Introducción al aprendizaje profundo

Con los avances en hardware y la aparición del big data, los métodos de computación más avanzados se han vuelto cada vez más populares. La creciente demanda de mejores productos por parte de los consumidores y el deseo de las empresas de optimizar sus recursos también han impulsado estos progresos. En respuesta a estas fuerzas del mercado, recientemente hemos presenciado un renovado y amplio interés en el campo del aprendizaje automático.

En la intersección de la estadística, las matemáticas y la computación el *aprendizaje* automático se refiere a la ciencia de crear y estudiar algoritmos que mejoran su propio comportamiento de forma iterativa mediante diseño. Originalmente, este campo se dedicaba al desarrollo de la inteligencia artificial, pero debido a las limitaciones de la teoría y la tecnología existentes en ese momento, resultó más lógico centrar estos algoritmos en tareas específicas. La mayoría de los algoritmos de aprendizaje automático actuales se centran en la optimización de funciones, y las soluciones obtenidas no siempre explican las tendencias subyacentes en los datos ni ofrecen la capacidad inferencial que la inteligencia artificial intentaba alcanzar.

Por lo tanto, el uso de algoritmos de aprendizaje automático a menudo se convierte en un proceso repetitivo de prueba y error, en el que la elección del algoritmo en diferentes problemas produce diferentes resultados de rendimiento. Esto es adecuado en algunos contextos, pero en el caso del modelado del lenguaje y la visión artificial, se vuelve problemático.

En respuesta a algunas de las deficiencias del aprendizaje automático y al significativo avance en las capacidades teóricas y tecnológicas de las que disponemos hoy en día, el aprendizaje profundo ha surgido y se está expandiendo rápidamente como uno de los campos científicos más apasionantes. Se utiliza en tecnologías como los automoviles autónomos, el reconocimiento de imágenes en redes sociales y la traducción de textos. El *aprendizaje profundo* es el subcampo del aprendizaje automático dedicado a la creación de algoritmos que explican y aprenden un alto y bajo nivel de abstracción de datos que los algoritmos tradicionales de aprendizaje automático a menudo no pueden.

Los modelos del aprendizaje profundo suelen inspirarse en diversas fuentes de conocimiento, como la teoría de juegos y la neurociencia, y muchos de ellos imitan la estructura básica del sistema nervioso humano. A medida que este campo avanza, muchos investigadores visualizan un mundo donde el software no esté tan codificado como suele ser necesario hoy en día, lo que permite una solución más robusta y generalizada para la resolución de problemas.

Aunque originalmente comenzó en un ámbito similar al aprendizaje automático, donde el enfoque principal era la satisfacción de restricciones con diversos grados de complejidad, el aprendizaje profundo ha evolucionado para abarcar una definición más amplia de algoritmos capaces de comprender múltiples niveles de representación de datos que corresponden a diferentes jerarquías de complejidad.

En otras palabras, los algoritmos no solo tienen capacidad predictiva y de clasificación, sino que también pueden aprender diferentes niveles de complejidad. Un ejemplo de esto se encuentra en el reconocimiento de imágenes, donde una red neuronal se basa en el reconocimiento de pestañas, rostros, personas, etc. El poder de esto es evidente: podemos alcanzar un nivel de complejidad necesario para crear software inteligente. Esto lo vemos actualmente en funciones como la autocorrección, que modela las correcciones sugeridas a los patrones de habla observados, específicos del vocabulario de cada persona.

La estructura de los modelos de aprendizaje profundo suele constar de capas de unidades no lineales que procesan datos, o neuronas, y las múltiples capas de estos modelos procesan diferentes niveles de abstracción de los datos. La figura 1 muestra una visualización de las capas de las redes neuronales.

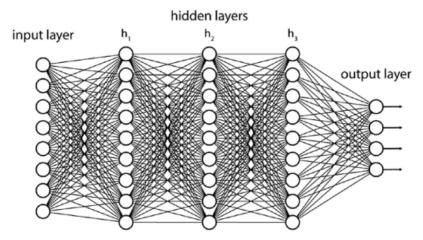


Figura 1: Redes neuronales profundas.

