UNIVERSIDAD DE LA RIOJA

Facultad de Ciencia y Tecnología

TRABAJO FIN DE GRADO

Grado en Matemáticas

Homología persistente como herramienta de análisis de redes neuronales

Realizado por:

José Manuel Ros Rodrigo

Tutelado por:

José Luis Ansorena Barasoain

Julio Rubio García

Logroño, julio, 2022

Abstract/Resumen

(En construcción.)

Índice general

Capítulo 1
Introducción

(En construcción.)

Capítulo 2
Preeliminares

A lo largo de este capítulo vamos a ver todas las nociones teóricas necesarias para el uso de la homología persistente en redes neuronales.

2.1 Complejos simpliciales

Comenzamos con el primer concepto fundamental de todo el trabajo, los *complejos simpliciales*. Esta noción admite dos enfoques diferentes, por lo que debemos dintinguir entre dos definiciones relacionadas: los complejos simpliciales *abstractos* y los complejos simpliciales *geométricos*. Para el desarrollo estas nociones seguiremos la guia proporcionada por [3, 15].

Siguiendo el enfoque combinatorio, comenzamos definiendo los complejos simpliciales abstractos y algunas nociones relacionadas.

Definición 2.1.1. Un *complejo simplicial abstracto* es una colección, $\mathcal{V}$, de subconjuntos no vacíos de un conjunto, $\mathcal{V}_0$, que verifica las siguientes propiedades:

1. Si $v \in \mathcal{V}_0$, entonces $\{v\} \in \mathcal{V}$.
2. Si $\sigma \in \mathcal{V}$ y $\tau \subset \sigma$, entonces $\tau \in \mathcal{V}$.

A los elementos de $\mathcal{V}$ los llamaremos *símplices*; más concretamente: dado $\sigma \in \mathcal{V}$, diremos que σ tiene *dimensión* p, y que σ es un *p-símplice*, si $|\sigma| = p + 1$. Asimismo, definimos la *dimensión de* $\mathcal{V}$ como el máximo de las dimensiones de sus símplices y denotaremos por $\mathcal{V}_p$ a la colección de los p-símplices de $\mathcal{V}$.

Para los propósitos del presente trabajo consideraremos que $\mathcal{V}_0$ es finito, lo que supondrá que los complejos simpliciales definidos a partir de él también serán finitos, así como sus correspondientes símplices. Nótese que la definición de los p-símplices es coherente con $\mathcal{V}_0$, es decir, los elementos de $\mathcal{V}_0$ los podemos considerar como 0-símplices.

En relación con el concepto de símplice y de dimensión surge la siguiente noción:

Definición 2.1.2. Sean σ y τ dos símplices de $\mathcal{V}$ tales que $\tau \subset \sigma$. Entonces diremos que τ es una *cara* de σ, y además, si las dimensiones de σ y τ difieren por un número natural a, diremos que τ es una cara de σ de *codimensión* a.

Ahora que hemos definido los complejos simpliciales abstractos veamos un pequeño ejemplo para fijar ideas.

Ejemplo 2.1.1. Supongamos el siguiente complejo simplicial abstracto:

$$\mathcal{V} = \{\{a\},\{b\},\{c\},\{d\},\{a,b\},\{a,c\},\{a,d\},\{b,c\},\{b,d\},\{c,d\},\{a,b,c\},\{a,b,d\},$$
$$\{a,c,d\},\{a,b,c,d\}\}.$$

Así, tenemos que la dimensión de $\mathcal{V}$ es 3. También observamos que el 3-símplice $\{a,b,c,d\}$ tiene por caras de codimensión 1 a los 2-símplices $\{a,b,c\}$, $\{a,b,d\}$ y $\{a,c,d\}$. En la figura 2.1 ilustramos una representación geométrica de $\mathcal{V}$.

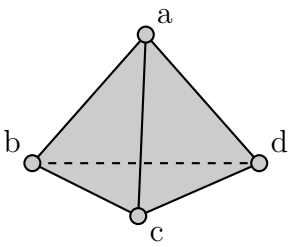


Figura 2.1: Representación geométrica del complejo simplicial $\mathcal{V}$.

