Universidad Autónoma de Madrid
Escuela politécnica superior

Grado en Ingenieria Informática

Trabajo Fin de Grado

HERRAMIENTAS MODERNAS EN REDES NEURONALES: LA LIBRERÍA KERAS

Autor: Carlos Antona Cortés
Tutor: José Ramón Dorronsoro Ibero

Enero 2017

HERRAMIENTAS MODERNAS EN REDES NEURONALES: LA LIBRERÍA KERAS

Autor: Carlos Antona Cortés
Tutor: José Ramón Dorronsoro Ibero

Codigo: 1617_032_CO
Dpto. de Neurocomputación
Escuela Politécnica Superior
Universidad Autónoma de Madrid
Enero 2017

Resumen

El mundo de las redes neuronales está en auge. Poder simular el cerebro humano en un ordenador, parece ser uno de los hitos más prometedores de la informatica. ..... En primer lugar, se hará una breve introduccion al mundo de las redes neuronales. Se empezará por lo mas básico, explicando que es una red neuronal y cuales son las partes mas importantes de su arquitectura, y se describirán los 3 tipos de redes neuronales mas extendidos actualmente debido a sus buenos resultados: Perceptrón multicapa, redes convolucionales, y redes LSTM.

En segundo lugar, se describirá Keras, una librería de deep learning con la cual podremos diseñar nuestros propios modelos de redes neuronales. Se detallarán las funciones más importantes, así como todas las posibilidades que nos ofrece.

Por último, se aplicarán todos los conocimientos descritos anteriormente para diseñar 4 tipos de redes neuronales que resolverán 4 problemas distintos.

Palabras Clave

Redes neuronales, Keras, Tensorflow, Perceptrón, Redes convolucionales, Redes LSTM.

Agradecimientos

Antes de nada, quiero dar las gracias a mi tutor, José Dorronsoro por darme la oportunidad de adentrarme en el mundo de las redes neuronales. En una materia de estudio tan extensa, novedosa, y en constante desarrollo, me habría sido mucho mas dificil cumplir con mis objetivos si no fuese por su ayuda.

En segundo lugar quiero dar las gracias a mis compañeros de clase. Sergio, David, Javi, Galan, Gus, Alfonso... Durante estos 4 años han sido las personas a las que mas he visto, y por tanto, no pueden faltar en mis agradecimientos. Cuantos dias hemos pasado en las salas de estudio de la biblioteca, cuantas semanas quedandonos de principio a fin en la universidad estudiando, cuantas noches sin dormir lo que nos gustaría por entregar alguna practica... En fin, gracias por hacerme el camino mas ameno.

Una mención especial a mis amigos de Vallecas, Alvaro, Alberto, Ivan y Benze. En estos cuatro años hemos cambiado mucho, y gracias a las vacaciones, el canal de musica, las tardes de viernes en el bar... he conseguido tomarme ese respiro todas las semanas para abstraerme lo necesario de los estudios, y seguir disfrutando de la vida.

Por último, y no por ellos menos importante, quiero ofrecer una mención especial a mi familia. Ellos han sido los que verdaderamentre han tenido que aguantarme estos 19 años de estudio. Semanas de nervios, luces encendidas a altas horas de la noche, apoyos y consejos cuanto mas lo necesitaba... No tendría páginas suficientes en este TFG para agradecerles todo lo que han hecho por mi.

Índice general

Indice de Figuras

Indice de Tablas

Capítulo 1

Introducción

1.1. ¿Qué es deep learning?

Deep Learning (aprendizaje profundo) es una rama de machine learning (aprendizaje automático) formada por un conjunto de algoritmos que intentan modelar abstracciones de alto nivel en datos, usando grafos profundos con múltiples capas de procesamiento. Estas capas de procesamiento pueden estar compuestas por transformaciones tanto lineales como no lineales.

Antes de entrar de lleno en este mundo tan complejo, relativamente moderno, y en constante cambio, no estaría de más entender que significa que una maquina pueda aprender. Muchas veces en el mundo de la informática, nos encontramos ante problemas que son difíciles de programar. Imaginemos el caso de una aplicación de reconocimiento de textos escritos a mano. Es difícil imaginarse un conjunto de reglas que permitan distinguir unos caracteres de otros, ya que dependiendo de la forma de escritura de cada individuo, los caracteres cambian relativamente su forma. Por ejemplo, podría ser bastante difícil distinguir el número 0 del numero 6 de la letra o. A parte de este ejemplo, también tenemos muchos tipos de problemas en los que cuesta imaginarse un conjunto de reglas para su resolución: reconocimiento de objetos, discursos... Aquí es donde entra en juego el Machine Learning en general, y el Deep Learning en partícular.

Si en vez de intentar escribir un programa que resuelva nuestro complejo problema, escribimos un algoritmo que permita a nuestro ordenador estudiar miles de ejemplos con sus soluciones, para luego aplicar la experiencia a la hora de resolver nuevos casos, estaremos aplicando Machine Learning.

El Deep Learning, que tuvo sus inicios en los años 80s, no es mas que un paradigma de implementación de Machine Learning. Debido a las recientes investigaciones sobre el mundo de la Inteligencia Artificial, esta tecnología se encuentra ahora mismo en constante desarrollo, ya que se ha demostrado que es la forma mas eficiente de hacer con un computador una simulación de lo que nuestro cerebro puede hacer.

1.2. ¿Qué podemos hacer mediante deep learning?

Como ya se ha comentado, las técnicas de deep learning nos han abierto una puerta a muchos tipos de problemas que hasta hace relativamente poco eran difícilmente programables mediante un ordenador. De entrada, podemos resolver problemas de clasificación y predicción de una manera mucho más eficiente y precisa que con las técnicas que conocimos hasta entonces. Algunos

ejemplos concretos podrían ser:

1. Colorear imágenes en blanco y negro.
Tradicionalmente, esta tarea ha sido llevada a cabo por el ser humano de manera manual, hasta que mediante el uso de deep learning, se han utilizado los objetos y contextos de las propias imágenes para ser coloreadas. Para ello, se necesitan grandes redes neuronales convolucionales con capas supervisadas, que recrean la imagen coloreada de la misma manera que lo haría un ser humano.

2. Añadir sonido a películas mudas.
Pongamos el ejemplo de querer recrear el sonido que hace un palo al golpear con una superficie. Si entrenamos el sistema utilizando una gran cantidad de vídeos donde se muestra el sonido que hace un palo al ser golpeado contra diferentes superficies, nuestra red neuronal asociará los frames del vídeo mudo con la información ya aprendida, y seleccionará el sonido que mejor se adapte a la escena.

3. Traducciones automáticas.
Pese a que la traducción de palabras, frases o textos lleva siendo posible desde hace muchos años, mediante la utilización de redes neuronales se han alcanzado resultados mucho mejores sobre todo en dos áreas: traducción de texto, y traducción de imágenes. En el caso de los textos por ejemplo, se ha pasado de traducir palabras sueltas, a analizar y entender la gramática y la conexión entre palabras, haciendo deducciones mucho mas precisas del significado global de la frase. Para ello, se usan redes LSTM. Para el caso de traducción de textos en imágenes se utilizan redes convoluciones, ya que son capaces de identificar letras, con ellas formar palabras, y a su vez formar un texto. En muchos contextos a esto se le llama traducción visual.

4. Clasificación de objetos en fotografías.
Esta funcionalidad consiste en detectar y clasificar uno o mas objetos de la escena de una fotografía. Eso se consigue entrenando grandes redes convolucionales mediante imágenes aisladas de objetos conocidos.
A partir de aquí, el siguiente punto es crear una palabra o frase que describa el contenido de la imagen. En 2014, hubo un "boom"de algoritmos que alcanzaron resultados impresionantes a la hora de resolver este problema. La mayoría de ellos usaban redes LSTM para convertir las etiquetas que se generan al detectar objetos en una imagen, en frases con sentido.

5. Generación de textos.
Esta tarea consiste en, dado una recopilación de textos, generar nuevos textos a partir de una palabra o una frase.
Una aplicación podría ser la generación de textos escritos a mano. La escritura a mano consiste en una serie de movimientos coordinados de un bolígrafo, en los que se crea texto. Mediante machine learning, podemos aprender la relación entre los movimientos del bolígrafo y las letras escritas, para generar nuevos ejemplos. Esta funcionalidad puede ser utilizada por médicos forenses, o especialistas en análisis de manuscritos, ya que es posible aprender una cantidad impresionante de estilos de escritura.
Otra posible aplicación sería la de generar nuevos textos con nuevas historias. Mediantes redes LSTM se ha conseguido aprender la relación entre los distintos elementos de un texto (letra, palabra, frase...), para después generar nuevos textos letra a letra o palabra a palabra. Los modelos son capaces de aprender como deletrear, puntuar, formar oraciones, e incluso copiar los estilos de escritura para generar dichos textos.

6. Inteligencia artificial en videojuegos.

Todos sabemos que la inteligencia artificial en los vídeojuegos es una cosa que lleva existiendo desde hace mucho tiempo... En un shooter, la IA de la videoconsola sabe identificar donde está tu jugador, y con esa información, sabe a quien y donde disparar. Pero... ¿y si fuese posible analizar todos los píxeles de la pantalla? Mediante deep learning esto es relativamente sencillo, permitiendo a la IA rival tener mucha mas información y tomando así mejores decisiones. Un ejemplo nos lo encontramos en AlphaGo, una aplicación desarrollada por Google que ganó al campeón mundial de Go.

Otros ejemplos de aplicaciones de redes neuronales para resolver problemas actuales podrían ser: reconocimiento y traducción de discursos y charlas en tiempo real, foco automático en objetos en movimiento en fotografías, conversión automática de objetos en fotografías, respuestas automáticas a preguntas sobre objetos en fotografías... Como se puede observar, casi todas estas tareas se tratan de automatizar. Son tareas que el ser humano puede hacer manualmente, pero una maquina es capaz de aprender a hacerlo en mucho menos tiempo y con mucha mas eficiencia.

1.3. Antecedentes y estado actual

Capítulo 2

Redes neuronales: Deep Learning

2.1. Redes neuronales

2.1.1. Historia de las redes neuronales

Desde hace cientos de años, se ha intentado estudiar el cerebro humano. Sin embargo, a partir de los años 50 cuando empezaron a desarrollarse las bases de la tecnología actual, hubo un fuerte avance en este estudio. Las redes neuronales, como su nombre indica, pretenden imitar la forma de funcionamiento de las neuronas que forman el cerebro humano.

Años 40 :

- A principios de los años 40, el neurólogo Warren McCulloch y el matemático Walter Pitts propusieron el primer modelo matemático de redes neuronales. Describieron como funcionaban las neuronas, y modelaron un red neuronal simple usando circuitos eléctricos.
- A finales de década, Hebb definió dos conceptos muy importantes:
  - El proceso de aprendizaje se localiza principalmente en la sinapsis o conexión entre neuronas.
  - La información se representa en el cerebro mediante un conjunto de neuronas activas o inactivas.

  Estas dos reglas se sintetizan en la regla de aprendizaje de Hebb, que sigue siendo usada en algunos modelos actuales. Esta regla nos dice que los cambios en los pesos de la sinapsis se basan en la interacción entre las neuronas pre y post sintacticas, y el numero de veces que se activan de manera simultanea.

Años 50:

- En 1956 en la ciudad de Dartmouth, se llevó a cabo la primera conferencia sobre Inteligencia Artificial donde se discutió sobre la capacidad de las maquinas para simular el aprendizaje humano.
- A finales de los años 50, el neurobiólogo Frank Rosenblatt empezó a trabajar en el concepto de Perceptrón. Esto dio lugar a la regla de aprendizaje Delta, que permitía emplear señales continuas de entrada y de salida.

- En 1959 Bernard Widrow y Marcian Hoff desarrollaron los algoritmos Adaline (Adaptative Linear Neuron) y Madaline (Multiple Adaline). Estos modelos fueron usados para desarrollar la primera red neuronal aplicada a un problema real. Un filtro que eliminaba el eco en las llamadas telefónicas.

Años 80:

- En 1982, el interés por las redes neuronales se renovó. John Hopfield presentó informes a la Academia Nacional de Ciencias en los que no solo describría el modelado del cerebro humano, si no que demostró que aplicaciones que podría tener su estudio para crear nuevos dispositivos.
- En 1984, Kohonen desarrolló una familia de redes de memoria asociativa y mapas autoorganizativos, actualmente llamadas redes de Kohonen.
- En 1985, Paul Werbos desarrolló el algoritmo Backpropagation que resolvió el problema de entrenar redes neuronales multicapa de forma efectiva.
- En 1986, los investigadores Hinton y Sejnowski desarrollaron la máquina de Boltzmann, un tipo de red neuronal recurrente estocástica.