Las redes neuronales profundas se distinguen por tener muchas capas ocultas, llamadas así porque no necesariamente vemos explícitamente las entradas y salidas de estas neuronas, más allá de saber que son la salida de la capa anterior.

La adición de capas y las funciones dentro de las neuronas de estas capas distinguen una arquitectura de otra y establecen los diferentes casos de uso de un modelo dado.

Más específicamente, los niveles inferiores de estos modelos explican el "cómo" y los niveles superiores de las redes neuronales procesan el "por qué". Las funciones utilizadas en estas capas dependen del caso de uso, pero a menudo son personalizables por el usuario, lo que las

hace significativamente más robustas que los modelos de aprendizaje automático promedio que se utilizan a menudo para clasificación y regresión, por ejemplo. La premisa fundamental de los modelos de aprendizaje profundo es que los datos que se interpretan se generan mediante la interacción de diferentes factores organizados en capas. Por lo tanto, tener múltiples capas permite al modelo procesar los datos de tal manera que construye una comprensión desde aspectos simples hasta construcciones más amplias.

El objetivo de estos modelos es realizar tareas sin el mismo grado de instrucción explícita que requieren muchos algoritmos de aprendizaje automático. En cuanto a su uso, una de las principales ventajas es su potencial al aplicarse a problemas de aprendizaje no supervisado, o problemas en los que, antes de realizar el experimento, no sabemos si la variable de respuesta y debe recibir un conjunto de variables explicativas x. Un ejemplo sería el reconocimiento de imágenes, especialmente después de entrenar un modelo con un conjunto de datos determinado. Supongamos que introducimos la imagen de un perro en la fase de prueba, lo que implica que no le indicamos al modelo de qué se trata. La red neuronal empezará por reconocer las pestañas antes que el hocico, la forma de la cabeza del perro, y así sucesivamente hasta clasificar la imagen como la de un perro.

Modelos de aprendizaje profundo

Ahora que hemos establecido una breve descripción general del aprendizaje profundo, será útil analizar qué aprenderás exactamente en esta pequeña introducción al tópico, así como describir los modelos que abordaremos.

Este documento asume que tienes conocimientos básicos de matemáticas y estadística. Sea como sea, revisaremos brevemente todos los conceptos necesarios para comprender el álgebra lineal, la optimización y el aprendizaje automático, de modo que formemos una base sólida de conocimientos para comprender el aprendizaje profundo. Si bien comprender toda esta información técnica con precisión ayuda, quienes no se sientan cómodos con las matemáticas más avanzadas no deben preocuparse. Este documento está escrito de tal manera que el lector cuenta con toda la información de fondo necesaria para investigar más a fondo, si así lo desea.

Sin embargo, el objetivo principal de este documento es mostrar a los lectores cómo aplicar el aprendizaje automático y los modelos de aprendizaje profundo, no ofrecer una extensa exposición académica sobre todos los conceptos teóricos tratados.

Después de haber revisado suficientemente todos los conceptos matemáticos y de aprendizaje automático necesarios, avanzaremos a analizar los modelos de aprendizaje automático en detalle.

Esta sección describe e ilustra los modelos de aprendizaje profundo.

Modelo de perceptrón de capa única (SLP, Single layer perceptron)

El modelo de *perceptrón de capa única* (SLP) es la forma más simple de red neuronal y la base de los modelos más avanzados desarrollados en aprendizaje profundo.

Normalmente, utilizamos SLP en problemas de clasificación donde necesitamos asignar etiquetas (binarias o multinomiales) a las observaciones de datos según las entradas. Los valores de la capa de entrada se envían directamente a la capa de salida tras multiplicarse por ponderaciones y añadir un sesgo a la suma acumulada. Esta suma acumulada se introduce en una función de *activación*, que define la salida. Cuando dicha salida está por encima o por debajo de un umbral determinado por el usuario, se determina la salida final. Los investigadores de McCulloch-Pitts Neurons describieron un modelo similar en la década de 1940 (ver la figura 2).

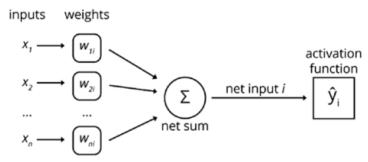


Figura 2: Red de perceptrón de capa única.