La representación recogida en la figura 2.1, en la que cada símplice corresponde con un poliedro regular (cada 0-símplice corresponde a un punto, cada 1-símplice a una arista, cada 2-símplice a un triángulo, cada 3-símplice a un tetraedro, etc.) es única salvo homeomorfismo. Observamos que interpretando $\mathcal{V}$ como un subconjunto de $\mathbb{R}^3$ obtenemos un tetraedro. Esta idea motiva el otro enfoque de los complejos simpliciales: el enfoque geométrico. ◀

Siguiendo el enfoque geométrico es necesario que, antes de llegar a la definición de complejo simplicial geométrico, veamos unos conceptos previos relacionados con la propia definición.

Definición 2.1.3. Sean $\{u_0,u_1,...,u_k\} \subset \mathbb{R}^n$. Diremos que los $k+1$ puntos son *afínmente independientes* si los k vectores $u_1-u_0, u_2-u_0, ..., u_k-u_0$ son linealmente independientes.

Sea $x \in \mathbb{R}^n$. Diremos que x es una *combinación afín* de $\{u_0,u_1,...,u_k\}$ si $\exists\lambda_0,...,\lambda_k$ tales que $x = \sum_{i=0}^{k} \lambda_i u_i$ y $\sum_{i=0}^{k} \lambda_i = 1$.

Definición 2.1.4. Sean $\{u_0,u_1,...,u_k\} \subset \mathbb{R}^n$ $k+1$ puntos afínmente independientes y $x = \sum_{i=0}^{k} \lambda_i u_i$ una combinación afín. Diremos que x es una *combinación convexa* de $\{u_0,u_1,...,u_k\}$ si $\{\lambda_0,\lambda_1,...,\lambda_k\}$ son no negativos.

Definimos la *clausura convexa* de $\{u_0,u_1,...,u_k\}$ como el conjunto de todas sus posibles combinaciones convexas.

Ahora que ya contamos con estas nociones previas pasamos a definir la pieza clave en la definición de complejo simplicial geométrico: el *símplice*.

Definición 2.1.5. Definimos un *k-símplice* como la clausura convexa de $k+1$ puntos afínmente independientes. Lo denotaremos por $\sigma = conv\{u_0, u_1, ..., u_k\}$, y diremos que la *dimensión de* σ es k.

Llamamos *cara* de σ a cualquier combinación convexa de un subconjunto no vacío de $\{u_0, u_1, ..., u_k\}$. A la relación «ser cara de» la denotaremos por $\leq$.

Para los casos $k = 0, 1, 2, 3$ diremos que σ es un vértice, arista, triángulo, tetraedro respectivamente.

Habiendo definido todos los conceptos previos necesarios pasamos a definir *complejo simplicial geométrico*.

Definición 2.1.6. Llamamos *complejo simplicial geométrico* a la colección finita de símplices $\mathcal{V}$ verificando las siguientes propiedades:

1. Si $\sigma \in \mathcal{V}$ y $\tau \leq \sigma$, entonces $\tau \in \mathcal{V}$,
2. Si $\sigma_1, \sigma_2 \in \mathcal{V}$, entonces $\sigma_1 \cap \sigma_2 = \emptyset$, o bien, $\sigma_1 \cap \sigma_2$ es una cara común a ambos.

La relación entre los complejos simpliciales abstractos y los geométricos viene dada por la construcción de la *realización geométrica* de un complejo simplicial abstracto, que es un complejo simplicial geométrico definido tal y como se ilustra en la figura 2.1 del ejemplo 2.1.1 (para más detalles véase [3]).

De aquí en adelante emplearemos la definición de complejo simplicial abstracto, pues es la más adecuada para el presente trabajo.

Ahora que ya hemos definido los objetos con los que vamos a trabajar, procedemos a definir las aplicaciones entre ellos.

Definición 2.1.7. Una *aplicación simplicial entre complejos simpliciales*, $f\colon \mathcal{V} \to \mathcal{V}'$, es una aplicación tal que $f(\sigma) = \{g(u_1), g(u_2), ..., g(u_k)\} = \{v_1, v_2, ..., v_k\}$; donde $g\colon \mathcal{V}_0 \to \mathcal{V}'_0$ es una aplicación entre 0-símplices, $\sigma = \{u_1, u_2, ..., u_k\} \in \mathcal{V}$ y $\{v_1, v_2, ..., v_k\} \in \mathcal{V}'$.