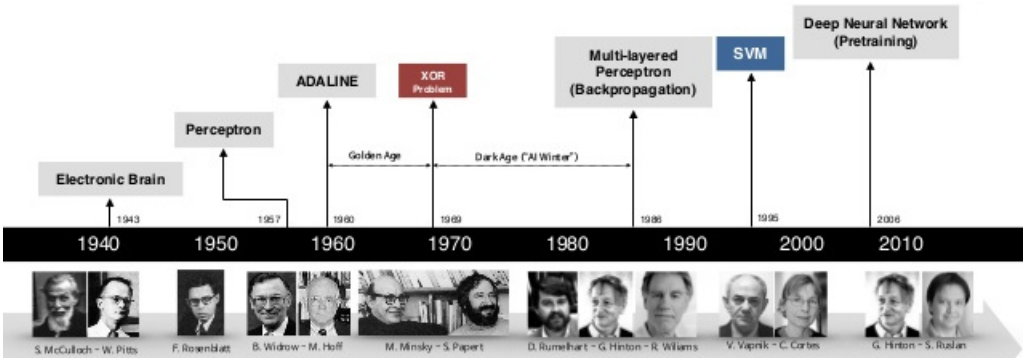


Figura 2.1: Historia de las redes neuronales
Imagen extraída de SlideShare

2.1.2. La neurona biológica

El cerebro, visto a un alto nivel y simplificando enormemente su estructura, podríamos decir que es un conjunto de millones y millones de células, llamadas neuronas, interconectadas entre ellas mediante sinapsis. La sinapsis se lleva a cabo en la zona donde 2 neuronas se conectan, y las partes de la célula que se encargan de realizarla son las dendritas y las ramificaciones del axón.

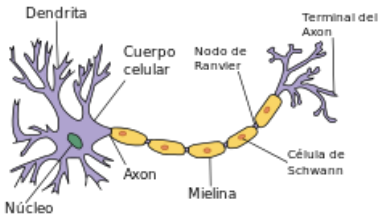


Figura 2.2: Estructura de una neurona
Imagen extraída de Wikipedia

Cada neurona desarrolla impulsos eléctricos que se trasmiten a lo largo de esta mediante su axón. Este, al final se ramifica en ramificaciones axionales, que conectan con otras neuronas mediante sus dentritras.
El conjunto de elementos que hay entre la ramificación axional y la dendrita forman la sinapsis, que regula la transmisión del impulso eléctrico mediante unos elementos químicos llamados neurotransmisores.

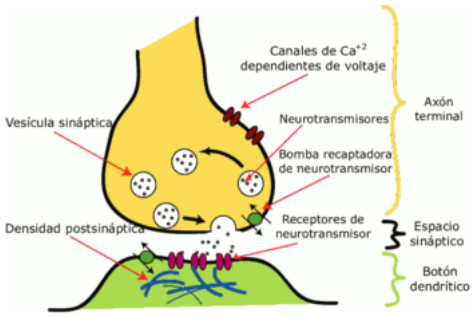


Figura 2.3: Sinapsis
Imagen extraída de Wikipedia

Los neurotransmisores liberados en la sinapsis pueden tener un efecto negativo o positivo sobre la transmisión del impulso eléctrico en la neurona que los recibe en sus dendritas. Esta neurona recibe varias señales de las distintas sinapsis, y las combina consiguiendo un cierto nivel de estimulación. En función de este nivel de activación, la neurona emite señales eléctricas mediante impulsos, con una intensidad determinada y con una frecuencia llamada tasa de disparo.
En resumen, si consideramos que la información del cerebro está codificada en impulsos eléctricos que se transmiten entre neuronas, y que los impulsos se ven modificados básicamente en la sinapsis, podemos intuir que la codificación del aprendizaje estará en la sinapsis y en la forma en la que las neuronas dejan pasar o inhiben las señales segregando neurotransmisores.

2.1.3. La neurona artificial

Las neuronas artificiales son modelos que tratan de simular el comportamiento de las neuronas biológicas. Cada neurona se representa como una unidad de proceso que forma parte de una entidad mayor, la red neuronal.

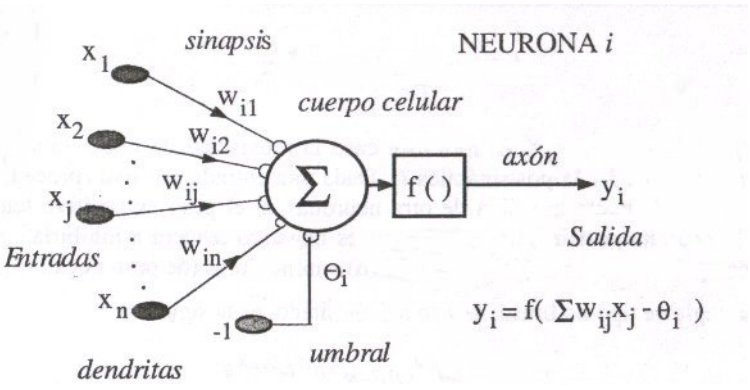


Figura 2.4: Esquema de una neurona artificial
Imagen extraída de ibiblio.org

Como podemos intuir observando la imagen anterior, la neurona artificial se comporta en cierto modo como una biológica, pero de forma simplificada:

- Entradas (x_1, x_2): estos valores pueden ser enteros, reales o binarios y equivaldrían a los impulsos que envían otras neuronas a través de sus dendritas.
- Pesos (w_1, w_2): equivaldrían a los mecanismos de sinapsis para transmitir el impulso.
- De este modo, el producto de los valores x_i, w_i equivaldría a las señales químicas inhibidoras y excitadoras que se dan en la neurona. Estos valores son la entrada de la función de activación, que convierte todo el conjunto de valores en uno solo llamado potencial. La función de ponderación suele ser la suma ponderada de las entradas y los pesos sinápticos.
- La salida de función de ponderación llega a la función de activación que transforma este valor en otro en el dominio que trabajen las salidas de las neuronas. Suele ser una función no lineal como la función paso o la función sigmoide, aunque también se usa funciones lineales.
- El valor de salida cumpliría la función de la tasa de disparo en las neuronas biológicas.

En resumen, podemos establecer las siguientes analogías:

- Neuronas biológicas $\Longleftrightarrow$ Neuronas Artificiales.
- Conexiones sinápticas $\Longleftrightarrow$ Conexiones ponderadas.
- Efectividad de las sinapsis$\Longleftrightarrow$ Peso de las conexiones.
- Efecto excitador o inhibidor de una conexión $\Longleftrightarrow$ Signo del peso de una conexión.
- Activación $\rightarrow$ Tasa de disparo $\Longleftrightarrow$ Función de activación $\rightarrow$ Salida

2.1.4. Funciones de las neuronas artificiales

Función de red o propagación

Esta función se encarga de transformar las diferentes entradas que provienen de la capa anterior, en el potencial de la neurona actual. Normalmente, las neuronas han de tratar simultáneamente con varios valores de entrada, y han de hacerlo como si se tratase de uno solo. Esta función viene a resolver el problema de combinar las entradas simples $(x_1, x_2, x_3...)$ en una sola entrada global. Podría describirme mediante la siguiente ecuación:

$$input = (x_1 : w_1) * (x_2 : w_2) * ... * (x_n : w_n) \tag{2.1}$$

siendo " : " el operador apropiado (por ejemplo: sumatorio, máximo, producto...), x las distintas entradas y w el peso de las conexiones. Multiplicando las entradas por los pesos, se permite que un valor muy grande de entrada pueda tener una influencia pequeña, si sus pesos son pequeños. Por lo general, este operador suele ser la suma ponderada de todas las entradas multiplicadas por sus respectivos pesos.

$$y' = \sum_{i=1}^{n} x_i * w_i \tag{2.2}$$

Función de activación

La función de activación combina el potencial que nos proporciona la función de propagación con el estado actual de la neurona, para conseguir el estado futuro de esta (activada/desactivada). Esta función es normalmente creciente y monótona. Las funciones mas comunes son:

- Identidad: es una función de activación muy simple que siempre devuelve como salida su valor de entrada. Su rango es va de menos infinito a infinito, es monótona y derivativamente monótona.

$$f(x) = x \tag{2.3}$$

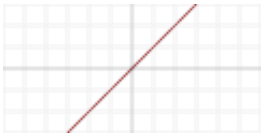


Figura 2.5: Funcion de activación identidad

- Escalón binario: Es la más usada por redes neuronales binarias ya que no es lineal, y es bastante sencilla. El Perceptrón y Hopfield son algunos ejemplos de redes que usan esta función. Cuenta con un rango 0,1, y es monótona.

$$f(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ 1 & x \geq 0 \end{cases} \tag{2.4}$$

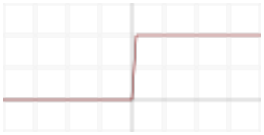


Figura 2.6: Función de activación escalón binario

- Logística / Softstep: Es una de las funciones mas utilizadas para modelar redes neuronales. Su rango es continuo en los valores (0,1), es monótona e infinitamente diferenciable.

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \tag{2.5}$$

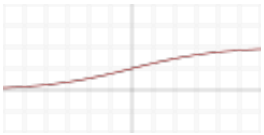


Figura 2.7: Funcion de activación logistica

- Tangente hiperbólica: Esta función es utilizada por redes con salidas continuas. Un ejemplo sería el Perceptrón multicapa con retropropagación, ya que su algoritmo de aprendizaje necesita una función derivable. Cuenta con un rango (-1,1), es monótona, y se aproxima a la función identidad en su origen.

$$f(x) = \tanh(x) = \frac{2}{1 + e^{-2x}} - 1 \tag{2.6}$$

- Rectificadora (ReLU - Rectified Linear Unit): Esta función de activación la introdujo por primera vez en el año 2000 Hahnloser, con motivaciones biológicas y matemáticas. Se viene usando en redes convolucionales mas que la ampliamente extendida función logística

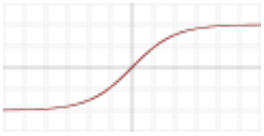


Figura 2.8: Funcion de activación tangencial

sigmoide (se basa en probabilidades), y es más practica que la tangente hiperbólica. La función rectificadora es, por tanto, una de las funciones de activación más populares para deep learning.

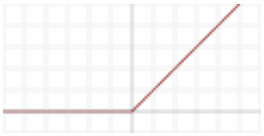


Figura 2.9: Funcion de activación rectificadora

- Softplus: aproximación suavizada de la función de activación rectificadora.

$$f(x) = ln(1 + e^x) \tag{2.7}$$

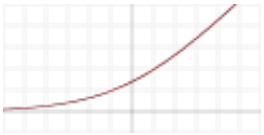


Figura 2.10: Funcion de activación softplus

2.1.5. Tipos de aprendizaje en redes neuronales

Aprendizaje supervisado

Los modelos de aprendizaje supervisado son aquellos utilizados cuando el problema nos presenta el conjunto de datos y los atributos que queremos predecir. Nos encontramos dos categorías:

- Regresión: los valores de salida son una o mas variables continuas. Un ejemplo sería predecir el valor de una casa en función de sus metros cuadrados, el numero de habitaciones, tamaño de la piscina... (Problema Boston-Housing detallado en el punto 4.2)
- Clasificación: los datos pertenecen a dos o mas clases, y se busca aprender como clasificar nuevas entradas en esas clases a partir de datos que ya conocemos. Uno de los ejemplos más conocidos es el Iris dataset, donde se intenta clasificar los datos en 4 tipos de flores según la longitud y la anchura de sus pétalos y sépalos. Otro de ellos es el problema del dataset MNIST, que busca clasificar imágenes de números en los 10 tipos de caracteres numéricos (Problema detallado en el punto 4.3).

Aprendizaje no supervisado

Cuando no hay información previa de salidas dado un conjunto de entradas. En estos casos, el objetivo es encontrar grupos mediante clustering, o determinar una distribución de probabilidad sobre un conjunto de entrada.

2.2. Perceptrón

En los años 50, F.Rosenblatt desarrolló por primera vez la idea de Perceptrón, basándose en la regla de aprendizaje de Hebb y en los modelos de neuronas biológicas de McCulloch y Pitts. Uno de las carácteristicas que mas interés despertó de este modelo fue su capacidad para aprender a reconocer patrones.
El perceptrón se basa en una arquitectura monocapa. Está constituido por un conjunto de células de entrada, que reciben los patrones a reconocer o clasificar, y una o varias células de salida que se ocupan de clasificar estos patrones de entrada en clases. Cada célula de entrada está conectada con todas las células de salida. En la figura 2.11 se puede observar la arquitectura de un perceptrón simple con 4 entradas y 1 salida.

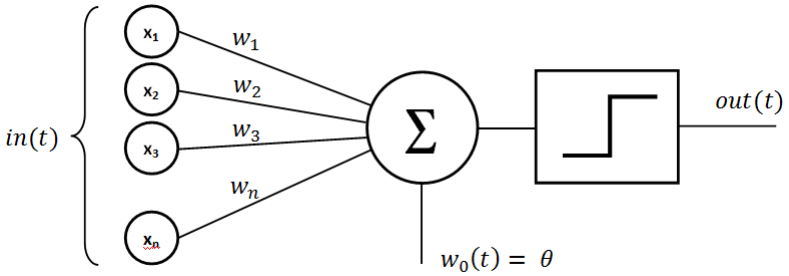


Figura 2.11: Perceptron simple
Imagen extraída de GitHub

El umbral (θ) es un parámetro utilizado como factor de comparación a la hora de generar la salida de una neurona. En esta arquitectura, la salida de la neurona se calcula multiplicando los valores de las entradas, por los pesos de las conexiones:

$$y' = \sum_{i=1}^{n} w_i x_i \tag{2.8}$$

Sin embargo, la salida definitiva depende del umbral, por lo que se obtiene aplicándole la función de salida al nivel de activación de la célula, es decir:

$$y = F(y', \theta) \tag{2.9}$$

$$y = \begin{cases} \text{si } y' + \theta & 1 \\ \text{si no} & 0 \end{cases} \tag{2.10}$$

Con estas fórmulas, podemos deducir que la salida de la célula (y) será 1 (neurona activada) si $y' > \theta$, o 0 (neurona desactivada) en caso contrario.
La función de salida (F) produce una salida binaria, por lo que es un diferenciador en dos categorías. En el caso de tener únicamente dos dimensiones, con las ecuaciones 2.8, 2.9 y 2.10 se podría llegar a la ecuación:

$$w_1 x_1 + w_2 x_2 + \theta = 0 \tag{2.11}$$

Que es la ecuación de una recta con pendiente

$$-\frac{w_1}{w_2} \tag{2.12}$$

y cuyo corte en la abscisa en el eje x pasa por

$$-\frac{\theta}{w_2} \tag{2.13}$$

Como podemos ver en la figura 2.12, podemos imaginarnos el perceptrón como una recta, que en un gráfica de dos dimensiones deja las dos categorías a separar a un lado y a otro de la misma.