Modelo del perceptrón multicapa (MLP, Multilayer perceptron)

Muy similar al SLP, el modelo del perceptrón multicapa (MLP) presenta múltiples capas interconectadas que forman una red neuronal de propagación hacia adelante.

Cada neurona de una capa tiene conexiones dirigidas a las neuronas de una capa distinta.

Uno de los factores clave que distinguen a este modelo del modelo de perceptrón de una sola capa es el algoritmo de retropropagación, un método común para entrenar redes neuronales.

La retropropagación transfiere el error calculado de la capa de salida a la capa de entrada, de modo que podemos ver la contribución de cada capa al error y modificar la red en consecuencia. En este caso, utilizamos un algoritmo de descenso de gradiente para determinar el grado en que deben cambiar los pesos en cada iteración. El descenso de gradiente, otro algoritmo popular de aprendizaje automático/optimización, es simplemente la derivada de una función de modo que encontramos un valor escalar (un número cuya magnitud es su única propiedad) que apunta en la dirección del mayor momento. Al restar el

gradiente, obtenemos una solución más óptima que la actual hasta alcanzar un óptimo global (ver la figura 3).

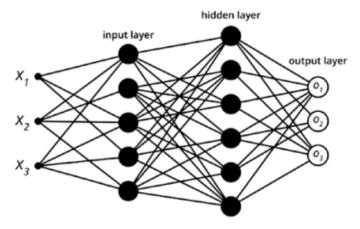


Figura 3: Red de perceptrones multicapa.

Redes neuronales convolucionales (CNN, Convolutional neural networks)

Las redes neuronales convolucionales (CNN) son modelos que se utilizan con mayor frecuencia para el procesamiento de imágenes y la visión artificial. Están diseñadas para imitar la estructura de la corteza visual animal. Específicamente, las CNN tienen neuronas dispuestas en tres dimensiones: ancho, alto y profundidad. Las neuronas de una capa determinada solo están conectadas a una pequeña región de la capa anterior. Los modelos de CNN se utilizan con mayor frecuencia para el procesamiento de imágenes y la visión artificial (verla figura 4).

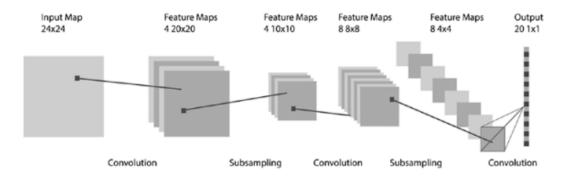


Figura 4: Red neuronal convolucional.

Redes neuronales recurrentes (RNN, Recurrent neural networks)

Las redes neuronales recurrentes (RNN) son modelos de redes neuronales artificiales (RNA) donde las conexiones entre unidades forman un ciclo dirigido. Específicamente, un *ciclo dirigido* es una secuencia donde el recorrido a lo largo de los vértices y las aristas está

completamente determinado por el conjunto de aristas utilizado y, por lo tanto, presenta cierta similitud con un orden específico. Las RNN se utilizan a menudo específicamente para el reconocimiento de voz y escritura a mano (ver la figura 5).

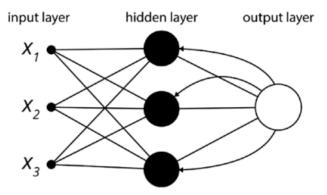


Figura 5: Red neuronal recurrente.

Máquinas de Boltzmann restringidas (RBM, Restricted Boltzmann machines)

Las máquinas de Boltzmann restringidas son un tipo de modelo binario de Markov con una arquitectura única, que consta de múltiples capas de variables aleatorias ocultas y una red de unidades binarias estocásticas acopladas simétricamente. Las DBM se componen de un conjunto de unidades visibles y una serie de capas de unidades ocultas. Sin embargo, no existen conexiones entre las unidades de la misma capa. Las DMB pueden aprender representaciones internas complejas y abstractas en tareas como el reconocimiento de objetos o de voz (ver la figura 6).

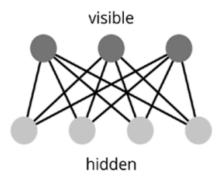


Figura 1-6. Máquina de Boltzmann Restringida.