2.2 Homología. Homología persistente

En la sección anterior hemos fijado el concepto de complejo simplicial, que nos será muy útil a lo largo de esta sección para desarrollar la noción de *espacio vectorial de homología*. A diferencia de como surgió el concepto de *espacio vectorial de homología* en la historia de las matemáticas, en el presente trabajo desarrollaremos primero la noción general para luego reducir al caso particular de la *homología simplicial*. Para ello emplearemos la guía proporcionada por [3, 13, 4].

Comenzamos la sección con algunas definiciones básicas que serán necesarias para alcanzar la definición de los espacios vectoriales de homología.

Definición 2.2.1. Sea R un anillo. Definimos el *R-módulo izquierdo* sobre R como el conjunto M junto con las operaciones:

- Suma: $M \times M \to M, (x, y) \mapsto x + y$, y
- Producto por escalares: $R \times M \to M, (r, x) \mapsto rx$,

que satisfacen las siguientes propiedades:

1. La suma es asociativa, conmutativa, M contiene un elemento neutro para ella y todo elemento tiene opuesto. Es decir, $(M, +)$ es un grupo abeliano.
2. Para cualesquiera x, y de M y r, s de R:
   (a) $(r + s)x = rx + sx$ (distributiva respecto a la suma de R).
   (b) $(rs)x = r(sx)$ (asociativa).
   (c) $r(x + y) = rx + ry$ (distributiva respecto a la suma de M).
   (d) Si R es unitario, $1x = x$.

De manera análoga definimos el *R-módulo derecho*. Si R es conmutativo, entonces el R-módulo izquierdo es el mismo que el R-módulo derecho. En tal caso nos referiremos a él simplemente como *R-módulo*.

Nota. De la noción de R-módulo nos interesan particularmente las siguientes propiedades: todo grupo abeliano es $\mathbb{Z}$-módulo, y si R es un cuerpo, entonces las nociones de R-módulo y R-espacio vectorial coinciden.

Como es natural, a la noción de R-módulo le sigue la definición de *R-submódulo*.

Definición 2.2.2. Sea M un R-módulo. Definimos el *R-submódulo* de M como el subconjunto, no vacío, N de M tal que es cerrado para opuestos y para las operaciones heredadas de M. A la relación «ser submódulo de» la denotaremos por $\leq$.

Ahora que hemos definido los R-submódulos, vamos a definir los cocientes asociados.

Definición 2.2.3. Sea M un módulo sobre un anillo R y N un submódulo de M. Consideremos la relación de equivalencia en M dada por:

$$x \sim y \text{ si } x - y \in N,$$

con $x, y \in M$. Mediante esta relación de equivalencia definimos el conjunto cociente M/N. Ahora bien, mediante las operaciones suma y producto por escalares de M podemos inducir las correspondientes operaciones sobre M/N de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} (x + N) + (y + N) &= (x + y) + N, \\ r(x + N) &= rx + N, \end{aligned}$$

donde $x, y \in M$ y $r \in R$. Así, al conjunto cociente M/N junto con las operaciones previas lo llamaremos *módulo cociente* de M sobre N.

Tras estas consideraciones básicas, comenzamos el camino que nos conducirá a la definición de los *espacios vectoriales de homología*. Empezamos el camino con la definición de *complejo de cadenas*.

Definición 2.2.4. Sea R un anillo. Decimos que un *complejo de cadenas* sobre R es un conjunto $\mathcal{C}_* = \{(C_p, \partial_p) \mid p \in \mathbb{Z}\}$ de R-módulos y R-homomorfismos $\{\partial_p \colon C_p \to C_{p-1} \mid p \in \mathbb{Z}\}$, que satisfacen la siguiente relación: $\partial_p \circ \partial_{p+1} = 0$. Se denota por $(\mathcal{C}_*, \partial)$ y a ∂ se le llama el diferencial del complejo.