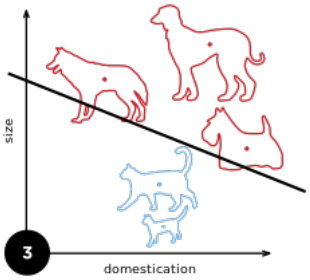


Figura 2.12: Separacion lineal del perceptrón.
Imagen extraída de Wikipedia

Aprendizaje

El perceptrón es un tipo de red que utiliza aprendizaje supervisado, es decir, necesita conocer los valores esperados para cada una de las entradas antes de realizar predicciones. Este proceso se lleva a cabo mediante la inserción de patrones de entrada del dataset con el que que se quiere entrenar la red.
Entrenar la red no es más que encontrar los pesos sinápticos y el umbral que mejor haga predecir a nuestra red los resultados esperados. Para la determinación de estas variables, se sigue un proceso adaptativo. Se comienza con unos valores aleatorios, y se van modificando según la diferencia entre los valores deseados y los obtenidos por la red.
En resumen, el perceptrón simple aprende iterativamente siguiendo estos pasos:

1. Inicialización de variables
2. Bucle de iteraciones:
    a) Bucle para todos los ejemplos
        1) Leer valores de entrada
        2) Calcular error
        3) Actualizar pesos según el error
            a′ Actualizar pesos de entradas
            b′ Actualizar el umbral
    b) Comprobar que el vector de pesos es correcto
3. Salida

Capacidades de un perceptrón simple

Hasta ahora, hemos descrito el perceptrón como un clasificador. Sin embargo, también pueden ser usados para emular funciones lógicas elementales como AND, OR y NAND. Consideremos las funciones AND y OR. Dado que son funciones linealmente separables, pueden ser aprendidas por un perceptrón.
Sin embargo, la función XOR no puede ser aprendida por un único perceptrón, ya que requiere

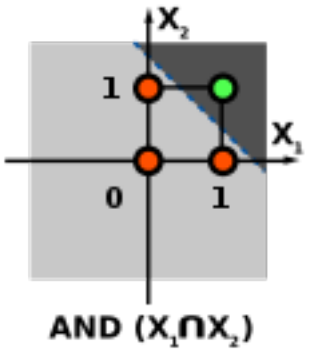


Figura 2.13: Separacion lineal de la funcion AND.
Imagen extraída de Wikipedia

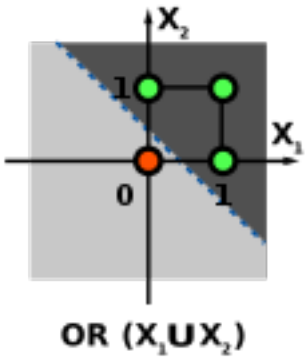


Figura 2.14: Separacion lineal de la funcion OR.
Imagen extraída de Wikipedia

el uso de al menos dos lineas para separar las clases. Si se quiere alcanzar esta funcionalidad, es necesario utilizarse al menos una capa mas. Aquí es donde entra en juego el perceptrón multicapa.

2.3. Perceptron multicapa

El perceptrón muticapa tuvo su origen en los años 80, con la idea de solucionar el mayor problema del perceptrón simple: no ser capaz de aprender funciones no linealmente separables (como es el caso de la función XOR). Se ha demostrado que es un aproximador universal de funciones.
El perceptrón multicapa es un modelo de red neuronal con alimentación hacia delante, es decir, con conexiones sin bucles (tipo de red feedforward). Está compuesto de varias capas ocultas entre la entrada y la salida de la misma, y caracterizado por tener salidas disjuntas pero relacionadas entre si, ya que la salida de una neurona es la entrada de la siguiente.

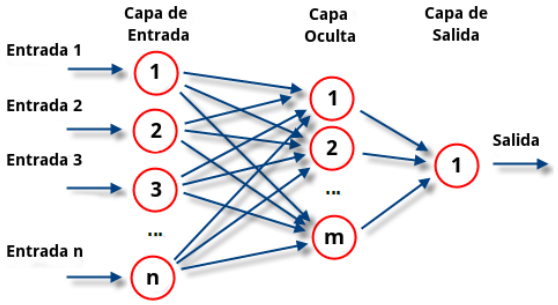


Figura 2.15: Perceptrón multicapa.
Imagen extraída de Wikipedia

Las capacidades de decisión de un perceptrón multicapa de 2 y 3 capas con una única neurona de salida se muestran en la figura **??**:
En el perceptrón multicapa, al igual que en el perceptrón simple, podemos diferenciar una fase de propagación de los valores de entrada hacia delante, y una fase de aprendizaje en la que los errores obtenidos a la salida del perceptrón se van propagando hacia atrás con el objetivo de actualizar los pesos de las conexiones mediante el gradiente de la función de error. Este algoritmo se llama backpropagation o retropropagación.

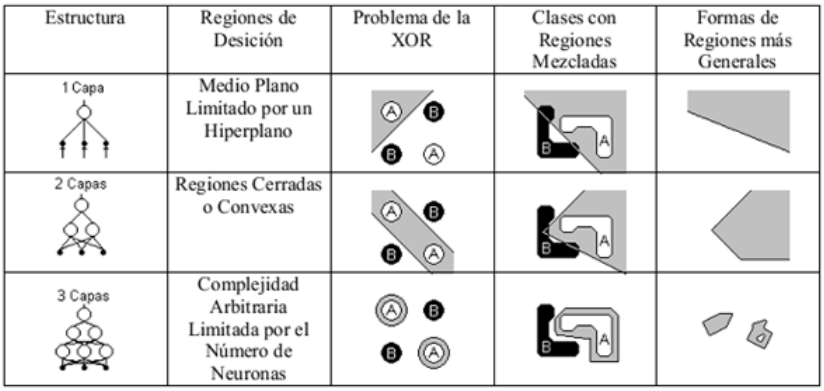


Figura 2.16: *Imagen extraída de GitHub*

2.3.1. Propagación

Imaginemos un perceptrón multicapa con C capas. Llamemos $W^C = W_{ij}^c$ a la matriz de pesos de la capa c y $c+1$, donde W_{ij}^c representa el peso de la neurona i de la capa c a la neurona j de la capa c+1. Denominaremos $U^C = u_i^c$ al vector de umbrales de las neuronas de la capa c. Se denomina a_i^c a la activación o entrada de la neurona i de la capa c. Las activaciones de las neuronas se calculan de forma distinta dependiendo de la capa en la que nos encontremos.

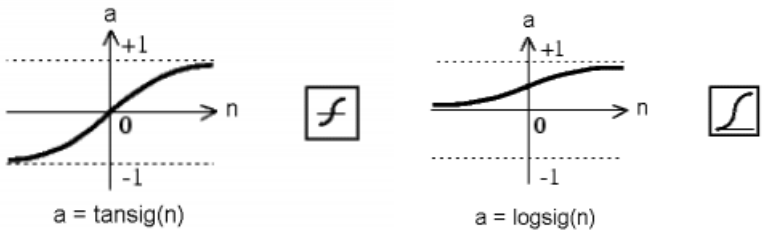
- Capa de entrada: la activación se corresponde con el patrón de entrada del perceptrón.
- Capa oculta: la activación procede de las salidas de las capas anteriores conectadas a las neuronas de esta capa. Esta activación se calcula como la suma de los productos de las activaciones que reciben las neuronas de las capas anteriores multiplicadas por su peso, añadiendoles el umbral, es decir:

$$a_i^c = f(\sum_{j=1}^{n_{c-1}} w_{ji}^{c-1} a_j^{c-1} + u_i^c) \tag{2.14}$$

- Capa de salida: ocurre lo mismo que en las capas ocultas, salvo que ahora la salida de las neuronas se corresponde con la salida de la red.

La función f es a lo que llamamos función de activación. Las funciones de activación mas utilizadas en el perceptrón multicapa son la función sigmoidal y la función tangente hiperbólica. Ambas poseen un intervalo continuo dentro de [0,1] y [-1,1] y vienen dadas por las siguientes ecuaciones.

- Función sigmoidal $f_{sigm}(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$
- Función tangente hiperbólica $f_{thip}(x) = \frac{1-e^{-x}}{1+e^{-x}}$



Ambas funciones están relacionadas mediante la expresión $f_{thip}(x) = 2f_{sigm}(x) - 1$, por lo que la utilización de una u otra depende de cual sea mas compatible con el tipo de patrón que se

va a utilizar. La función sigmoidal tiene un nivel de saturación inferior igual a 0, y la tangente hiperbólica lo tiene a -1.
Normalmente, la función de activación suele ser la misma para todas las neuronas de la red exceptuando las neuronas de la capa de salida, que suelen utilizar dos funciones distintas: la función identidad, y la función sigmoidal.

2.3.2. Consideraciones de diseño

A la hora de diseñar un perceptrón multicapa para abordar un problema, el primer paso es determinar la arquitectura de la red. Esto implica determinar tres variables, ya explicadas anteriormente:

- Función de activación: se elige según el comportamiento y el recorrido deseado, pero no influye en la capacidad de la red para resolver el problema.
- Número de neuronas de entrada y de salida: viene dado por la definición del problema. En ocasiones esta afirmación no tiene porque ser del todo cierta, y se ha de proceder a hacer un análisis previo basándose en técnicas de análisis de correlación, de sensibilidad, de importancia relativa...
- Número de capas ocultas: pese a ser una variable que ha de definir el diseñador, no existe un método que determine el numero óptimo de neuronas ocultas necesarias para resolver un problema, ya que existen muchos tipos de arquitectura capaces de resolver un mismo problema. Uno de los métodos, por ejemplo, sería partir de una arquitectura ya entrenada, e ir realizando pequeños cambios en el numero de neuronas/capas ocultas para buscar así el diseño óptimo.

2.3.3. Algoritmo de Retropropagación o Backpropagation

Como se ha comentado anteriormente, el proceso de aprendizaje del perceptrón multicapa consiste en propagar hacia atrás cierta información desde la salida del perceptrón hasta su entrada. Esta información será el error entre la salida obtenida y la salida esperada, con el objetivo de que en las siguientes iteraciones la salida obtenida se aproxime lo máximo posible a la salida esperada. Por tanto, nos encontramos ante un algoritmo de aprendizaje supervisado.
Hay muchas funciones de error que se pueden utilizar, pero el perceptrón multicapa usa habitualmente la función cuadrático medio, que se define como:

$$e(n) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n_c}(s_i(n) - y_i(n))^2 \tag{2.15}$$

siendo n cada una de las iteraciones del aprendizaje. El error obtenido $e(n)$ es el error de una sola iteración, por lo que si queremos entrenar la red con varios patrones, el error medio de esta será $E = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} e(n)$. En resumen, el perceptrón multicapa aprende encontrando el mínimo de la función de error.
Aunque el aprendizaje debe llevarse a cabo minimizando el error total, los meétodos más utilizados son los basados en métodos de gradiente estocástico, que consisten en minimizar el error en cada patrón $e(n)$. Por tanto, aplicando el método de gradiente descendiente, cada peso de la red w se actualiza para cada patrón de entrada n, y siendo α la tasa de aprendizaje, de acuerdo con la siguiente ecuación:

$$w(n) = w(n-1) - \alpha\frac{\partial e(n)}{\partial w} \tag{2.16}$$

Dado que las neuronas de la red están agrupadas en capas ocultas según niveles, es posible aplicar el método del gradiente descendente de forma eficiente en todas las neuronas, llevando a cabo el algoritmo de retropropagación o regla delta generalizada.

2.3.4. Regla delta generalizada

Como ya se ha comentado, la regla delta generalizada no es mas que una forma eficiente de aplicar el método de gradiente a los parámetros de la arquitectura (pesos y umbrales). Su aprendizaje es supervisado. Su uso consiste en ajustar pesos y bias tratando de minimizar la suma del error cuadrático. Para ello, se cambian dichas variables en la dirección contraria a la pendiente del error.
Las redes neuronales entrenadas mediante esta técnica, dan respuestas mas que razonables cuando al sistema se le presentan entradas que nunca había analizado antes. A una nueva entrada, le hará corresponder una entrada similar a la salida obtenida para un patrón de entrenamiento, siendo éste similar al patrón presentado a la red. Esta es una de las grandes propiedades de la regla delta, su capacidad de generalicación.

