los tiempos es el índice de mejora. Puesto que antes debe de conocerse el motivo por el que se detuvo el algoritmo de *backpropagation*; para ello se estudiará la distribución de los errores en entrenamiento.

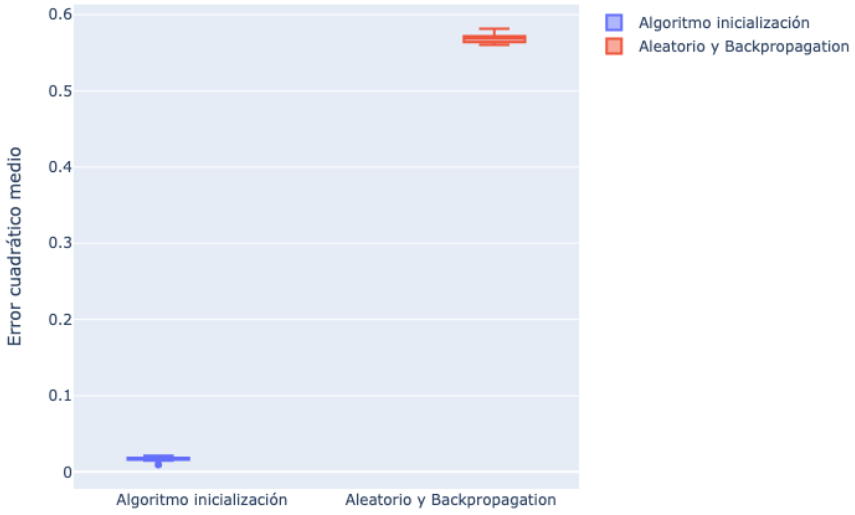


Figura 7.3: Gráfico de caja y bigotes del **error en entrenamiento tras finalizar** el algoritmo de inicialización aprendida de pesos y el de *backpropagation*.

En promedio el error cuadrático medio dentro del entrenamiento conseguido con nuestro algoritmo es

$$0,017 \pm 0,003;$$

mientras que el de inicialización aleatoria y *backpropagation* es de

$$0,569 \pm 0,006.$$

Si además se observa la traza obtenida durante la ejecución (ver repositorio), no tarda uno en percatarse de que en la mayoría de las muestras, la parada del algoritmo de *backpropagation* se está produciendo al *estancarse* el error en un mínimo local.

Esta situación si bien nos previene de poder explicitar un coeficiente de mejora entre el algoritmo de inicialización aprendida y *backpropagation* desde una red neuronal inicializada aleatoriamente, pone de manifiesto su gran potencial de aprendizaje. Es por tanto interesante comparar el error cuadrático medio obtenido en los datos de test, ya que nos dará una estimación verdadera de la bondad del método.

El error cuadrático medio de ambos métodos en test es el siguiente:

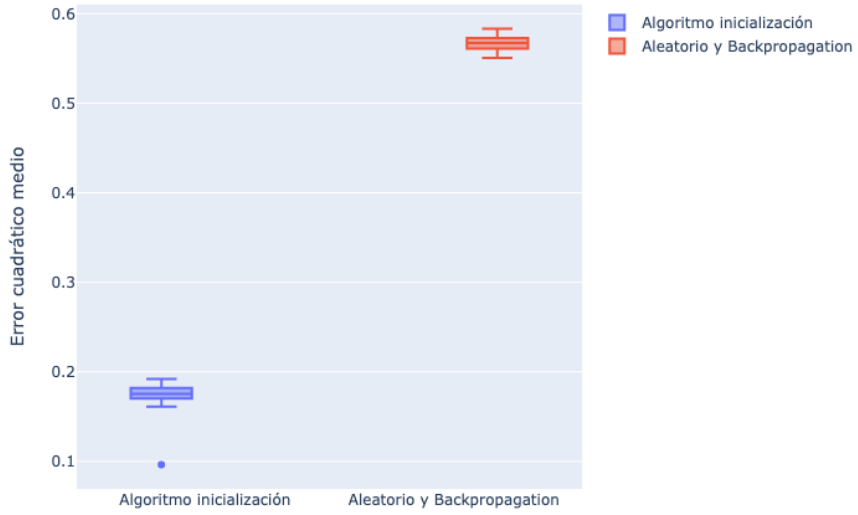


Figura 7.4: Gráfico de caja y bigotes del **error cuadrático medio en test** el algoritmo de inicialización aprendida de pesos y el de *backpropagation*.

donde ahora el promedio para nuestro algoritmo de inicialización aprendida es de un error de

$$0,171 \pm 0,022;$$

mientras que el de inicialización aleatoria y *backpropagation* es de

$$0,567 \pm 0,009.$$

¿Qué significa que un modelos está sobreajustado o sobreentrenado? En aprendizaje automático un modelo se dice sobreentrenado o sobreajustado cuando ha *aprendido* características propias de los datos de entrenamiento que no son válidas para el problema general. Este efecto produce que se tengan resultados en entrenamiento *considerablemente* mejores que en test.