Notemos que la propiedad anterior es equivalente a que $Im(\partial_{p+1}) \leq Ker(\partial_p),\ p \in \mathbb{Z}$. Es habitual pensar en $\mathcal{C}_*$ como una sucesión infinita cuya representación es como sigue:

$$\cdots \xrightarrow{\partial_2} C_1 \xrightarrow{\partial_1} C_0 \xrightarrow{\partial_0} C_{-1} \xrightarrow{\partial_{-1}} \cdots$$

Fijemos ahora nuestra atención en los R-submódulos de C_p: $Im(\partial_{p+1})$ y $Ker(\partial_p)$.

Definición 2.2.5. Sea $(\mathcal{C}_*, \partial)$ un complejo de cadenas sobre R anillo. Definimos los siguientes R-submódulos de C_p:

1. $Z_p(\mathcal{C}_*) = Ker(\partial_p)$. A sus elementos los llamaremos p-ciclos.
2. $B_p(\mathcal{C}_*) = Im(\partial_{p+1})$. A sus elementos los llamaremos p-bordes.

Ahora bien, en virtud de la relación de inclusión entre ambos submódulos y de las operaciones heredadas, podemos considerar el *R-módulo cociente* $Z_p(\mathcal{C}_*)/B_p(\mathcal{C}_*)$. Este cociente constituye una pieza fundamental del presente trabajo y merece una definición detallada:

Definición 2.2.6. Sea $(\mathcal{C}_*, \partial)$ un complejo de cadenas sobre R anillo. Definimos el p-ésimo R-módulo de homología de $\mathcal{C}_*$ como el cociente:

$$H_p(\mathcal{C}_*) := Z_p(\mathcal{C}_*)/B_p(\mathcal{C}_*).$$

Ahora que ya tenemos una noción general de los R-módulos de homología, pasamos al caso particular que nos ocupa en el presente trabajo: *la homología simplicial*. El primer paso será definir el complejo de cadenas asociado a un complejo simplicial, para ello será necesario fijar los R-módulos y R-homomorfismos apropiados.

Ante esta decisión, lo habitual es fijar una orientación para los símplices (por ejemplo, la dada por el orden lexicográfico de sus vértices) y definir los grupos abelianos de cadenas dados por las sumas formales de los símplices con coeficientes en $\mathbb{Z}$ ($\mathbb{Z}$-módulos).

No obstante, en el presente trabajo ignoramos la noción de orientación, pues no aporta beneficio alguno a nuestros propósitos. Así pues, a partir de ahora, fijaremos el anillo $R = \mathbb{Z}_2$, con lo que podremos ver los $\mathbb{Z}_2$-módulos que conformarán nuestro complejo de cadenas como $\mathbb{Z}_2$-espacios vectoriales cuya base vendrá dada por los símplices del complejo simplicial escogido.

Veamos esto de manera más formal:

Definición 2.2.7. Sea $\mathcal{V}$ un complejo simplicial y $p \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ tal que $p \leq dim\mathcal{V}$. Una *p-cadena* es una suma formal de p-símplices de $\mathcal{V}$. Es decir, si c es una p-cadena, entonces $c = \sum a_i\sigma_i,\ \sigma_i \in \mathcal{V}$ y $a_i \in \mathbb{Z}_2$.

Con la noción de p-cadena, pasamos a la definición de los $\mathbb{Z}_2$-módulos que hemos introducido anteriormente.

Definición 2.2.8. Sea $\mathcal{V}$ un complejo simplicial abstracto. Definimos el $\mathbb{Z}_2$*-módulo de p-cadenas* de $\mathcal{V}$ como el conjunto de todas las p-cadenas de $\mathcal{V}$, con la operación suma componente a componente con coeficientes en $\mathbb{Z}_2$, y el producto externo por elementos de $\mathbb{Z}_2$ usual. Lo denotaremos por $(C_p(\mathcal{V}), +)$ o simplemente $C_p(\mathcal{V})$.

Tal y como ya hemos advertido antes, estos $\mathbb{Z}_2$-módulos pueden ser vistos como espacios vectoriales cuyas bases vienen dadas por los p-símplices de $\mathcal{V}$. Así pues, en adelante, para una mayor claridad nos referiremos a ellos como *espacios vectoriales de p-cadenas.*

Habiendo especificado los R-módulos que vamos a emplear, pasamos a definir los R-homomorfismos asociados.