2.3.5. Tasa de aprendizaje

La tasa de aprendizaje (α) es un parámetro que determina la velocidad a la que van a cambiar los pesos de las conexiones de la red. Tiene generalmente un rango [0,1], siendo los valores mas cercanos a cero los que hacen que los pesos cambien poco a poco, acercándose lentamente a la convergencia, y los cercanos a uno los que hacen que la red converja mas rápidamente al principio, pero siendo posible que los pesos oscilen demasiado al encontrar el peso óptimo final. Por esta razón es importante encontrar una tasa de aprendizaje óptima.
Aquí es donde entra en juego un segundo término llamado momento (η), que pondera cuánto queremos que influya lo que los pesos han cambiado en la anterior iteración. Con ello, sabremos que si los pesos han cambiado mucho, es que estamos aun lejos del valor de la tasa de aprendizaje óptimo, por lo que avanzaremos en su búsqueda más rápidamente. Por otro lado, si los pesos no han cambiado apenas, sabremos que el valor óptimo de α está cerca.
Si se modifica la ecuación 2.16 para añadir esta mejora, quedaría de la siguiente manera:

$$w(n) = w(n-1) = -\alpha \frac{\partial e(n)}{\partial w} + \eta \Delta w(n-1) \tag{2.17}$$

siendo $\Delta w(n-1) = w(n-1) - w(n-2)$ el incremento que sufrió el parámetro w en la anterior iteración.

2.3.6. Sobreajuste y early stopping

El sobreajuste o overfitting es el efecto secundario de sobreentrenar un algoritmo de aprendizaje con ciertos datos para los que ya se conoce el resultado deseado. El algoritmo debe alcanzar un estado en el cual sea capaz de predecir otros casos a partir de lo ya aprendido mediante datos de entrenamiento, generalizando para poder resolver distintas situaciones a las ya presentes durante el entrenamiento. No obstante, cuando un sistema se entrena demasiado o se entrena con datos extraños, el algoritmo tiende a quedarse ajustado a unas características muy especificas de los datos de entrenamiento que no representan un estado general del problema. En este estado, nuestro diseño es más eficaz al responder a muestras del conjunto de entrenamiento, pero ante nuevas entradas el resultado empeora.

Una manera de resolver este problema es extraer un conjunto de entradas del dataset de entrenamiento, y utilizarlo de manera auxiliar a modo de validación. Ya que este subconjunto se deja al margen durante el entrenamiento, su objetivo será evaluar el error en la red tras cada epoch, para determinar cuando éste empieza a aumentar. Cuando aumente, se prodecerá a detener el entrenamiento y se conservarán los valores de los pesos del ciclo anterior. A este método se le conoce como early-stopping.

2.4. Redes neuronales convolucionales

Las redes neuronales convolucionales son muy similares a las redes neuronales ordinarias descritas hasta ahora, como el perceptrón multicapa. Las neuronas tienen pesos, sesgos, reciben una entrada con la que realiza un producto escalar y sobre la que aplica una función de activación, tienen una función de perdida...
Sin embargo, se utilizan principalmente para resolver el mayor problema que tienen las redes neuronales ordinarias: el tratamiento de imágenes. Pese a que con las redes neuronales estándar es posible manejar imágenes (veremos el ejemplo del MNIST en el apartado 4.3), en cuanto las imágenes aumentan su tamaño y calidad esto se vuelve intratable. Al tratarse de neuronas totalmente conectadas, provocaríamos un desperdicio de recursos así como un rápido sobreajuste. Las redes neuronales convolucionales trabajan dividiendo y modelando la información en partes mas pequeñas, y combinando esta información en las capas mas profundas de la red. Por ejemplo, en el caso del tratamiento de una imagen, las primeras capas tratarían de detectar los bordes de las figuras. Las siguientes capas buscarían combinar los patrones de detección de bordes para conseguir formas mas simples, y aplicar patrones de posición de objetos, iluminación... Por ultimo, en las últimas capas se intentará hacer coincidir la imagen con todos los patrones descubiertos, para conseguir una predicción final de la suma de todos ellos. Así es como las redes neuronales convolucionales consiguen modelar una gran cantidad de datos, dividiendo previamente el problema en partes para conseguir predicciones mas sencillas y precisas.

2.4.1. Estructura

En general, todas las redes neuronales convoluciones están formadas por una estructura compuesta por 3 tipos de capas:

Capa convolucional

Esta capa le da nombre de la red. En vez de utilizar la multiplicación de matrices como en la redes neuronales estándar, se aplica una operación llamada convolución. Esta operación recibe como entrada una imagen, y sobre ella aplica un filtro que nos devuelve su mapa de características, reduciendo así el tamaño de sus parámetros. La convolución utiliza tres ideas que ayudan a mejorar cualquier sistema sobre el que se aplique machine learning:

- **Iteracciones dispersas**: Al aplicar un filtro de menos tamaño sobre la entrada, reducimos bastante el numero de parámetros y cálculos.
- **Parametros compartidos**: Compartir parámetros entre los distintos tipos de filtros ayuda a mejorar la eficiencia del sistema.
- **Representaciones equivariantes**: Si las entradas cambian, las salidas cambian de forma similar.

Además, la convolución proporciona herramientas para trabajar con entradas de tamaño variable, lo cual es muy útil cuando se trabaja con imágenes (cada imagen tiene un numero distinto de píxeles). Se basa en un operador matemático que transforma dos funciones f y g, en una tercera, que en cierto sentido, representa la magnitud en la que se superponen f y una versión trasladada y rotada de g.

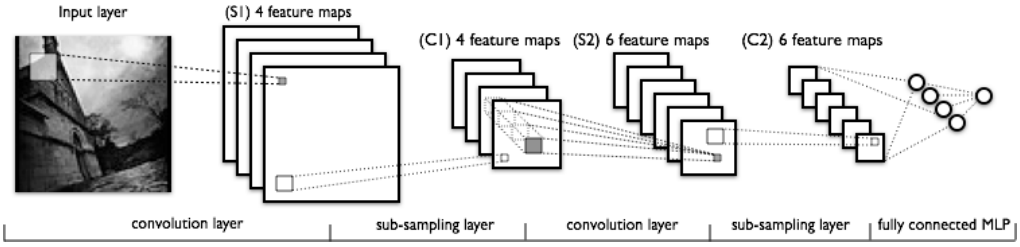


Figura 2.17: Funcionamiento de capa convolucional.
Imagen extraída de deeplearning.net

Capa de reducción o pooling

Esta capa se coloca generalmente después de la capa convolucional. Es la encargada de reducir la cantidad de parámetros a analizar reduciendo las dimensiones espaciales (ancho x alto), quedándose de esta forma con las características mas comunes. La operación que lleva a cabo esta capa también se llama reducción de muestreo, ya que la reducción de tamaño implica también una perdida de información. Sin embargo, para un red neuronal, este tipo de pérdida puede ser beneficioso debido a:

- La reducción del tamaño provoca una menor sobrecarga de calculo en las próximas capas de la red.
- Reduce habitualmente el sobreajuste.

La operación que se suele aplicar en esta capa es "max-pooling", que divide la imagen de entrada en un conjunto de rectángulos, y respecto a cada uno de ellos, se queda con el valor máximo.

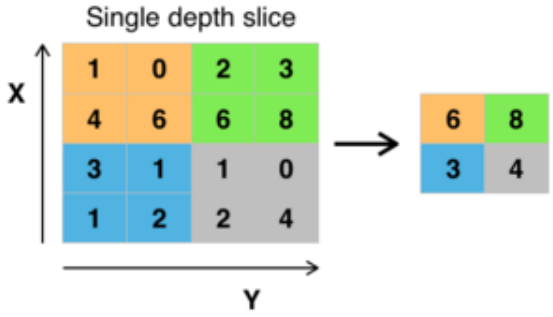


Figura 2.18: Max-pooling aplicado a una imagen
Imagen extraída de Wikipedia

Capa clasificadora totalmente conectada

Una vez que la imagen ha pasado tanto por las capas convolucionales como las de pooling y se han extraído sus características mas destacadas, los datos llegan a la fase de clasificación.

Para ello, ías redes convolucionales normalmente utilizan capas completamente conectadas en las que cada píxel se trata como una neurona independiente. Las neuronas de esta fase funcionan como las de un perceptrón multicapa, donde la salida de cada neurona se calcula multiplicando la salida de la capa anterior por el peso de la conexión, y aplicando a este dato una función de activación.

2.5. Redes neuronales recurrentes

Los humanos no empiezan a pensar de cero a cada segundo. Por ejemplo, mientras leemos, entendemos cada palabra basándonos en el contexto que forman las palabras previas. No desperdiciamos los ideas anteriores, sino que estas tienen persistencia en la memoria.
Las redes neuronales tradicionales no cuentan con esta capacidad, y es su mayor defecto. Por ejemplo, imaginemos el caso en el que queremos clasificar que clase de evento está pasando en una punto de una película. No está muy claro cómo una red neuronal tradicional podría usar razonablemente las escenas anteriores para predecir las siguientes.
Y aquí es donde entran en juego las redes neuronales recurrentes, ya que estas sí resuelven este problema. Su principal característica es que son redes con bucles, que permiten que la información persista.

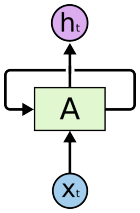


Figura 2.19: Ejemplo básico de red neuronal recurrente.
Imagen extraída de GitHub

En el diagrama 2.18, podemos ver como una parte de la red neuronal, **A**, recibe una entrada **x** y devuelve una salida **h**. El bucle permite que la información pase de un ciclo de la red al siguiente. Pese a que el concepto de bucle parezca algo extraño, las redes neuronales que cuentan con ellos no son tan distantes de la redes neuronales tradicionales. Una red neuronal recurrente puede ser creada utilizando múltiples copias de la misma red, pasando el mensaje o salida al nodo sucesor. Si desenrollamos el bucle, tendríamos algo parecido a la figura 2.19:

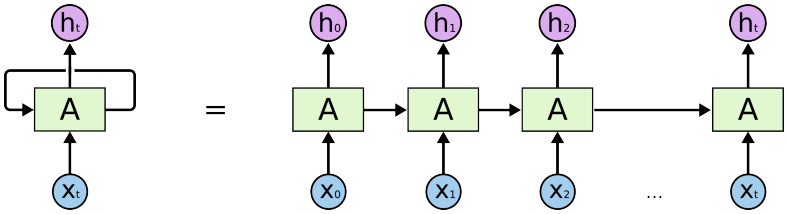


Figura 2.20: Red neuronal recurrente desenrollada.
Imagen extraída de GitHub

Esta forma de cadena hace prever que las redes neuronales recurrentes están íntimamente relacionadas con secuencias y listas. En los últimos años, se han logrado auténticos grandes éxitos aplicando las RNN para resolver problemas como: reconocimiento de discursos, modelación de lenguajes, traducciones, captación de imágenes... Un factor clave en estos éxitos es el uso de las redes LSTMs, un tipo muy especial de redes neuronales recurrentes que trabajan por muchas razones de forma mas eficiente que la versión estándar.

El problema de la longitud de las dependencias.

Uno de los intereses de las RNNs es la idea de conectar información antigua con la tarea actual. En temas de vídeo, sería útil por ejemplo utilizar frames anteriores para entender el frame actual, pero... ¿pueden las RNN hacer esto? La respuesta es, depende.
Algunas veces, solo necesitamos utilizar información reciente para la tarea actual. Por ejemplo, en temas de modelación de lenguaje, para adivinar la siguiente palabra en un contexto, en la mayoría de los casos bastaría con analizar la frase en la que se encuentra. Sin embargo, hay casos en los que se necesita acceder a un contexto mas grande. Desafortunadamente, a medida que el espacio entre la información requerida y la tarea actual aumenta, las RNN tardan cada vez más en aprender a conectar la información.

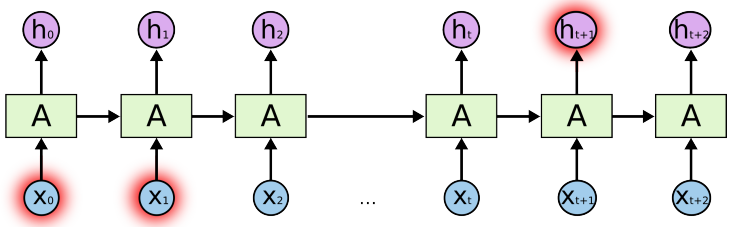


Figura 2.21: Red neuronal recurrente desenrollada.
Imagen extraída de GitHub

En teoría, las RNN son perfectamente capaces de resolver este problema (long-term dependencies), pero en la práctica no lo parece tanto. En 1991, Hochreiter estudió este problema, y encontró algunas razones por las que las RNN encuentran dificultades a la hora de aprender información sobre grandes contextos. Por suerte, las redes LSTMs solventan estos problemas.

2.5.1. Redes LSTM

Las redes Long Short Term Memory (normalmente llamadas LSTMs) son un tipo especial de redes neuronales recurrentes descritas por primera vez en 1997 por Hochreiter & Schmidhuber, capaces de aprender una larga lista de dependencias en largos periodos de tiempo.
Todas las redes neuronales recurrentes tienen forma de cadena al repetir sus módulos. En las RNN estándar, el modulo repetidor tiene una estructura muy simple, con una sola capa, como podría ser la de tipo tanh. Las redes LSTM tambien tienen forma de cadena, pero el modulo repetidor en vez de tener una sola capa, tiene cuatro.