A diferencia del error en test obtenido con *backpropagation*, el de nuestro algoritmo ha superado al de entrenamiento, lo que indica un sobreajuste del modelo a los datos de entrenamiento. Esto es totalmente de esperar por cómo se construye la inicialización de pesos. Sin embargo, a pesar del sobreajuste, el resultado sigue siendo mejor tanto en precisión como en tiempo que el de aprendizaje usando *backpropagation*.

7.5. Observaciones y conclusiones sobre el algoritmo de inicialización aprendida de pesos

Cabe destacar que si bien el algoritmo se ha diseñado para nuestro modelo de red neuronal, la idea se puede extender al resto de modelos existentes; para ello bastaría seguir la demostración y plantear el sistema de ecuaciones adecuado que se utilizan en la línea 4 del algoritmo 6.

Por otro lado, en nuestro caso concreto, el algoritmo de inicialización aprendida ha presentado mejores resultados en precisión y tiempo que la alternativa, esta simultaneidad en los beneficios evita cuantificarlos; ya que para tener un coeficiente de mejora o tiempo debería de fijarse un parámetro (las mismas condiciones de observación) y comparar el otro.

Como mostramos por el experimento no ha sido posible fijar el error de estudio, ya que *backpropagation* no ha sido capaz de minimizar la red inicializada aleatoriamente hasta tal error.

Por otro lado nuestro algoritmo al no ser iterativo tampoco ha podido adaptarse al de *backpropagation*.

Si razonáramos fijando el error, la comparación tampoco es posible, ya que si se observan los tiempo de la traza de ejecución (ver experimento en el repositorio), una sola ejecución de nuestro algoritmo ya es más rápida que una iteración de *backpropagation*.

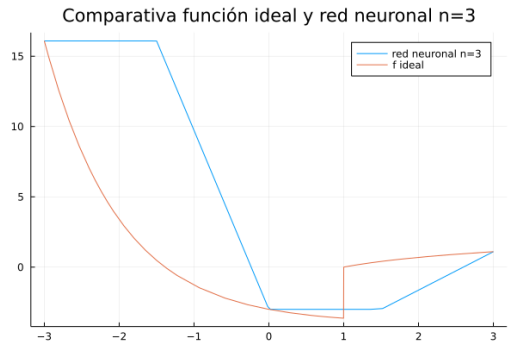
Para futuros trabajos se podría cuantificar la mejora, para ello proponemos relajar restricciones de backpropagation con el fin de reducir su tiempo de ejecución y así poder compararlos. Proponemos para ello reducir el tamaño del conjunto de entrenamiento en cada iteración. De esta forma se podría obtener un tiempo por iteración que sea divisor del que emplee el algoritmo de inicialización aprendida y de esta manera sí poder fijar un tiempo común con el comparar el error.

7.6. Utilidad del algoritmo de inicialización aprendida de pesos en problemas de teoría de la aproximación clásicos

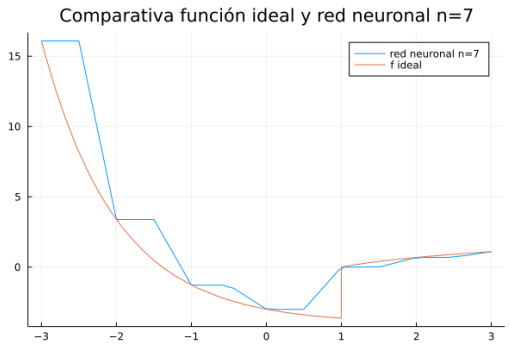
El algoritmo que acabamos de implementar no solo tiene su utilidad en el uso de inicialización de pesos de redes neuronales, sino que resuelve problemas de teoría de aproximación clásicos.