Definición 2.2.9. Sea $\mathcal{V}$ un complejo simplicial abstracto, $\sigma \in \mathcal{V}$ y $\sigma = \{u_0, ..., u_p\}$. Definimos el *operador borde para un símplice* como:

$$B_p(\sigma) = \sum_{j=0}^{p} \{u_0, ..., \widehat{u_j}, ..., u_p\}.$$

La suma anterior es una suma formal, donde $\widehat{u_j}$ indica que omitimos u_j. Ahora extendemos dicho operador para cadenas, en concreto:

$$\begin{array}{rcl} \partial_p \colon C_p(\mathcal{V}) & \to & C_{p-1}(\mathcal{V}) \\ c = \sum \sigma_i & \mapsto & \partial_p(c) = \sum B_p(\sigma_i). \end{array} \tag{2.2.1}$$

En esta definición hemos omitido los coeficientes en las cadenas pues trabajamos sobre $\mathbb{Z}_2$. A ∂_p lo llamaremos *homomorfismo borde.*

Demostración. Vamos a probar que ∂_p es, en efecto, un $\mathbb{Z}_2$-homomorfismo.

Sean $\sigma, \tau \in \mathcal{V}_p$ tales que $\sigma = \{u_0, ..., u_p\}$ y $\tau = \{w_0, ..., w_p\}$.

$B_p(\sigma) + B_p(\tau) = \sum_{j=0}^{p} \{u_0, ..., \widehat{u_j}, ..., u_p\} + \sum_{j=0}^{p} \{w_0, ..., \widehat{w_j}, ..., w_p\} = \sum_{i=0}^{p} \sum_{j=0}^{p} \{u_0, w_0, ..., \widehat{u_i}, \widehat{w_j}, ..., u_p, w_p\} = B_p(\sigma + \tau)$.

Esto prueba que B_p conmuta con la suma para símplices. Se sigue que ∂_p conmuta con la suma para cadenas.

Ahora debemos probar que ∂_p conmuta con el producto exterior, pero esto es inmediato pues:

- $\partial_p(0c) = \partial_p(0) = 0 = 0\partial_p(c)$.

- $\partial_p(1c) = \partial_p(c) = 1\partial_p(c)$.

Se concluye lo que queremos probar. □

Por lo tanto, ya tenemos casi construido nuestro complejo de cadenas asociado a un complejo simplicial. Sólo resta enunciar el siguiente resultado:

Teorema 1. *Sea ∂_p definida como en 2.2.1. Entonces para todo $p \in \{0, 1, 2, ..\}$, $\partial_p \circ \partial_{p+1} = 0$.*

Demostración. Sea $c \in C_{p+1}(\mathcal{V})$ y, sin pérdida de generalidad (en virtud de la definición 2.2.1), supongamos que $c = v$, con $v \in \mathcal{V}$. Es decir, c es un elemento de la base del espacio vectorial de cadenas $C_{p+1}(\ \mathcal{V})$.Veamos que $\partial_p(\partial_{p+1}(c)) = 0$.

En efecto, notemos que, si $p \geq 1$ (si $p = 0$ es trivial), v posee $\binom{p+2}{p}$ caras distintas de codimensión 2. Sea τ una de ellas, es decir, τ es un $(p-1)$-símplice y $\tau \subset v$.

Si probamos que τ aparece en 2 caras de codimensión 1 de v habremos terminado, pues aparecerá 2 veces al hacer $\partial_p(\partial_{p+1}(c))$ y como estamos en $\mathbb{Z}_2$ se anulará. Esto implica lo que queremos probar.

Observemos que τ tiene cardinalidad p mientras que v tiene dimensión $p + 2$. Por lo tanto, supongamos, sin pérdida de generalidad, que τ viene dado por los p últimos elementos de v. Así, tenemos dos elementos libres en v, y al calcular las caras de codimensión 1 de v, con los p últimos elementos fijos, tendremos únicamente 2 caras que contienen a τ. □

Nota. Coloquialmente, diremos que «el borde del borde es vacío». Notemos que el teorema anterior denota lo significativo de la elección del anillo sobre el que se toman los coeficientes, pues la demostración sería distinta y los cálculos posteriores se complican. Veremos este hecho en los siguientes ejemplos.

Veamos un ejemplo que ilustre el teorema anterior, es decir, que «el borde del borde es vacío».