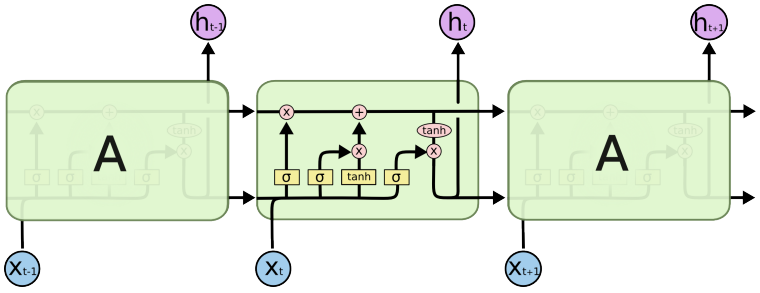


Figura 2.22: Estructura del modulo repetidor.
Imagen extraída de GitHub

La clave de las redes LSTMs se encuentra en el estado de la celda, es decir, en la linea horizontal que recorre la parte superior del diagrama 2.21, ya que permite a la información fluir por toda la red con solo algunas pequeñas interacciones, sin ser a penas alterada. La red también tiene

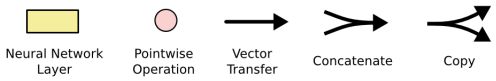


Figura 2.23: Notación del modulo repetidor.
Imagen extraída de GitHub

la habilidad de borrar o añadir información al estado de la celda mediante estructuras llamadas puertas. Estas puertas son una manera de permitir opcionalmente a la información circular o no, y se componen de una capa sigmoide y una operación de multiplicación. Las salidas de la capa sigmoide alternan entre 0 y 1, describiendo si la información fluye o no. Una red LSTM tiene 3 de estas puertas, para proteger y controlar el estado de la celda.

Las redes neuronales LSTM siguen una serie de pasos para decidir qué información se va a ir almacenando o borrando. Podemos destacar los siguientes:

1. **Decidir qué información despreciar**. Esta decisión la toma la capa sigmoide, que devuelve una salida igual a 1 si se busca mantener la información, o 0 si queremos deshacernos de ella.
   Volvamos al ejemplo de modelado del lenguaje, donde se quiere predecir una palabra basándose en las anteriores. En este problema, el estado de la celda puede almacenar el género del sujeto para usar los pronombres adecuados. Cuando nos encontremos un nuevo sujeto, olvidaremos el genero del anterior ya que no será de utilidad.

2. **Decidir que información se va a almacenar**. Consta de dos partes: primero, una capa sigmoide decide que valores son actualizados. Después, una capa tanh crea un vector con los nuevos valores candidatos, que pueden ser añadidos al estado.
   En el ejemplo anterior, se decidiría que queremos añadir el género del nuevo sujeto al estado de la celda, para reemplazar el viejo que queremos olvidar.

3. **Actualizar el estado de la celda**. En el paso anterior se decide que hacer, y ahora toca hacerlo. Se multiplica el viejo estado por la salida de la capa sigmoide del primer paso, olvidando así las cosas que decidimos olvidar. A esto, se le suma el producto de la salida de la capa sigmoide y de la capa tanh del segundo paso. Con ello, se consiguen saber los nuevos valores candidatos, escalados según la decisión de actualizar el estado de la celda.
   En el caso de modelado de lenguaje, ahora es cuando se desecha la información sobre el género del viejo sujeto, y se añade la nueva información, como decidimos en los pasos anteriores.

4. **Decidir la salida basandonos en el estado de la celda, pero de manera filtrada**. Primero, mediante una capa sigmoide, se decide que partes del nuevo estado de la celda se van a sacar como salida. Después, se pasa el estado de la celda por una capa tanh para tener valores entre -1 y 1, y lo multiplicamos por la salida de la capa sigmoide, para sacar solo las partes que decidamos.
   En el ejemplo de modelado de lenguaje, una vez que se encuentre el nuevo sujeto, se sacará información a cerca de él como puede ser si éste es singular o plural, para después poder conjugar correctamente el verbo que le sigue.

Como se ha comentado anteriormente, la mayoría de los mejores resultados utilizando redes recurrentes, es mediante las redes LSTMs. Pero a pesar de que su descubrimiento ha sido un gran hito, todavía quedan metas por cumplir. Una de ellas sería dotar a las RNN de una capacidad para decidir que información consultar en una fuente muy grande de información. Por ejemplo, si estamos usando redes RNN para crear un titulo que describa una imagen, sería útil elegir que partes de la imagen usar para cada palabra.

Capítulo 3

Keras

3.1. Introducción

Keras es una librería de redes neuronales escrita en Python y capaz de correr tanto en Tensorflow como en Theano. Sus principales características son:

- Fácil y rápido prototipado gracias a su modularidad, minimalismo y extensibilidad.
- Soporta tanto redes neuronales convolucionales como recurrentes (así como la combinación de ambas)
- Soporta esquemas de conectividad arbitrarios (incluyendo entrenamiento multi-entrada y multi-salida)
- Corre en CPU y GPU
- Es compatible con Python 2.7-3.5

3.2. Instalación

Para la instalacion de Keras, son necesarias las siguientes dependencias:

- numpy y scipy
- pyyaml
- HDF5 y h5py (Opcional, pero requírido si se usan funciones para cargar/guardar modelos)
- cuDNN (Opcional pero recomendado si se usan CNNs)
- Tensorflow o Theano

Existen 2 modos de instalacion:

- Desde PyPI: `sudo pip install keras`
- Desde repositorio Keras (https://github.com/fchollet/keras/tree/master/keras): `sudo python setup.py install`

Por defecto, Keras usa Tensorflow como motor backend. Sin embargo, esta opción puede ser configurada. La primera vez se ejecuta Keras, se crea un fichero de configuración en /.keras/keras.json", que puede ser modificado.

```
"image_dim_ordering": "tf",
"epsilon": 1e-07,
"floatx": "float32",
"backend": "tensorflow"
```

3.3. Modelos

Hay 2 tipos de modelos disponibles para su implementacion en Keras: el modelo secuencial, y la clase Model (más general). Ambos modelos presentan varias funciones en común, como `summary()`, `get_config()` o `to_json()` que devuelven información basica sobre el modelo, o `get\_weights()` y `set\_weights()`, las funciones getter y setter para los pesos del modelo.

3.3.1. Modelo secuencial

Las funciones básicas del modelo secuencial son:

- `compile(self, optimizer, loss, metrics=[], sample_weight_mode=None)` : Configura el proceso de aprendizaje.
- `fit(self, x, y, batch_size=32, nb_epoch=10, verbose=1, callbacks=[], validation_split=0.0, validation_data=None, shuffle=True, class_weight=None, sample_weight=None)` : Entrena el modelo para un número fijado de ciclos.
- `evaluate(self, x, y, batch_size=32, verbose=1, sample_weight=None)` : Calcula la función de perdida dados unos datos de entrada, lote por lote.
- `predict(self, x, batch_size=32, verbose=0)` : Genera predicciones para unos valores de entrada.

3.3.2. Clase Model de la API

Con la clase Model, dadas una entrada y una salida, podemos inicializar nuestro modelo de la siguiente forma:

```
a = Input(shape=(32,))
b = Dense(32)(a)
model = Model(input=a, output=b)
```

En caso de que tengamos múltiples conjuntos de entradas y de salidas, también podríamos inicializarlo de la siguiente manera:

```
model = Model(input=[a1, a2], output=[b1, b3, b3])
```

3.4. Capas

3.4.1. Funciones básicas de las capas

A la hora de diseñar las capas de nuestra red neuronal, tenemos una serie de funciones disponibles:

- Dense: Para capas regulares totalmente conectadas.
  `keras.layers.core.Dense(output_dim, init='glorot_uniform', activation='linear', weights=None , W_regularizer=None, b_regularizer=None, activity_regularizer=None, W_constraint=None, b_constraint =None, bias=True, input_dim=None)`
  Ejemplo de uso: `model.add(Dense(32, input_dim=16))` sería un modelo que contaría con una array de entrada de tamaño 16, y de salida de 32.

- Activation: Se aplica una función de activación a una salida. Las principales funciones que nos ofrece Keras son:

  - softmax: generalización de la función logística.
  - softplus
  - softsign
  - relu: función rectificadora
  - tanh: función tangente hiperbólica
  - sigmoid: función sigmoide
  - hard_sigmoid
  - linear: función lineal

  Podemos encontrar funciones de activación mas avanzadas como PReLu o LeakyReLU en el modulo `keras.layers.advanced_activations`.
  Ejemplo de uso: `model.add(Activation('tanh'))`

- Dropout: Proporciona una manera simple de prevenir que se produzca sobreajuste.
  `keras.layers.core.Dropout(p)`

- Reshape: Transforma la salida en una forma concreta.
  Ejemplo de uso: `model.add(Reshape((3, 4), input_shape=(12,)))` definiría una capa de salida de 3x4 para nuestro modelo.

- Permute: Transforma la dimensión de la entrada en un patrón definido.
  Ejemplo de uso: `model.add(Permute((2, 1), input_shape=(10, 64)))`

3.4.2. Capas convolucionales

Keras presenta diversas funciones para desarrollar capas convolucionales según las dimensiones de su entrada. La mas destacable, a modo de ejemplo, podría ser:
`Convolution2D(nb_filter, nb_row, nb_col, init='glorot_uniform', activation=None, weights=None, border_mode='valid', subsample=(1, 1), dim_ordering='default', W_regularizer=None, b_regularizer =None, activity_regularizer=None, W_constraint=None, b_constraint=None, bias=True)`

Además de la versión en 2D, Keras nos ofrece funciones para entradas de 1 dimensión o 3 dimensiones. A parte, tenemos funcionalidades para desarrollar capas convolucionales dilatadas (AtrousConvolution2D), hacer deconvolución (Deconvolution2D), cropping (Cropping2D)...

3.4.3. Capas pooling

Al igual que ocurre con las capas convolucionales, Keras ofrece un buen numero de funciones para desarrollar capas pooling en redes convolucionales, dependiendo de las dimensiones de la entrada. Como en el caso anterior, una función representativa sería:
`MaxPooling2D(pool_size=(2, 2), strides=None, border_mode='valid', dim_ordering='default')`

Si en vez de utilizar la función máximo se requiere que nuestra capa utilice otro tipo de algoritmos, Keras también nos ofrece funciones como: AveragePooling2D, GlobalMaxPooling2D, GlobalAveragePooling2D... Además de sus variantes para 1D y 3D.

3.4.4. Capas recurrentes

Keras presenta 3 tipos de capas recurrentes:

- SimpleRNN : Red recurrente totalmente conectada cuya salida realimenta la entrada.
- LSTM : Long-Short Term Memory unit
- GRU : Gated Recurrent Unit

3.5. Preprocesado

Keras cuenta con una serie de funciones para procesar tanto modelos secuenciales, como texto, como imágenes. Las más importantes son:

- Modelos secuenciales: `pad_sequences(...)` transforma una lista en un array 2D.
- Texto: `text_to_word_sequence(...)` separa una frase en palabras, `one_hot(...)` codifica un texto en una lista de palabras indexadas en un vocabulario de tamaño n...
- Imágenes: `ImageDataGenerator(...)` genera ciclos con los datos de la imagen con aumento en tiempo real.

3.6. Funciones de pérdida

La función de perdida es uno de los dos parámetros necesarios para compilar un modelo. Algunas de las funciones mas conocidas que nos proporciona Keras son:

- `mean_squared_error(y_true, y_pred)` : Calcula el error cuadrático medio.
- `mean_absolute_error / mae` : Calcula el error medio absoluto.
- `binary_crossentropy`: Calcula la entropía cruzada en problemas de clasificación binaria. También conocida como perdida logarítmica.

3.7. Optimizadores

El optimizador es otro de los dos valores necesarios para compilar un modelo (junto con la función de pérdida). En los ejemplos que se describirán mas adelante, se usará el optimizador Adam.

- `Adam(lr=0.001, beta_1=0.9, beta_2=0.999, epsilon=1e-08, decay=0.0)`

Adam es un algoritmo para la optimización basado en el gradiente de primer orden de funciones estocásticas objetivas. Está basado en estimaciones adaptativas de momentos de orden inferior. Este método es sencillo de implementar, es eficiente computacionalmente hablando, necesita poca capacidad de memoria, y es muy bueno en problemas con una gran cantidad de datos y/o parámetros.

3.8. Activadores

El modo de activación puede ser implementado mediante una capa Activation (`model.add(Dense(64)); model.add(Activation('tanh'))`, o mediante un parámetro que soportan todas las capas (`model.add(Dense(64, activation='tanh'))`).
Las funciones más comunes son:

- softmax
- softsign
- tanh
- sigmoid
- linear

3.9. Callbacks

Los callbacks son una serie de funciones que pueden ser aplicadas en ciertos momentos del proceso de entrenamiento. Estos callbacks pueden ser utilizados para echar un vistazo a los estados internos así como a las estadísticas del modelo que estamos entrenando. Para utilizarlos, basta con pasar como argumento a la función `fit(...)` una lista de métodos, que serán llamados en cada fase del entrenamiento.
Las principales funciones son:

- `BaseLogger()`: Se aplica en todo modelo de Keras, y acumula la media de las métricas por ciclo.
- `Callback()`: Clase base abstracta, utilizada para crear nuevos callbacks. Como parámetros, recibe los propios para configurar el entrenamiento (numero de ciclos, verbosidad...), así como la instancia del modelo que queremos entrenar.
- `ProgbarLogger()`: Callback que pinta métricas en la salida estándar (stdout).
- `History()`: Callback aplicado en cada modelo Keras, que almacena eventos en un objeto de tipo History.
- `ModelCheckpoint(...)`: Almacena el modelo después de cada ciclo. Como argumentos recibe el fichero donde dejar la información, la cantidad de de elementos a monitorizar, el modo de verbosidad, un booleano para decidir si sobreescribir o no el mejor modelo, el modo, y otro booleano para guardar solo pesos o información de todo el modelo.