Para mostrar esto habrá que remontarse a los ejemplos del comienzo de este trabajo. En la sección 3.3 se mostraba que había algunas funciones cuyo error de aproximación tendía a infinito. Gracias al teorema 4.1 sabemos que las redes neuronales convergen llevando el error a cero.

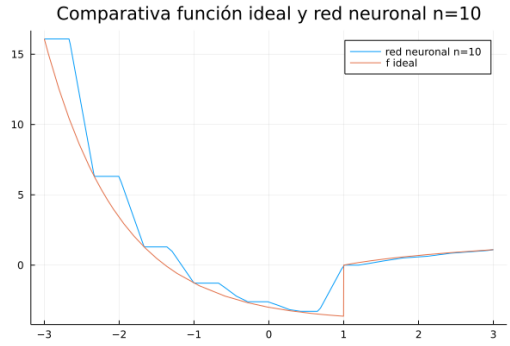
Véase cómo se aproxima ahora el ejemplo patológico que se mostraba en la figura 3.1:



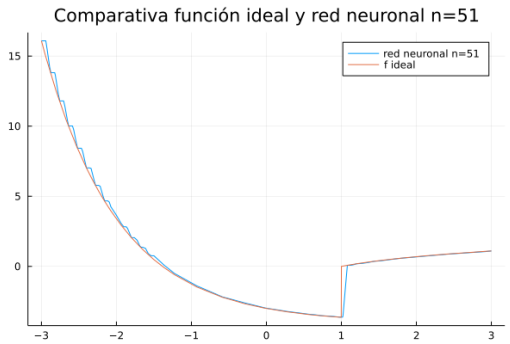
(a) Red neuronal inicializada a partir de 3 datos



(b) Red neuronal inicializada a partir de 7 datos



(c) Red neuronal inicializada a partir de 10 datos



(d) Red neuronal inicializada a partir de 51 neuronas

Figura 7.5: Ejemplo de aproximación de la función $f(x)$ con redes neuronales.

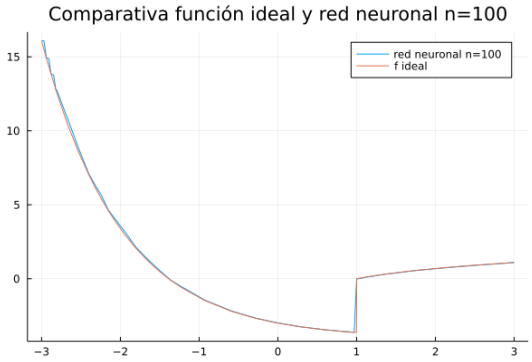


Figura 7.6: Ejemplo de aproximación de la función $f(x)$ con red neuronal de 100 neuronas.

8 Futuros trabajos: Selección genética de las funciones de activación

Como se indicó en 4.3 aunque la convergencia universal no dependa de la función de activación seleccionada, fijado cierto número de neuronas, éstas sí que pueden determinar el error mínimo que podamos alcanzar.

Gracias al resultado 4.1 es posible combinar en una red neuronal distintas funciones de activación y que el teorema de convergencia universal 4.1 se mantenga cierto, esto abre la puerta a explorar también durante el entrenamiento diferentes funciones de activación. De hecho ya existen artículos como [KSB18] y [Zha15] donde se desarrolla de manera experimental esta idea.

El problema que se tiene es que al aumentar el número de funciones de activación candidatas, se está aumentando también el espacio de búsqueda; lo que significa que la complejidad del espacio aumenta y por ende el coste para encontrar una solución.

Se ha intentado paliar la situación con algoritmos genéticos (véanse los artículos recién citados). Sin embargo, existen dos detalles claves y novedosos que podemos aportar: el primero es que **con nuestro teorema 6.1** se ha obtenido un criterio de selección de las funciones de activación que tendrán el mismo potencial de aproximación y menor coste; esto **nos ahorraría tener que explorar combinaciones de funciones de activación que no vaya a aportar en precisión y además aumenten el costo.**

El segundo reside en que en los artículos que versan sobre el tema, utilizan modelos de *deep learning* sensibles a la posiciones de las función de activación. Es decir, que para n neuronas y t funciones de activación diferentes el tamaño del espacio de búsqueda es t^n. Sin embargo, una de las ventajas que presenta **nuestro modelo** es que **es invariante ante cambios de posición de funciones de activación;** por lo que una vez fijado el número de cada tipo de funciones de activación da igual la neurona dónde se posicionen (esto es fácil de comprobar observando el modelo 5 y por la propiedad conmutativa de la suma).