Ejemplo 2.2.1. Supongamos el complejo simplicial $\mathcal{V}$ del ejemplo anterior y $\sigma = \{a, b, c\} \in \mathcal{V}$.

Así pues, tendremos $c \in C_2(\mathcal{V})$, con $c = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ la cadena asociada a σ en $C_2(\mathcal{V})$. Ahora expresamos las aplicaciones ∂_2 y ∂_1 en forma matricial:

$$\partial_2 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \partial_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Ahora, teniendo en cuenta que estamos operando en un cuerpo de característica 2, hacemos $\partial_1(\partial_2(c))$:

$$\partial_1(\partial_2(c)) = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \left(\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \right) =$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \vec{0}.$$

Hemos comprobado que, en efecto, «el borde del borde» de c es 0. Para comprobarlo para cualquier vector bastará observar que:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

En este ejemplo ya apreciamos lo significativo de elegir el cuerpo $\mathbb{Z}_2$, pues en otro caso, los productos matriciales son más difíciles de calcular. ◀

Tras el resultado anterior y las construcciones previas, hemos acabado con la construcción del complejo de cadenas asociado a un complejo simplicial. En consecuencia, ya estamos en posición de definir los *espacios vectoriales de homología*.

Definición 2.2.10. Sea $p \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ y $\mathcal{V}$ un complejo simplicial. Definimos el *p-ésimo espacio vectorial de homología simplicial* del complejo simplicial $\mathcal{V}$ como el espacio vectorial cociente $Ker(\partial_p)/Im(\partial_{p+1})$, donde ∂_p está definida como en 2.2.1. Lo denotaremos por $H_p(\mathcal{V})$.

A su dimensión, $dimH_p(\mathcal{V}) = dimKer(\partial_p) - dimIm(\partial_{p+1})$, la llamaremos *p-ésimo número de Betti*, y la denotaremos por $\beta_p(\mathcal{V})$.

Intuitivamente, los p-ciclos que no son p-bordes representan agujeros p-dimensionales. Por lo tanto, $\beta_p(\mathcal{V})$ representa el número de p-agujeros de $\mathcal{V}$. Además, notemos que si $dim\mathcal{V} = n$, entonces $\forall p > n \;\; H_p(\mathcal{V}) = \emptyset$, pues $\mathcal{V}_p = \emptyset$.

Ahora veamos un ejemplo (propuesto en [15]) en el que calculamos los números de Betti dado un complejo simplicial abstracto.

Ejemplo 2.2.2. Supongamos el siguiente complejo simplicial abstracto:

$$\mathcal{V} = \{\{a\},\{b\},\{c\},\{d\},\{e\},\{a,b\},\{a,c\},\{a,d\},\{b,c\},\{c,d\},\{a,b,c\}\}.$$

Construimos la secuencia de espacios de cadenas asociados:

$$\emptyset \longrightarrow C_2(\mathcal{V}) \xrightarrow{\partial_2} C_1(\mathcal{V}) \xrightarrow{\partial_1} C_0(\mathcal{V}) \xrightarrow{\partial_0} \emptyset.$$

Calculamos ∂_2 y ∂_1, y los expresamos de manera matricial:

$$\partial_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \partial_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Ahora para calcular $\beta_0(\mathcal{V})$ y $\beta_1(\mathcal{V})$ bastará calcular el rango de las anteriores matrices. Observamos que:

$$\partial_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ \boxed{1} & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & \boxed{1} & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & \boxed{1} & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Con lo que, $dimIm(\partial_1) = 3$ y $dimKer(\partial_1) = 2$, y por lo tanto, $\beta_1(\ \mathcal{V}) = 1$ y $\beta_0(\mathcal{V}) = 2$. La representación gráfica de $\mathcal{V}$ en $\mathbb{R}^2$ nos queda:

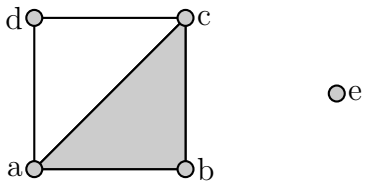


Figura 2.2: Representación geométrica del complejo simplicial $\mathcal{V}$.