3.10. Datasets

Keras cuenta con una serie de dataset ya predefinidos y listos para realizar nuestras pruebas:

- **CIFAR10**: dataset que cuenta con 50.000 imágenes a color de entrenamiento, a clasificar en 10 categorías, y 10.000 imágenes para testear los resultados. También existe una versión con 100 categorías (**CIFAR100**).
- **Clasificación de sentimientos en reviews de IMDB**: Este dataset cuenta con 25.000 películas etiquetadas según el sentimiento (bueno/malo). Estas reviews han sido preprocesadas, y las palabras han sido indexadas según su frecuencia.
- **MNIST**: dataset que contiene 60.000 imágenes en blanco y negro de 10 tipos de dígitos, y 10.000 imágenes para testear los modelos.

3.11. Inicializadores

Los inicializadores definen la manera de inicializar los pesos de las capas de nuestro modelo. El argumento usado en para definir este inicializador en las capas es **init**. Las opciones mas comunes son:

- uniform
- normal
- identity
- zero

3.12. Regularizadores

Los regularizadores permiten aplicar penalizaciones en las capas durante la optimización. Estas penalizaciones se incorporan a la función de perdida que la red optimiza.
Ejemplo de uso: `model.add(Dense(64, input_dim=64, W_regularizer=l2(0.01), activity_regularizer =activity_l2(0.01)))`

3.13. Visualización

El módulo **keras.utils.visualize_util** proporciona funciones útiles para pintar gráficamente un modelo (acompañado del uso de graphviz). La siguiente función pintaría una gráfica del modelo y lo guardaría en un fichero .png.

```
plot(model, to_file='model.png')
```

3.14. Wrapper para Scikit-Learn API

Keras presenta compatibilidad con Scikit-Learn API. Se pueden usar modelos Keras secuenciales como parte del ciclo de trabajo de Scikit-Learn mediante sus wrappers. Hay 2 disponibles:

- `KerasClassifier(build_fn=None, **sk_params)` : Implementa una interfaz de clasificación.
- `KerasRegressor(build_fn=None, **sk_params)` : Implementa una interfaz de regresión.

El primer argumento es la instancia de la clase o la función a llamar, y el segundo los parámetros del modelo y de ajuste.

Capítulo 4

Ejemplos de uso de Keras

4.1. Problema de diabetes - Regresión logística

Como primer ejemplo, se va a utilizar el dataset de diabetes en los indios americanos. Este conocido dataset se puede adquirir en el repositorio de UCI Machine Learning, y describe información médica de pacientes indios, así como si han tenido diabetes en los siguientes 5 años. La información médica especificada es la siguiente:

- Número de embarazos.
- Concentración de glucosa.
- Presión en sangre.
- Tamaño de la doblez de la piel en el triceps.
- Insulina
- Índice de masa corporal
- Función que representa el numero de antepasados con diabetes.
- Edad

4.1.1. Cargando datos

Cuando se trabaja con algoritmos de Machine Learning que usan números aleatorios, es una buena metodología de trabajo predefinir de antemano una semilla. Con ello, podremos correr el mismo código varias veces obteniendo el mismo resultado. Esta idea es bastante útil a la hora de demostrar un resultado, comparar distintos algoritmos, debuggear parte del código...
Se iniciará la generación de números aleatorios con la semilla que queramos, por ejemplo:

```
from keras.models import Sequential
from keras.layers import Dense
import numpy
seed = 7
numpy.random.seed(seed)
```

Nos encontramos ante un problema de clasificación binaria (tener diabetes representa salida 1, y no tenerla salida 0). Todas las variables que definen al paciente son numéricas, lo cual hace fácil su uso directamente en redes neuronales, que esperan datos némericos tanto en las entradas como en las salidas.
Una vez que tenemos descargado nuestra fuente de datos, podremos cargarla directamente usando la funcion **loadtxt()** de la libreria NumPy. En este dataset, podemos apreciar 8 datos de entrada, y 1 variable de salida (la ultima columna). Una vez cargado, podemos separar los datos en variables.

```
dataset = numpy.loadtxt("pima-indians-diabetes.csv", delimiter=",")
# split into input (X) and output (Y) variables
X = dataset[:,0:8]
Y = dataset[:,8]
```

4.1.2. Definiendo el modelo

Los módelos en Keras se definen como una secuencia de capas. La primera cosa de la que hay que asegurarse, es de que la capa de entrada tiene el número correcto de entradas. Esto se consigue especificándolo mediante el argumento **input_dim**, a la hora de crear la primera capa. Las capas totalmente conectadas se definen usando la clase Dense. Podemos especificar el número de neuronas de la capa utilizando el primer argumento, el método de inicialización con el segundo (**init**), y la función de activación usando el argumento **activation**.
En este caso, se inicializarán los pesos de la red con pequeños números aleatorios siguiendo una distribución uniforme (**'uniform'**) (entre 0 y 0.05, los pesos uniformes por defecto de Keras). Otro alternativa bastante común es utilizar pequeños números aleatorios de una distribucion Gaussiana (**'normal'**).
En este ejemplo, se usará la función de activacion rectificadora (**'relu'**) en las primeras dos capas, y la funcion sigmoide en la capa de salida. Las funciones sigmoide e hiperbólica solían ser las funciones de activación más utilizadas. Sin embargo, a día de hoy, se consiguen mejores resultados utilizando la función de activación rectificadora. La funcion sigmoide en la capa de salida será necesaria para asegurarse que la salida de nuestro modelo comprende valores entre 0 y 1.
La primera capa tendrá 12 neuronas y espera 8 variables de entrada. La segunda tiene 8 neuronas, y la ultima solo 1, la cual reflejará en su salida la predicción sobre si para los datos médicos introducidos como entrada, se tendrá diabetes o no.

```
model = Sequential()
model.add(Dense(12, input_dim=8, init='uniform', activation='relu'))
model.add(Dense(8, init='uniform', activation='relu'))
model.add(Dense(1, init='uniform', activation='sigmoid'))
```

4.1.3. Compilando el modelo

Una vez que se ha definido el modelo, el siguiente paso es compilarlo. Aquí es donde entra en juego el backend elegido (Theano o Tensorflow), ya que Keras utiliza sus librerías numéricas. El propio backend es el encargado de elegir la mejor forma para entrenar la red y de hacer predicciones con ella, utilizando la CPU, la GPU o ambas a la vez.
En la fase de compilación, se deben especificar algunas propiedades adicionales para entrenar la red (recordar que entrenar una red significa encontrar los mejores pesos para hacer predicciones de un problema). Debemos especificar la función de perdida para evaluar los pesos, el optimizador usado para elegir entre los diferentes pesos, y métricas opcionales para recoger y mostrar los datos durante el entrenamiento.
En este ejemplo, se utilizará una función de perdida logarítmica, que para los problemas de clasificación está definida en Keras como **"binary_crossentropy"**. Como optimizador se utilizará el algoritmo de gradiente descendiente **.ªdam"**, el cual usa Keras por defecto.
Finalmente, como se trata de un problema de clasificación, se recogerá y mostrará la eficiencia de la clasificación (argumento **.ªccuracy"**).

```
model.compile(loss='binary_crossentropy', optimizer='adam', metrics=['accuracy'])
```

4.1.4. Ajustando el modelo

Una vez compilado, el siguiente paso es ejecutar el modelo con los datos de entrada. Podemos entrenar o ajustar nuestro modelo cargando los datos utilizando la función **fit()**.
El proceso de entrenamiento se ejecutará para un número de iteraciones definido mediante el argumento **"nb_epoch"**. También podemos definir el numero de entradas que serán evaluadas antes de que haya una actualización de los pesos de la red mediante el argumento **"batch_size"**).
De nuevo, estas medidas pueden ser elegidas experimentalmente a base de prueba y error.

```
model.fit(X, Y, nb_epoch=150, batch_size=10)
```

4.1.5. Evaluando el modelo

Una vez entrenada la red neuronal, podemos evaluar el rendimiento de esta utilizando el mismo dataset. Esto nos puede dar una idea de como hemos modelado los datos de entrada, pero no tendremos idea de como de bien clasificará los nuevos datos nuestro modelo.
Para evaluar nuestra red, se utiliza la función **.evaluate()"**. En este ejemplo, se le pasarán las mismas entradas que cuando se entrenó la red, generando así una predicción por cada par de entrada-salida, además de mostrar información sobre las la perdida media y la precisión de nuestro modelo.

```
scores = model.evaluate(X, Y)
print("%s: %.2f%%" % (model.metrics_names[1], scores[1]*100))
```

4.1.6. Analizando datos

Al ejecutar el código, podemos ver un mensaje por cada 150 ciclos mostrando la perdida y la precisión de cada uno, seguido de los resultados finales.

```
Epoch 145/150
768/768 [==============================] - 0s - loss: 0.4674 - acc: 0.7734
Epoch 146/150
768/768 [==============================] - 0s - loss: 0.4779 - acc: 0.7682
Epoch 147/150
768/768 [==============================] - 0s - loss: 0.4694 - acc: 0.7786
Epoch 148/150
768/768 [==============================] - 0s - loss: 0.4661 - acc: 0.7826
Epoch 149/150
768/768 [==============================] - 0s - loss: 0.4702 - acc: 0.7669
Epoch 150/150
768/768 [==============================] - 0s - loss: 0.4724 - acc: 0.7760
 32/768 [>.............................] - ETA: 0s
 acc: 77.08%
```

El siguiente paso es adaptar el ejemplo anterior y utilizarlo para generar predicciones sobre el dataset de entrenamiento, simulando que nos encontramos ante un nuevo dataset que nunca hemos analizado previamente. Mediante la función **model.predict**, podremos realizar estas predicciones fácilmente.
Con las siguientes lineas, se mostrarán predicciones para cada entrada del dataset, que en su mayor parte, coincidirán con los datos de salida ya descritos en el dataset. Recordar que 1 es padecer diabetes, y 0 lo contrario.

```
predictions = model.predict(X)
rounded = [round(x) for x in predictions]
print(rounded)
```

4.2. Problema Boston Housing - Regresión lineal

4.2.1. Descripcion del problema

En este caso, nos encontramos ante un problema de regresión lineal. El dataset describe 13 propiedades numéricas de 506 casas de los suburbios de Boston, con el precio de dichas casas en millones de dolares. Como atributos de entrada, disponemos de:

- CRIM: ratio de crimen per capita por población.
- ZN: proporción de tierras residenciales zonificadas con mas de 25000 pies cuadrados.
- INDUS: proporción de acres no comerciales por ciudad
- CHAS: Charles River dummy variable (1 si el tramo se encuentra en el río, 0 en caso contrario)
- NOX: concentración de óxidos nítricos.
- RM: numero medio de habitaciones por vivienda.
- AGE: proporción de viviendas ocupadas construidas antes de 1940.
- DIS: distancias ponderadas a cinco centros de empleo.
- RAD: índice de accesibilidad a las autopistas radiales.
- TAX: ratio de impuestos a la propiedad por cada 10.000$
- PTRATIO: ratio de alumnos-profesores
- B: 1000(Bk - 0.63)$\hat{2}$ donde Bk es la proporción de ciudadanos negros por población.
- LSTAT: porcentaje de la población de clase baja.
- MEDV: valor medio de las casas ocupadas, en miles de dolares.

Un rendimiento razonable en modelos actuales usando el Error cuadrático medio (MSE) como método de evaluación está en torno a 20 (miles de dolares al cuadrado), o 4500$ si utilizamos la raíz cuadrada. Veamos si podemos igualar estos resultados.