Es decir, **con nuestro modelo y resultados se estaría reduciendo el espacio de búsqueda y por tanto merecería la pena plantearse de nuevo este tipo de experimentos**.

9 Conclusiones

Era nuestro objetivo con este trabajo esclarecer el motivo y funcionamiento de las redes neuronales y a partir de ahí optimizar algún aspecto de ellas.

El sustento teórico queda expuesto en los capítulos 1, 2, 3, 4 y 5. Hemos contribuido al estado del arte actual con los resultados:

- La propuesta del uso de modelo de red neuronal (definición 4.1).
- La demostración teórica del uso de distintas funciones de activación en el modelo seleccionado (corolario 4.1).
- La demostración de la densidad del espacio de las redes neuronales racionales en el espacio de las funciones medibles (teorema 4.9).
- Resultados sobre la irrelevancia del sesgo en las redes neuronales (sección 5.2.1).
- Una alternativa al uso de funciones de clasificación (sección 5.2.2).
- Un criterio de selección de funciones de activación (capítulo 6).
- Resultados teóricos sobre la equivalencia de funciones de activación (teorema 6.1 y corolario 6.1).
- Un algoritmo de inicialización aprendida de los pesos de una red neuronal que acelera los métodos de aprendizaje iterativos (capítulo 7).
- La biblioteca *OptimizedNeuralNetwork.jl* que aporta un modelo y métodos optimizados para el uso de redes neuronales.

y proponemos como posibles vías de investigación en proyectos futuros:

- Una revisión de la selección genética de funciones de activación con nuestro modelo (capítulo 8).
- Una investigación sobre la repercusión en la convergencia de la delimitación de la precisión en los coeficientes de las redes neuronales (sección 4.7).

Pero finalmente y sobretodo, me llevo la grata experiencia de todo el proceso que ha conllevado este Trabajo Fin de Grado; con las habilidades de gestión bibliográfica, comprensión y expresión rigurosa que ello implica; así como el método adquirido, constancia y paciencia; y por supuesto la satisfacción personal de haber sido capaz de acabar un proyecto de estas características.

Bibliografía

Las referencias se listan por orden alfabético. Aquellas referencias con más de un autor están ordenadas de acuerdo con el primer autor.

[43087] IEEE First Annual International Conference on Neural Networks San Diego, California June 21-24, 1987. *IEEE Expert*, 2(2):14–14, 1987. doi:10.1109/MEX.1987.4307059. [Citado en pág. 49]

[ADIP20] Andrea Apicella, Francesco Donnarumma, Francesco Isgrò, and Roberto Prevete. A survey on modern trainable activation functions. *CoRR*, abs/2005.00817, 2020. URL: https://arxiv.org/abs/2005.00817, arXiv:2005.00817. [Citado en pág. 99]

[ALK+18] Irfan Ali, Haque Nawaz Lashari, Imran Keerio, Abdullah Maitlo, M. Chhajro, and Muhammad Malook. Performance comparison between merge and quick sort algorithms in data structure. *International Journal of Advanced Computer Science and Applications*, 9:192–195, 01 2018. doi:10.14569/IJACSA.2018.091127. [Citado en pág. 120]

[AMMIL12] Yaser S. Abu-Mostafa, Malik Magdon-Ismail, and Hsuan-Tien Lin. *Learning From Data*. AMLBook, 2012. [Citado en págs. 15, 22, 32, 49, 85, and 94]

[Bar47] Robert G. Bartle. *The elements of real analysis*. John. Wiley & Sons, 1947. [Citado en págs. 22 and 35]

[BCC] Francisco Javier Merí de la Maza Blanca Cano Camarero, Juan Julián Merelo Guervós. Github, repositorio: Estudio de las redes neuronales. URL: https://github.com/BlancaCC/TFG-Estudio-de-las-redes-neuronales. [Citado en pág. 27]

[BGNR16] Bowen Baker, Otkrist Gupta, Nikhil Naik, and Ramesh Raskar. Designing neural network architectures using reinforcement learning. *CoRR*, abs/1611.02167, 2016. URL: http://arxiv.org/abs/1611.02167, arXiv:1611.02167. [Citado en pág. 33]

[Bis06] Christopher M. Bishop. *Pattern Recognition and Machine Learning (Information Science and Statistics)*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2006. [Citado en págs. 22, 32, 49, and 79]