Tal y como ya hemos comentado, los números de Betti nos cuentan los agujeros p-dimensionales. En este caso, si observamos la representación anterior, vemos que tenemos un agujero 1-dimensional y dos componentes conexas, que se corresponde con los números de Betti que hemos calculado.

Notemos que, al igual que en el ejemplo anterior, si trabajamos sobre otro cuerpo que no sea $\mathbb{Z}_2$, las matrices y sus rangos son más difíciles de calcular. Por ejemplo, si trabajamos sobre $\mathbb{Q}$, tendremos que lidiar con la orientabilidad de los símplices para ser consistentes con las definiciones previas. La orientabilidad de los símplices nos provoca la aparición se signos negativos dentro las matrices, lo que, a mayor escala, dificulta el cálculo de los rangos. No obstante, recordemos que la idea intuitiva sobre los números de Betti nos indica que éstos cuentan agujeros p-dimensionales, y por lo tanto, éstos permanecerán constantes ante cualquier variación del cuerpo de coeficientes escogido. ◀

Al igual que hicimos para los complejos simpliciales, veamos como podemos definir morfismos, de manera más general, entre los objetos que estamos manejando.

Consideremos una aplicación entre complejos simpliciales, $f\colon \mathcal{V} \to \mathcal{V}'$. Aplicando el mismo razonamiento que para la definición del homomorfismo borde, tenemos que f induce un homomorfismo entre espacios vectoriales de cadenas :

$$\begin{array}{rcl} \overline{f_p}\colon C_p(\mathcal{V}) & \to & C_p(\mathcal{V}') \\ c = \sum\limits_{\sigma\in\mathcal{V}_p} \sigma & \mapsto & \overline{f_p}(c) = \sum\limits_{f(\sigma)\in\mathcal{V}'_p} f(\sigma). \end{array} \tag{2.2.2}$$

Nota. Si consideramos el caso particuar $f = \iota$ (la inclusión) tendremos que f induce una inclusión entre los complejos de cadenas asociados a $\mathcal{V}$ y $\mathcal{V}'$. Es decir, $C_*(\mathcal{V}) \subset C_*(\mathcal{V}')$.

Además, tal f nos permite construir la secuencia:

$$\begin{array}{ccccccccccccc} \emptyset & \to & C_p(\mathcal{V}) & \overset{\partial_p}{\to} & C_{p-1}(\mathcal{V}) & \overset{\partial_{p-1}}{\to} & \cdots & \overset{\partial_2}{\to} & C_1(\mathcal{V}) & \overset{\partial_1}{\to} & C_0(\mathcal{V}) & \overset{\partial_0}{\to} & \emptyset \\ & & \downarrow \overline{f_p} & & \downarrow \overline{f_{p-1}} & & & & \downarrow \overline{f_1} & & \downarrow \overline{f_0} & & \\ \emptyset & \to & C_p(\mathcal{V}') & \underset{\partial'_p}{\to} & C_{p-1}(\mathcal{V}') & \underset{\partial'_{p-1}}{\to} & \cdots & \underset{\partial'_2}{\to} & C_1(\mathcal{V}') & \underset{\partial'_1}{\to} & C_0(\mathcal{V}') & \underset{\partial'_0}{\to} & \emptyset. \end{array} \tag{2.2.3}$$

De esta secuencia observamos que:

$$\overline{f_{p-1}} \circ \partial_p = \partial'_p \circ \overline{f_p}.$$

En consecuencia, $\overline{f_p}$ induce un homomorfismo entre espacios vectoriales de homología:

$$\begin{array}{rcl} f_p\colon H_p(\mathcal{V}) & \to & H_p(\mathcal{V}') \\ [c] & \mapsto & [\overline{f_p(c)}]. \end{array}$$

Concluimos que, dada una aplicación f entre complejos simpliciales, siempre es posible asociarle una aplicación f_p entre grupos de homología.

Nota. Este propiedad es muy importante, de hecho, se conoce como *funtorialidad* y pertenece al ámbito de la teoría de categorías que queda fuera del alcance del presente trabajo.