4.2.2. Desarrollo de la red neuronal

Lo primero, será cargar todas las librerías necesarias, así como el dataset.

```
import numpy
import pandas
from keras.models import Sequential
from keras.layers import Dense
from keras.wrappers.scikit_learn import KerasRegressor
from sklearn.model_selection import cross_val_score
from sklearn.model_selection import KFold
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
from sklearn.pipeline import Pipeline

dataframe = pandas.read_csv("housing.csv", delim_whitespace=True, header=None)
dataset = dataframe.values

X = dataset[:,0:13]
Y = dataset[:,13]
```

En este ejemplo se crearán modelos en Keras, y serán evaluados utilizando la librería Scikit-learn. Esta librería Python open source de Machine Learning es bastante potente a la hora de evaluar modelos con pocas lineas de código.
El siguiente paso por tanto es crear el modelo de la red neuronal. Para el problema Boston-Housing basta con diseñar un modelo de red con una sola capa oculta totalmente conectada con el mismo numero de neuronas que de entradas (13). Como función de activación en la capa oculta se usa la función rectificadora. Para la capa de salida no se usa ninguna función de activación debido a que nos encontramos ante un problema de regresión, y el objetivo es predecir

valores numéricos directamente sin aplicarles ningún tipo de transformación. Como algoritmo de optimización usaremos ADAM, y como función de perdida el Error cuadrático medio. Estas métricas también serán usadas para evaluar el rendimiento del modelo. Se ha elegido esta métrica ya que al usar la raíz cuadrada, se nos presenta un valor de error directamente entendible en el contexto del problema (miles de dolares).

```
def baseline_model():
        model = Sequential()
        model.add(Dense(13, input_dim=13, init='normal', activation='relu'))
        model.add(Dense(1, init='normal'))
        model.compile(loss='mean_squared_error', optimizer='adam')
        return model
```

El wrapper de Keras para usar Scikit-Learn como un estimador de regresión se llama KerasRegressor. Podemos crear una instancia y pasarle como argumentos:
1. El nombre de la función que define la red neuronal (baseline_model())
2. Parámetros que se le pasarán a la funcion fit(), como el numero de ciclo o el tamaño de los lotes.
Como siempre, además se debe inicializar una semilla aleatoria constante para asegurarnos que la comparación de los modelos es consistente.

```
seed = 7
numpy.random.seed(seed)
estimator = KerasRegressor(build_fn=baseline_model, nb_epoch=100, batch_size=5, verbose=0)
```

El siguiente paso es evaluar el modelo. Para ello, usaremos una validación cruzada de 10 iteraciones.

```
kfold = KFold(n_splits=10, random_state=seed)
results = cross_val_score(estimator, X, Y, cv=kfold)
print("Results: %.2f (%.2f) MSE" % (results.mean(), results.std()))
```

Ejecutando todo el código veremos una estimación del rendimiento del modelo. El resultado muestra el error cuadrático medio incluyendo la media y la desviación típica a lo largo de las 10 iteraciones de la evaluación por validación cruzada.

```
Results: 38.04 (28.15) MSE
```

4.2.3. Mejorando los resultados

Aunque ya hayamos conseguido entrenar nuestra red para obtener resultados, existen muchas maneras de mejorar nuestro modelo. En este ejemplo, veremos 3:

- Modelar el dataset de entrada
- Aumentar el numero de capas
- Aumentar el numero de neuronas en las capas

Modelando el dataset

Un factor muy importante en el dataset de Boston-housing es que los atributos de entrada varían mucho sus escalas, ya que miden cantidades diferentes. Por este tipo de razones, siempre suele ser una buena practica preparar los datos antes de modelarlos usando nuestra red neuronal. Para ver la diferencia con esta mejora, se va a usar el mismo modelo de red neuronal que en el apartado anterior. Se va a usar el framework Pipeline de Scikit-Learn para estandarizar

el modelo de datos durante el proceso de evaluación dentro de cada pliegue de la validación cruzada. Esto asegura que no haya datos de nuestro set de entrenamiento sin evaluar en cada pliegue de la validación cruzada.

```
numpy.random.seed(seed)
estimators = []
estimators.append(('standardize', StandardScaler()))
estimators.append(('mlp', KerasRegressor(build_fn=baseline_model, nb_epoch=50, batch_size=5,
    verbose=0)))
pipeline = Pipeline(estimators)
kfold = KFold(n_splits=10, random_state=seed)
results = cross_val_score(pipeline, X, Y, cv=kfold)
print("Standardized: %.2f (%.2f) MSE" % (results.mean(), results.std()))
```

En el código anterior, se estandariza el dataset mediante la función **Pipeline**, y se evalúa el modelo desarrollado en el apartado anterior. Al ejecutar todo el código, vemos una mejora en el rendimiento respecto al modelo sin estandarizar los datos, mejorando el error en 10 dolares al cuadrado.

```
Standardized: 28.24 (26.25) MSE
```

4.2.4. Red neuronal más profunda

Otra manera de mejorar nuestra red neuronal es añadirle capas, lo cual permitirá al modelo extraer mas cantidad de características del dataset.
En este apartado evaluaremos el efecto de añadir más de una capa al modelo. Esto es tan fácil como crear una nueva función copia de la anterior, pero insertando nuevas lineas después de la primera capa oculta. En este ejemplo, tendrán la mitad de neuronas que la capa anterior.

```
def modelo_profundo():
        model = Sequential()
        model.add(Dense(13, input_dim=13, init='normal', activation='relu'))
        model.add(Dense(6, init='normal', activation='relu'))
        model.add(Dense(1, init='normal'))
        model.compile(loss='mean_squared_error', optimizer='adam')
        return model
```

Como podemos apreciar, los datos pasarán por una capa de de entrada de 13 neuronas, después por una de 6, para acabar en una capa de salida de una sola neurona.
La forma de evaluar el modelo será la misma que en el apartado anterior, usando la estandarización de los datos de entrada para mejorar aún mas el rendimiento.
Ejecutando todo el código podemos ver una mejora de 28 a 24 miles de dolares al cuadrado.

4.2.5. Red neuronal más ancha

Otra forma de incrementar la capacidad de nuestro modelo es crear un red mas ancha. En este apartado se evaluará el efecto de añadir a nuestra arquitectura una capa oculta con el doble de neuronas de las que tiene la capa de entrada.
De nuevo, se ha de definir una nueva función como en los ejemplos anteriores, pero que cuente con una capa oculta entre la capa de entrada y la de salida de 20 neuronas.

```
def modelo_ancho():
        model = Sequential()
        model.add(Dense(20, input_dim=13, init='normal', activation='relu'))
        model.add(Dense(1, init='normal'))
        model.compile(loss='mean_squared_error', optimizer='adam')
        return model
```

Como podemos ver, nuestros datos pasarán de una capa de entrada de 13 neuronas, a una capa oculta de 20, para luego acabar en una capa de salida de una sola neurona.
De nuevo, la forma de evaluar el modelo será la misma que en los dos apartados anteriores, usando la estandarización de los datos de entrada para mejorar el rendimiento.
Ejecutando el código podemos ver una mejora a 21 miles de dolares al cuadrado. No es nada mal resultado para este tipo de problema.
Como se ha comentado anteriormente, no es del todo fácil ver que con una red mas profunda se consigan mejores resultados en este tipo de problemas. Esto demuestra la importancia de tener que testear varios tipos de modelos, para conseguir así los mejores resultados.

4.3. MNIST - Perceptrón multicapa vs Red convolucional

El dataset MNIST fue desarrollado con el objetivo de evaluar modelos de redes neuronales utilizando el problema de clasificación de dígitos escritos a mano. Este dataset esta constituido por un gran numero de documentos escaneados por el National Institute of Standards and Technology (NIST), a los cuales se le han extraído y normalizado sus caracteres. Cada imagen es de 28x28 píxeles, y se usan 60.000 imágenes para entrenar el modelo, y otras 10.000 para probarlo.
Estamos hablando de una tarea de reconocimiento de dígitos. Al haber 10 dígitos (del 0 al 9), hay 10 clases para clasificar. El resultado se muestra mediante el error de predicción, que no es mas que el inverso de la eficacia de clasificación.
El state-of-art del error de predicción está en el 0,2 %, que puede ser alcanzado con grandes redes neuronales convolucionales en las que se aplican técnicas avanzadas como DropConnect, aumento de patrones, multi-columnas...

4.3.1. Cargando el dataset

Mediante la librería Keras, es posible descargarse el dataset de manera automática. Para ello, se llamará a la función `mnist.load_data()`, que almacenará la información en el directorio /.keras/datasets/mnist.pkl.gz. Con este pequeño script es posible visualizar las dos primeras imágenes:

```
from keras.datasets import mnist
import matplotlib.pyplot as plt
(X_train, y_train), (X_test, y_test) = mnist.load_data()
plt.subplot(221)
plt.imshow(X_train[0], cmap=plt.get_cmap('gray'))
plt.subplot(222)
plt.imshow(X_train[1], cmap=plt.get_cmap('gray'))
plt.show()
```

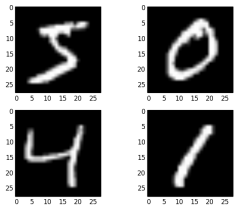


Figura 4.1: Patrones dataset MNIST

No es estrictamente necesario una red neuronal convolucional para conseguir buenos resultados

con el el dataset MNIST. Mediante una red neuronal sencilla, con una sola capa oculta, podemos alcanzar un ratio de error del 1.74 %. Se usará este dato como base para comparar más modelos de redes convolucionales más adelante.
Lo primero de todo, como ya hemos visto, es cargar los módulos necesarios, generar una semilla aleatoria (aunque fija), y cargar el dataset.
El set de entrenamiento está estructurado como un array tridimensional compuesto por la imagen, su ancho y su alto. Para poder utilizarlo con un perceptrón, tenemos que convertir las imágenes en un vector de píxeles. En este caso, las imágenes de 28x28 se convertirán en 748 valores de entrada. Podemos hacer esto fácilmente con la función reshape() de NumPy.

```
import numpy
from keras.datasets import mnist
from keras.models import Sequential
from keras.layers import Dense
from keras.layers import Dropout
from keras.utils import np_utils

numpy.random.seed(7)

n_pixels = X_train.shape[1] * X_train.shape[2]
X_train = X_train.reshape(X_train.shape[0], n_pixels).astype('float32')
X_test = X_test.reshape(X_test.shape[0], n_pixels).astype('float32')
```

Los valores van de 0 a 255, en una escala de grises. Cuando se trabaja con modelos de redes neuronales, suele ser buena idea escalar o normalizar los datos de entrada. Para ello, se convertirán estos valores del rango 0-255 al 0-1.
Además, la salida será un entero entre 0 y 9 (ya que como hemos dicho, tenemos 10 clases en las que nuestra imagen puede ser clasificada). Nos encontramos ante un problema de multiclasificación, por lo que será útil codificar el vector de enteros en una matriz binaria:

```
X_train = X_train / 255
X_test = X_test / 255

y_train = np_utils.to_categorical(y_train)
y_test = np_utils.to_categorical(y_test)
num_classes = y_test.shape[1]
```

Con todo esto, ya se puede crear el modelo de la red neuronal. En este ejemplo, vamos a diseñar tanto un modelo de red neuronal basado en un perceptrón multicapa como un modelo convolucional, para ver sus diferencias y rendimientos a la hora de tratar imágenes.

Perceptrón multicapa

```
def perceptron_model():
        model = Sequential()
        model.add(Dense(n_pixels, input_dim=n_pixels, init='normal', activation='relu'))
        model.add(Dense(num_classes, init='normal', activation='softmax'))
        model.compile(loss='categorical_crossentropy', optimizer='adam', metrics=['accuracy'])
        return model
```

Como podemos observar, se trata de un modelo con una sola capa oculta, con el mismo numero de neuronas que de entradas, es decir, 784. Además, sobre ella se aplica una funcion de activacion rectificadora.
En la capa de salida, se usa la funcion de activacion softmax para convertir las salidad en una probabilidad, y permitir que se seleccionen una de las 10 clases que el modelo ha de predecir.
Como función de perdida, se utiliza la perdida logarítmica (en Keras, `categorical_crossentropy`).
Por último, para aprender los pesos, se utiliza el algoritmo gradiente descendiente ADAM.

Red convolucional

```
def convolutional_model():
model = Sequential()
model.add(Convolution2D(32, 5, 5, border_mode='valid', input_shape=(1, 28, 28),
model.add(MaxPooling2D(pool_size=(2, 2)))
model.add(Dropout(0.2))
model.add(Flatten())
model.add(Dense(128, activation='relu'))
model.add(Dense(num_classes, activation='softmax'))
model.compile(loss='categorical_crossentropy', optimizer='adam', metrics=['accur
return model
\begin{lstlisting}
```

Como podemos observar, las redes convolucionales son bastante mas complejas que los perceptrones multicapa. En resumen, nuestro modelo cuenta con las siugientes capas:
1. La primera capa es una capa convolucional (Convolution2D). Cuenta con 32 mapeadores, de tamaño 5x5, y una funcion de activación rectificadora. Al ser la capa de entrada, esperará imagenes de la forma [[pixeles][ancho][alto]]. 2. Después definiremos una capa de pooling que utilizará la funcion maximo, con un tamaño de 2x2.
3. La siguiente capa será regularizadora. Se ha configurado para excluir aleatoreamente el 20 % de las neuronas de la capa para reducir el sobreajuste.
4. La siguiente capa convertirá la matriz de 2 dimensiones en un vector, permitiendo asñi que la salida pueda ser procesada por una capa totalmente conectada.
5. Después se ha añadido una capa totalmente conectada con 128 neuronas y una funcion de activacion rectificadora.
6. Finalmente, la capa tendrá 10 neuronas, una por cada clase, y una funcion de activación softmax para hacer una aproximacion de la probabilidad de que cada entrada se corresponda con cada clase (es decir, con cada numero).