[BKSE12] Jeff Bezanson, Stefan Karpinski, Viral B. Shah, and Alan Edelman. Julia: A fast dynamic language for technical computing. *CoRR*, abs/1209.5145, 2012. URL: http://arxiv.org/abs/1209.5145, arXiv:1209.5145. [Citado en pág. 28]

[Bos] Geert Bossuyt. Agile is not a methodology, it's a mindset ! URL: https://xebia.com/agile-is-not-a-methodology-its-a-mindset/. [Citado en pág. 24]

[BPS+22] Atılım Güneş Baydin, Barak A. Pearlmutter, Don Syme, Frank Wood, and Philip Torr. Gradients without backpropagation. 2022. URL: https://arxiv.org/abs/2202.08587, doi:10.48550/ARXIV.2202.08587. [Citado en pág. 96]

[BS21] Sebastien Bubeck and Mark Sellke. A universal law of robustness via isoperimetry. In A. Beygelzimer, Y. Dauphin, P. Liang, and J. Wortman Vaughan, editors, *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2021. URL: https://openreview.net/forum?id=z71OSKqTFh7. [Citado en pág. 31]

[CC95] Tianping Chen and Hong Chen. Universal approximation to nonlinear operators by neural networks with arbitrary activation functions and its application to dynamical systems. *IEEE Transactions on Neural Networks*, 6(4):911–917, 1995. doi:10.1109/72.392253. [Citado en pág. 50]

[CM07] Vladimir Cherkassky and Filip Mulier. *Learning From Data: Concepts, Theory, and Methods*. John. Wiley & Sons, 2 edition, 2007. [Citado en págs. 31, 85, and 89]

[Coh09] Mike Cohn. *User Stories for Agile Software*. Pearson Education, Inc., 2009. [Citado en pág. 24]

[CZLN21] Junyi Chai, Hao Zeng, Anming Li, and Eric W.T. Ngai. Deep learning in computer vision: A critical review of emerging techniques and application scenarios. *Machine Learning with Applications*, 6:100134, 2021. URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2666827021000670, doi:https://doi.org/10.1016/j.mlwa.2021.100134. [Citado en pág. 31]

[D] Rikke Friis Dam and Teo Yu Siang |. Personas – a simple introduction. URL: https://www.interaction-design.org/literature/article/personas-why-and-how-you-should-use-them. [Citado en pág. 23]

[DD22] Christopher D Barr David Diez, Mine Çentinkaya-Runder. *OpenIntro Statics*. Openinto, 2022. URL: https://github.com/OpenIntroStat/openintro-statistics. [Citado en pág. 106]

[Dug66] James Dugundji. *Topology*. Allyn and Bacon series in advanced mathematics. Allyn and Bacon, 1966. URL: https://books.google.es/books?id=FgFRAAAAMAAJ. [Citado en pág. 66]

[DZDW18] Happiness Ugochi Dike, Yimin Zhou, Kranthi Kumar Deveerasetty, and Qingtian Wu. Unsupervised learning based on artificial neural network: A review. In *2018 IEEE International Conference on Cyborg and Bionic Systems (CBS)*, pages 322–327, 2018. doi:10.1109/CBS.2018.8612259. [Citado en pág. 33]

[Fun89] Ken-Ichi Funahashi. On the approximate realization of continuous mappings by neural networks. *Neural Networks*, 2(3):183–192, 1989. URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0893608089900038, doi:https://doi.org/10.1016/0893-6080(89)90003-8. [Citado en págs. 50 and 99]

[GCZ+19] Shanghua Gao, Ming-Ming Cheng, Kai Zhao, Xinyu Zhang, Ming-Hsuan Yang, and Philip H. S. Torr. Res2net: A new multi-scale backbone architecture. *CoRR*, abs/1904.01169, 2019. URL: http://arxiv.org/abs/1904.01169, arXiv:1904.01169. [Citado en pág. 111]

[Gue] Juan Julián Merelo Guervós. Cómo llevar a término un TFG/TFM en informática. URL: https://jj.github.io/que-es-un-trabajo-fin-de-x/tf.html. [Citado en pág. 23]

[Gue21] Juan Julián Merelo Guervós. Agile (data) science: a (draft) manifesto. *CoRR*, abs/2104.12545, 2021. URL: https://arxiv.org/abs/2104.12545, arXiv:2104.12545. [Citado en pág. 23]