Redes de creencias profundas (DBN, Deep belief networks)

Las redes de creencias profundas son similares a las RBM, excepto que la capa oculta de cada subred es, de hecho, la capa visible de la siguiente subred. Las DBN son, en general, un modelo gráfico generativo compuesto por múltiples capas de variables latentes con conexiones entre ellas, pero no entre las unidades de cada capa individual (ver la figura 7).

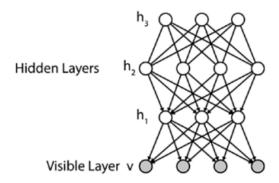


Figura 7: Redes de creencias profundas.

Otros temas tratados

Tras cubrir toda la información sobre los modelos, abordaremos la comprensión de la práctica de la ciencia de datos. Para facilitar este esfuerzo, esta sección abarca temas adicionales de interés.

Diseño experimental

El objetivo principal de este documento es brindar al lector una comprensión teórica de los modelos de aprendizaje profundo para que te sientas cómodo al aplicarlos. Por lo tanto, es importante analizar los elementos del diseño experimental para ayudar al lector a comprender las formas adecuadas de estructurar tu investigación, de modo que genere información práctica y no sea una pérdida de tiempo ni energía. En gran medida, nos basaremos en los principios de Fisher, además de definir las mejores prácticas, dados los problemas que a menudo presenta el aprendizaje profundo.

Selección de características

Un componente del diseño experimental, pero en última instancia un subtema de investigación en sí mismo, abordaremos el concepto de selección de variables y los múltiples métodos que suelen utilizar los científicos de datos para gestionar conjuntos de datos de alta dimensión.

Específicamente, profundizaremos en el análisis de componentes principales y en los algoritmos genéticos. Todos los algoritmos tratados están disponibles en el lenguaje estadístico R en paquetes de código abierto.

Para quienes deseen profundizar en esta área de investigación, citaremos artículos relevantes. Desde una perspectiva de aprendizaje profundo, analizaremos en profundidad cómo cada modelo realiza sus propios métodos específicos de selección de características mediante el

diseño de la arquitectura de capas, además de abordar los descubrimientos recientes en este campo.

Aprendizaje automático aplicado y aprendizaje profundo

En la sección final del documento, guiaremos al lector a través del uso de paquetes en el lenguaje R para modelos de aprendizaje automático y aprendizaje profundo, con el fin de resolver problemas comunes en entornos profesionales y académicos. Se espera que estos ejemplos motiven a los lectores a aplicar el aprendizaje automático y el aprendizaje profundo en sus actividades profesionales y académicas.

Todo el código de los ejemplos, experimentos e investigaciones utiliza el lenguaje de programación R y estará disponible para todos los lectores a través de los documentos adjuntos. Entre los temas abordados se encuentran la regresión, la clasificación y el reconocimiento de imágenes mediante modelos de aprendizaje profundo.

Historia del aprendizaje profundo

Una vez cubierto el esquema general del documento, además de lo que se espera que el lector aprenda durante este período, veremos cómo ha evolucionado el campo hasta la actualidad y comprenderemos su futuro actual. Si bien el aprendizaje profundo es un campo relativamente nuevo, cuenta con una rica y vibrante historia llena de descubrimientos que aún continúa.

En cuanto a dónde se originó este campo, la discusión se remonta a la década de 1960. El primer algoritmo de aprendizaje funcional, a menudo asociado con los modelos de aprendizaje profundo, fue desarrollado por Ivakhenenko y Lapa. Publicaron sus hallazgos en un artículo titulado "Redes Entrenadas por el Método de Manejo de Datos en Grupo (GMDH)" en 1965. Estos se encontraban entre los primeros sistemas de aprendizaje profundo del tipo perceptrón multicapa de retroalimentación. Las redes de retroalimentación describen modelos donde las conexiones entre las unidades no forman un ciclo, como lo harían en una red neuronal recurrente. Este modelo incluía funciones de activación polinómica, y las capas se desarrollaban y entrenaban incrementalmente mediante análisis de regresión. Posteriormente, se podaban con la ayuda de un conjunto de validación independiente, donde se utilizaba la regularización para eliminar las unidades superfluas.