4.3.2. Resultados

Ahora ya podemos ajustar y evaluar los modelos. Estos se ajustán cada 10 ciclos, con actualizaciones cada 200 imagenes. Finalmente, se pinta el ratio de error de clasificación.

```
model = perceptron_model() // model.convolutional_model
model.fit(X_train, y_train, validation_data=(X_test, y_test), nb_epoch=10, batch
scores = model.evaluate(X_test, y_test, verbose=0)
print("Baseline Error: %.2f%%" % (100-scores[1]*100))
```

Ejecutando todo el codigo anterior utilizando el modelo del perceptrón multicapa, veremos la siguiente salida. Como podemos observar, esta red neuronal tiene un ratio de error de 1.74 %.

```
Train on 60000 samples, validate on 10000 samples
Epoch 1/10
11s - loss: 0.2791 - acc: 0.9203 - val\_loss: 0.1422 - val\_acc: 0.9583
Epoch 2/10
11s - loss: 0.1121 - acc: 0.9680 - val\_loss: 0.0994 - val\_acc: 0.9697
Epoch 3/10
12s - loss: 0.0724 - acc: 0.9790 - val\_loss: 0.0786 - val\_acc: 0.9748
...
Epoch 8/10
12s - loss: 0.0149 - acc: 0.9967 - val\_loss: 0.0628 - val\_acc: 0.9814
Epoch 9/10
12s - loss: 0.0108 - acc: 0.9980 - val\_loss: 0.0595 - val\_acc: 0.9816
Epoch 10/10
12s - loss: 0.0072 - acc: 0.9989 - val\_loss: 0.0577 - val\_acc: 0.9826
Baseline Error: 1.74\%
```

Sin embargo, si ejecutamos el código utilizando el modelo convolucional, tendriamos un ratio de error de 1.10 %, y la siguiente salida:

```
Epoch 1/10
84s - loss: 0.2065 - acc: 0.9370 - val_loss: 0.0759 - val_acc: 0.9756
Epoch 2/10
84s - loss: 0.0644 - acc: 0.9802 - val_loss: 0.0475 - val_acc: 0.9837
Epoch 3/10
89s - loss: 0.0447 - acc: 0.9864 - val_loss: 0.0402 - val_acc: 0.9877
...
Epoch 8/10
89s - loss: 0.0142 - acc: 0.9956 - val_loss: 0.0323 - val_acc: 0.9904
Epoch 9/10
88s - loss: 0.0120 - acc: 0.9961 - val_loss: 0.0343 - val_acc: 0.9901
Epoch 10/10
89s - loss: 0.0108 - acc: 0.9965 - val_loss: 0.0353 - val_acc: 0.9890
Classification Error: 1.10%
```

Como se puede observar, hemos reducido el error de clasificacion del 1.74 % al 1.10 %. Pero... ¿Podriamos obtener mejores resultados? La respuesta es sí. En este ejemplo, se ha utilizado una red convolucional muy simple. Sin embargo, añadiendo mas capas convolucionales, de pooling y totalmente conectadas, podemos acercanos a una ratios de error muy cercanos al state-of-art actual. Por ejemplo, añadiendo una nueva capa convolucional (model.add(Convolution2D(15, 3, 3, activation='relu')), model.add(MaxPooling2D(pool_size=(2, 2)))),y una nueva capa totalmente conectada (model.add(Dense(50, activation='relu'))), obtendriamos un ratio de error de 0.89 %.

4.4. Generación de textos - Red LSTM

En este ejemplo, vamos a intentar generar textos que más o menos tengan sentido. Hasta la aparición de las redes neuronales que un ordenador pudiese llevar a cabo esta tarea parecía una idea sacado de una pelicula de ciencia ficción. Sin embargo, con las redes LSTM esto es posible. Las redes neuronales, además de ser usadas para predecir modelos, pueden ser utilizadas para aprender secuencias de un problema y generar mediante estos conocimientos nuevas secuencias. Los modelos que generan nuevas secuencias como este, no solo son utiles para saber como de bien nuestra máquina ha aprendido un problema, si no también para saber mas de un problema en sí mismo.
En este ejemplo, vamos a utilizar el libro "La metamorfosis"de Kafka, como dataset para nuestra red neuronal. Esta, va a aprender las dependencias entre los diferentes caracteres que se vaya encontrando a lo largo del texto, así como las probabilidades de que estos caracteres aparezcan, con el objetivo de generar una nueva secuencia de caracteres, formando así un nuevo texto, y una nueva historia. Sin embargo, este ejemplo también es válido para otro tipo de textos: poemas, código fuente... (siempre que estos se encuentren en codigo ASCII).

4.4.1. Aprendiendo secuencias de caracteres

Primero importaremos las clases que vamos a utilizar en el modelo, y cargaremos el texto convirtiéndolo todo a minúsculas.

```
import numpy
from keras.models import Sequential
from keras.layers import Dense
from keras.layers import Dropout
from keras.layers import LSTM
from keras.callbacks import ModelCheckpoint
```

```
from keras.utils import np_utils

# load ascii text and covert to lowercase
filename = "metamorfosis.txt"
raw_text = open(filename).read()
raw_text = raw_text.lower()
```

Una vez cargado el libro en memoria, debemos preparlo para ser tratado por una red neuronal. Una buena idea es convertir los caracteres a numeros enteros. Para ello, primero se identifican todos los caracteres que componen el texto y se asocia un numero a cada uno. Con ello, conseguiremos reducir el numero de caracteres a analizar, ya que también eliminado los repetidos.

```
# create mapping of unique chars to integers
chars = sorted(list(set(raw_text)))
char_to_int = dict((c, i) for i, c in enumerate(chars))
```

El siguiente paso es definir el conjunto de entrenamiento. Se dividirá el texto en conjuntos de caracteres (en este ejemplo 100), para pasarselos como entrada a la red neuronal. El objetivo es que la red prediga el caracter 101. Esto se conseguirá desplazando de 1 en 1 los 100 caracteres seleccionados, permitiendo así que cada caracter sea aprendido por los 100 caracteres que le preceden. Por ejemplo, si hiciesemos divisiones de 5 en 5, y tuviesemos la palabra CAPITULO, las iteraciones serían:

```
CAPIT -> U
APITU -> L
PITUL -> O
\end{lstlisting}
Dado que las redes neuronales trabajan con numeros en vez de caracteres, debemos
\begin{lstlisting}
# prepare the dataset of input to output pairs encoded as integers
seq_length = 100
dataX = []
dataY = []
for i in range(0, n_chars - seq_length, 1):
seq_in = raw_text[i:i + seq_length]
seq_out = raw_text[i + seq_length]
dataX.append([char_to_int[char] for char in seq_in])
dataY.append(char_to_int[seq_out])
n_patterns = len(dataX)
print "Total Patterns: ", n_patterns
```

Si ejecutamos el código hasta este punto, podemos ver el numero de dataset de entrenamiento: 147574
Una vez que hemos preparado el dataset, necesitamos tranformalo para que pueda ser usado por Keras. Primero, debemos transformar la lista de entradas (seq_in) en una secuencia de de la forma [muestra, intervalo de tiempo, característica], esperada por una red LSTM. Después, se necesita escalar los enteros al rango 0-1 para conseguir patrones mas faciles de aprender por la red LSTM que usa la función de activación sigmoide. Finalmente, se convertirán los patrones de salida. Para ello, se representará la salida como una prabalidad de que aparezca cada uno de los 47 diferentes catacteres del vocabulario, en vez de intentar predecir estrictamente el siguiente caracter. Cada valor será convertido a un vector de longitud 47, relleno de 0 menos un 1 que concidirá con la columna de la letra que el patron representa. Por ejemplo, si la letra fuese la C (entero numero 3), la codificacion seróa... [0,0,1,0,0,0,0,0...0] Esto se consigue mediante las siguientes lineas de codigo.

```
# reshape X to be [samples, time steps, features]
X = numpy.reshape(dataX, (n_patterns, seq_length, 1))
# normalize
X = X / float(n_vocab)
# one hot encode the output variable
y = np_utils.to_categorical(dataY)
```

Una vez que tenemos los datos preparados, es hora de definir nuestra red LSTM. Para este ejemplo, se define una sola capa oculta LSTM con 256 unidades de memoria. En este ejemplo se usa la tecnica de regularización para evitar el sobreajuste conocida como Dropout, con una probabilidad de 20. La capa de salida será una capa Dense usando softmax como función de activación para producir una salida en función de la probabilidad de que aparezca uno de los 47 caracteres.
En realidad, podemos observar que el problema es realmente un problema de clasificacion con 47 clases, y por ello se define la funcion de perdida logaritmica cross entropy, y se aplica el algoritmo de optimización ADAM para mejorar la velocidad.

```
# define the LSTM model
model = Sequential()
model.add(LSTM(256, input_shape=(X.shape[1], X.shape[2])))
model.add(Dropout(0.2))
model.add(Dense(y.shape[1], activation='softmax'))
model.compile(loss='categorical_crossentropy', optimizer='adam')
```

En este ejemplo, no estamos interesados en la precisión de la clasificación, ya que crearíamos un modelo que predeciría cada caracter del conjunto de entrenamiento perfectamente. En vez de eso, estamos interesados en una generalizacion del dataset que minimice la funcion de perdida. Es decir, estamos buscando un balance entre generalización y sobreajuste.
Esta red es lenta de entrenar. Por ello, se ha decidido usar una serie de checkpoints para almacenar todos los pesos de la red en un fichero cada vez que se observe una mejora en la perdida, al final de cada ciclo. Usaremos los mejores pesos (menores perdidas) para generar nuestro modelo en el siguente punto.

```
# define the checkpoint
filepath="weights-improvement-{epoch:02d}-{loss:.4f}.hdf5"
checkpoint = ModelCheckpoint(filepath, monitor='loss', verbose=1, save_best_only
callbacks_list = [checkpoint]
```

Por ultimo, ya solo queda ajustar nuestro modelo. Usaremos 20 ciclos y una tamaño de lote de 128 patrones.

```
model.fit(X, y, nb_epoch=20, batch_size=128, callbacks=callbacks_list)
```

Cada vez que ejecutamos el modelo, podemos apreciar que nos encontramos ante diferentes valores. Esto es debido a la naturaleza aleatoria del modelo y a que es dificil elegir una semilla aleatoria para las redes LSTM que reproduzcan los resultados con un 100x100 de exactitud. A pesar de ello, este no es el objetivo del modelo.
Una vez ejecutado el script completo, se deben haber generado una serie de archivos checkpoint con los mejores pesos de cada ciclo. Para ejecutar el codigo del siguiente apartado donde ya generaremos nuevas secuencias de caracteres, usaremos los valores del ultimo archivo, ya que son los que tienen un menor valor de perdida.

4.4.2. Generando secuencias de caracteres

Una vez entrenada nuestra red, tenemos que cargar los pesos que hemos calculado anteriormente y hemos guardado en nuestro checkpoint.

```
filename = "weights-improvement-19-1.9435.hdf5"
model.load_weights(filename)
model.compile(loss='categorical_crossentropy', optimizer='adam')
```

Además, tambien tenemos que crear un mapeo inverso de caracteres a enteros para convertir de nuevo los enteros utilizados en la red a caracteres.

```
int_to_char = dict((i, c) for i, c in enumerate(chars))
```

Por último, ya solo queda hacer predicciones. La manera mas simple es iniciar con una secuencia de semillas como entrada, generar el siguiente caracter, después actualizar la secuencia de semillas para añadir el caracter generado al final, y quitar el primer caracter. Este proceso se repetirá mientras queramos generar nuevos caracteres. Elegiremos un patron aleatorio de entrada como nuestra secuencia de semillas, y pintar los caracteres segun se vayan generando.

```
start = numpy.random.randint(0, len(dataX)-1)
pattern = dataX[start]
print "Seed:"
print "\"", ''.join([int_to_char[value] for value in pattern]), "\""
for i in range(1000):
x = numpy.reshape(pattern, (1, len(pattern), 1))
x = x / float(n_vocab)
prediction = model.predict(x, verbose=0)
index = numpy.argmax(prediction)
result = int_to_char[index]
seq_in = [int_to_char[value] for value in pattern]
sys.stdout.write(result)
pattern.append(index)
pattern = pattern[1:len(pattern)]
print "\nDone."
```

4.4.3. Analizando resultados

Al ejecutar el codigo anterior, nuestro programa genera el siguiente texto:

```
R
E
L
L
E
N
A
R
```

Como podemos ver, los resultados no son perfectos. Hay palabras que si han sido generadas correctamente (como RELLENAR), y otras que sin embargo, no tienen mucho sentido (como RELLENAR).
Con diseños mas avanzados, nuestra red reflejaría mejores resultados. Una propuesta de modelo mas avanzado, pero que por tanto, tardaría mas en entrenarse sería por ejemplo la siguiente:

```
model = Sequential()
model.add(LSTM(256, input_shape=(X.shape[1], X.shape[2]), return_sequences=True)
model.add(Dropout(0.2))
model.add(LSTM(256))
model.add(Dropout(0.2))
model.add(Dense(y.shape[1], activation='softmax'))
model.compile(loss='categorical_crossentropy', optimizer='adam')
```

Además, tambien podemos incrementar el numero de ciclos de entrenamiento de 20 a 50, y disminuir el tamaño de lote de 128 a 64 para dar a la red la oportunidad de aprender más.

```
model.fit(X, y, nb_epoch=50, batch_size=64, callbacks=callbacks_list)
```

Además, hay una serie de tecnicas que ayudarían a mejorar nuestro nuevo texto, pero que en este ejemplo no han sido aplicadas. Algunas de ellas son:

- Predecir menos de 1000 caracteres de salida por semilla
- Borrar todos los signos de puntuacion y por tanto, del vocabulario del modelo.
- Añadir mas capas al modelo
- Reducir el tamaño de lote (el más eficiente seria de 1, pero nuestro modelo tardaría mucho en entrenarse)

Capítulo 5

Conclusiones y lineas futuras

Glosario de acrónimos

- **IS**: Iris Subject
- **DCT**: Discrete Cosine Transform
- **WED**: Weighted Euclidean Distance

Bibliografía

Apéndice A

Manual de utilización