[GW88] A. Ronald Gallant and Halbert White. There exists a neural network that does not make avoidable mistakes, 1988. [Citado en pág. 50]

[Hal74] Paul R. Halmos. *Measure theory / [by] Paul R. Halmos*. Springer-Verlag New York, 1974. URL: http://www.loc.gov/catdir/enhancements/fy0814/74010690-t.html. [Citado en págs. 50, 57, 66, and 68]

[His21] Hisour. Nocción del aprendizaje automático, 2021. URL: https://www.hisour.com/es/machine-learning-42773/. [Citado en pág. 31]

[Hoa62] C. A. R. Hoare. Quicksort. *The Computer Journal*, 5(1):10–16, 01 1962. arXiv:https://academic.oup.com/comjnl/article-pdf/5/1/10/1111445/050010.pdf, doi:10.1093/comjnl/5.1.10. [Citado en pág. 120]

[HSW89] Kurt Hornik, Maxwell Stinchcombe, and Halbert White. Multilayer feedforward networks are universal approximators. *Neural Networks*, 2(5):359–366, 1989. URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0893608089900208, doi:https://doi.org/10.1016/0893-6080(89)90020-8. [Citado en págs. 21, 22, 31, 49, and 50]

[Ken] Kent Beck, Mike Beedle, Arie van Bennekum, Alistair Cockburn, Ward Cunningham, Martin Fowler, James Grenning, Jim Highsmith, Andrew Hunt, Ron Jeffries, Jon Kern, Brian Marick, Robert C. Martin, Steve Mellor, Ken Schwaber, Jeff Sutherland, Dave Thomas. Principios del manifiesto Ágil. URL: https://agilemanifesto.org/iso/es/principles.html. [Citado en pág. 24]

[Knu98] Donald Knuth. *"Section 5.2.4: Sorting by Merging". Sorting and Searching. The Art of Computer Programming*. Addison-Wesley, vol. 3 (2nd ed.). edition, 1998. [Citado en pág. 120]

[KSB18] Kolyu Kolev, Janeta Sevova, and Ivan Blagoev. Artificial neural network activation function optimization with genetic algorithms. 05 2018. [Citado en págs. 81 and 133]

[LCL+21] Tingting Liang, Xiaojie Chu, Yudong Liu, Yongtao Wang, Zhi Tang, Wei Chu, Jingdong Chen, and Haibin Ling. Cbnetv2: A composite backbone network architecture for object detection. *CoRR*, abs/2107.00420, 2021. URL: https://arxiv.org/abs/2107.00420, arXiv:2107.00420. [Citado en pág. 111]

[LGMC21] Luis Liñán-Villafranca, Mario García-Valdez, Juan Julián Merelo, and Pedro Castillo-Valdivieso. Evomlp: A framework for evolving multilayer perceptrons. In Ignacio Rojas, Gonzalo Joya, and Andreu Català, editors, *Advances in Computational Intelligence - 16th International Work-Conference on Artificial Neural Networks, IWANN 2021, Virtual Event, June 16-18, 2021, Proceedings, Part II*, volume 12862 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 330–342. Springer, 2021. doi:10.1007/978-3-030-85099-9_27. [Citado en pág. 31]

[Lig58] M. J. Lighthill. *Introduction to Fourier Analysis and Generalized Functions*. Cambridge University Press, 1958. [Citado en pág. 96]

[LKC+10] Victor Lee, Changkyu Kim, Jatin Chhugani, Michael Deisher, Daehyun Kim, Anthony Nguyen, Nadathur Satish, Mikhail Smelyanskiy, Srinivas Chennupaty, Per Hammarlund, Ronak Singhal, and Pradeep Dubey. Debunking the 100x gpu vs. cpu myth: an evaluation of throughput computing on cpu and gpu. *ACM SIGARCH Computer Architecture News*, 38:451–460, 01 2010. doi:10.1145/1816038.1816021. [Citado en pág. 77]

[LW94] Barbara H. Liskov and Jeannette M. Wing. A behavioral notion of subtyping. *ACM Trans. Program. Lang. Syst.*, 16(6):1811–1841, nov 1994. doi:10.1145/197320.197383. [Citado en pág. 104]

[McD14] J.H. McDonald. *Handbook of Biological Statistics*. Sparky House Publishing, Baltimore, Maryland, 2014. [Citado en pág. 106]