En la década de 1980, Kunihio Fukushima introdujo el neocognitrón. Se trata de una red neuronal artificial multicapa que se ha utilizado principalmente para el reconocimiento de caracteres manuscritos y tareas similares que requieren reconocimiento de patrones. Sus capacidades de reconocimiento de patrones inspiraron la red neuronal convolucional. En cualquier caso, el neocognitrón se inspiró en un modelo propuesto por los neurofisiólogos Hubel y Wiesel. También durante esta década, Yann LeCun et al. aplicaron el algoritmo de

retropropagación a una red neuronal profunda. El propósito original era que AT&T reconociera códigos postales manuscritos en el correo. Las ventajas de esta tecnología fueron significativas, especialmente justo antes de que Internet y su comercialización se produjeran a finales de los años 90 y principios de los 2000.

En la década de 1990, el campo del aprendizaje profundo presenció el desarrollo de una red neuronal recurrente que requería más de 1000 capas en una RNN desplegada en el tiempo, y el descubrimiento de que es posible entrenar una red que contiene seis capas completamente conectadas y varios cientos de unidades ocultas mediante lo que se denomina un algoritmo de vigilia-sueño (wake-sleep). Un algoritmo de vigilia-sueño, una heurística o un algoritmo que se aplica a otro algoritmo o a un grupo de ellos, es un método no supervisado que permite al algoritmo ajustar los parámetros de tal manera que se genere un estimador de densidad óptimo. La fase de "vigilia" describe el proceso de activación de las neuronas de entrada a salida. Las conexiones de entrada y salida se modifican para aumentar la probabilidad de que repliquen la actividad correcta en la capa inferior. La fase de "sueño" es la inversa de la fase de vigilia, de modo que las neuronas se activan mediante las conexiones mientras se modifican los reconocimientos.

Si bien los avances en este campo se produjeron rápidamente a principios de la década de 2000 y principios de la de 2010, el período actual se describe como un punto de inflexión para el aprendizaje profundo. Es ahora cuando observamos su aplicación en una multitud de industrias y campos, así como la mejora constante del hardware utilizado para estos modelos. En el futuro, se espera que los avances en aprendizaje profundo permitan a la tecnología actuar en contextos donde los humanos suelen actuar hoy y donde los algoritmos tradicionales de aprendizaje automático han tenido un rendimiento pésimo. Si bien aún queda mucho por hacer, la inversión realizada por muchas empresas y universidades para acelerar el progreso es notable y está teniendo un impacto significativo en el mundo.

Resumen

Es importante que el lector comprenda que, independientemente de la sofisticación de los modelos que describimos aquí, y de los interesantes y potentes usos que pueda ofrecer, no hay sustituto para un conocimiento adecuado del dominio en el que se utilizan estos modelos.

Es fácil caer en la trampa, tanto para profesionales avanzados como principiantes, de confiar plenamente en los resultados de los modelos de aprendizaje profundo sin evaluar exhaustivamente el contexto en el que se utilizan. Aunque parezca evidente, es importante subrayar la importancia de examinar cuidadosamente los resultados y, aún más importante, de extraer inferencias prácticas donde el riesgo de error sea mínimo.

Esperamos transmitir al lector no solo el conocimiento de dónde pueden aplicar estos modelos, sino también las limitaciones razonables de la tecnología y la investigación existentes en la actualidad.

Esto es especialmente importante en el aprendizaje automático y el aprendizaje profundo, ya que, si bien muchos de estos modelos son potentes y alcanzan soluciones adecuadas que serían casi imposibles de obtener manualmente, no hemos determinado por qué siempre ocurre. Por ejemplo, entendemos cómo funciona el algoritmo de retropropagación, pero no podemos verlo funcionando y no comprendemos qué sucedió exactamente para llegar a tal conclusión.

El principal problema que surge de esta situación es que, cuando un proceso falla, no siempre tenemos una idea de por qué. Aunque se han creado métodos para intentar rastrear las neuronas y su orden de activación, el proceso de toma de decisiones de una red neuronal no siempre es consistente, especialmente en diferentes problemas. Espero que el lector tenga esto presente al avanzar y evalúe esta cuestión adecuadamente cuando sea necesario.