[Mit97] Tom Mitchell. *Machine Learing*. McGraw, 1997. URL: https://www.cs.cmu.edu/afs/cs.cmu.edu/user/mitchell/ftp/mlbook.html. [Citado en pág. 31]

[Mon02] David J. Montana. Neural network weight selection using genetic algorithms. 2002. [Citado en pág. 111]

[MP43] Warren S. McCulloch and Walter Pitts. A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. *The bulletin of mathematical biophysics*, 5(4):115–133, 1943. doi:10.1007/BF02478259. [Citado en pág. 21]

[MP69] Marvin Minsky and Seymour Papert. *Perceptrons: An Introduction to Computational Geometry*. MIT Press, Cambridge, MA, USA, 1969. [Citado en pág. 21]

[NIGM18] Chigozie Nwankpa, Winifred Ijomah, Anthony Gachagan, and Stephen Marshall. Activation functions: Comparison of trends in practice and research for deep learning. *CoRR*, abs/1811.03378, 2018. URL: http://arxiv.org/abs/1811.03378, arXiv:1811.03378. [Citado en pág. 54]

[PKK+19] Michael P. Perrone, Haidar Khan, Changhoan Kim, Anastasios Kyrillidis, Jerry Quinn, and Valentina Salapura. Optimal mini-batch size selection for fast gradient descent. *CoRR*, abs/1911.06459, 2019. URL: http://arxiv.org/abs/1911.06459, arXiv:1911.06459. [Citado en pág. 96]

[RHW86a] D. E. Rumelhart, G. E. Hinton, and R. J. Williams. *Learning Internal Representations by Error Propagation*, page 318–362. MIT Press, Cambridge, MA, USA, 1986. [Citado en pág. 21]

[RHW86b] David E. Rumelhart, Geoffrey E. Hinton, and Ronald J. Williams. Learning representations by back-propagating errors. *Nature*, 323(6088):533–536, 1986. doi:10.1038/323533a0. [Citado en pág. 89]

[Ros58] Frank Rosenblatt. The perceptron: a probabilistic model for information storage and organization in the brain. *Psychological review*, 65(6):386, 1958. [Citado en pág. 21]

[Rud] Charlie Rudd. Why agile is not a methodology. URL: https://www.solutionsiq.com/resource/blog-post/why-agile-is-not-a-methodology/. [Citado en pág. 24]

[Sar21] Iqbal H. Sarker. Machine learning: Algorithms, real-world applications and research directions. *SN Computer Science*, 2(3):160, 2021. doi:10.1007/s42979-021-00592-x. [Citado en págs. 31 and 32]

[SM02] Kenneth O. Stanley and Risto Miikkulainen. Efficient reinforcement learning through evolving neural network topologies. In *Proceedings of the 4th Annual Conference on Genetic and Evolutionary Computation*, GECCO'02, page 569–577, San Francisco, CA, USA, 2002. Morgan Kaufmann Publishers Inc. [Citado en pág. 33]

[SM15] Sho Sonoda and Noboru Murata. Neural network with unbounded activations is universal approximator. *CoRR*, abs/1505.03654, 2015. URL: http://arxiv.org/abs/1505.03654, arXiv:1505.03654. [Citado en págs. 50 and 99]

[SVI+15] Christian Szegedy, Vincent Vanhoucke, Sergey Ioffe, Jonathon Shlens, and Zbigniew Wojna. Rethinking the inception architecture for computer vision. *CoRR*, abs/1512.00567, 2015. URL: http://arxiv.org/abs/1512.00567, arXiv:1512.00567. [Citado en pág. 54]

[WLH+17] Bin Wang, Tianrui Li, Yanyong Huang, Huaishao Luo, Dongming Guo, and Shi-Jinn Horng. Diverse activation functions in deep learning. In *2017 12th International Conference on Intelligent Systems and Knowledge Engineering (ISKE)*, pages 1–6, 2017. doi:10.1109/ISKE.2017.8258768. [Citado en pág. 54]

[WY10] Bogdan M. Wilamowski and Hao Yu. Neural network learning without backpropagation. *IEEE Transactions on Neural Networks*, 21(11):1793–1803, 2010. doi:10.1109/TNN.2010.2073482. [Citado en pág. 97]

[Zha15] Luna M. Zhang. Genetic deep neural networks using different activation functions for financial data mining. In *2015 IEEE International Conference on Big Data (Big Data)*, pages 2849–2851, 2015. doi:10.1109/BigData.2015.7364099. [Citado en págs. 81 and 133]