Si bien los espacios vectoriales de homología de un complejo simplicial abstracto nos aportan mucha información acerca de sus características topológicas, esta información tiene bastante margen de mejora pues no nos dice nada de la variable «tiempo», es decir, sobre el carácter dinámico de la evolución de un complejo simplicial si este evolucionara en el tiempo. Pero, ¿Cómo introducimos la noción de tiempo en un complejo simplicial abstracto? Esta pregunta motiva la siguiente definición:

Definición 2.2.11. Sea $\mathcal{V}$ un complejo simplicial abstracto finito. Consideremos la secuencia $\mathcal{V}^1 \subset \mathcal{V}^2 \subset \cdots \subset \mathcal{V}^{k-1} \subset \mathcal{V}^k = \mathcal{V}$ de subcomplejos simpliciales cualesquiera de $\mathcal{V}$. A $\mathcal{V}$ junto con su secuencia de subcomplejos simpliciales encajados lo llamaremos *complejo simplicial filtrado.*

Esta noción nos habilita la variable «tiempo», pues nos permite preguntarnos en que momento de la secuencia aparecerá una cierta característica topológica y cuanto «tiempo» sobrevivirá dicha característica.

Hay muchas maneras de construir la secuencia complejos simpliciales, por ejemplo, empleando el *complejo simplicial de Čech*. Su construcción se realiza de la siguiente manera:

Sea $\mathcal{V}$ un complejo simplicial y $\mathcal{U}$ un cubrimiento de $\mathcal{V}$. Los p-símplices del complejo simplicial de Čech vendrán dados por la intersección no vacía de p+1 conjuntos de $\mathcal{U}$.

Lo interesante de este método es que si $\mathcal{U}$ verifica ciertas condiciones, el *Teorema del nervio* garantiza que el complejo de Čech recupera la homología de $\mathcal{V}$ (para más detalles véase [5]). Ahora bien, ¿Cómo podemos capturar y visualizar esta nueva información? Empleando la *homología persistente*.

Nota. En el presente trabajo nos ceñiremos a la homología persistente definida sobre un complejo simplicial filtrado. No obstante, cabe destacar que esta noción tiene una generalización conocida como *módulo de persistencia* que se define sobre un conjunto parcialmente ordenado.

Definición 2.2.12. Sea $\mathcal{V}^1 \subset \mathcal{V}^2 \subset \cdots \subset \mathcal{V}^{k-1} \subset \mathcal{V}^k = \mathcal{V}$ un complejo simplicial filtrado. Definimos los *p-ésimos espacios vectoriales de homología persistente* como las imágenes de los homomorfismos inducidos por la inclusión, $H_p^{i,j} = Im f_p^{i,j}$, con $0 \leq i \leq j \leq k$.

A su dimensión, $dim H_p^{i,j}$, la llamaremos *p-ésimo número de Betti persistente* y la denotaremos por $\beta_p^{i,j}$.

Los homomorfismos $f_p^{i,j}$ los definimos siguiendo la idea dada por la funtorialidad. Es decir, tendremos el diagrama:

$$
\begin{array}{ccccccccccccc}
\emptyset & \to & C_p(\mathcal{V}^1) & \xrightarrow{\partial_p^1} & C_{p-1}(\mathcal{V}^1) & \xrightarrow{\partial_{p-1}^1} & \cdots & \xrightarrow{\partial_2^1} & C_1(\mathcal{V}^1) & \xrightarrow{\partial_1^1} & C_0(\mathcal{V}^1) & \xrightarrow{\partial_0^1} & \emptyset \\
 & & \downarrow \overline{f_p^{1,2}} & & \downarrow \overline{f_{p-1}^{1,2}} & & & & \downarrow \overline{f_1^{1,2}} & & \downarrow \overline{f_0^{1,2}} & & \\
\emptyset & \to & C_p(\mathcal{V}^2) & \xrightarrow{\partial_p^2} & C_{p-1}(\mathcal{V}^2) & \xrightarrow{\partial_{p-1}^2} & \cdots & \xrightarrow{\partial_2^2} & C_1(\mathcal{V}^2) & \xrightarrow{\partial_1^2} & C_0(\mathcal{V}^2) & \xrightarrow{\partial_0^2} & \emptyset \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\emptyset & \to & C_p(\mathcal{V}^{k-1}) & \xrightarrow{\partial_p^{k-1}} & C_{p-1}(\mathcal{V}^{k-1}) & \xrightarrow{\partial_{p-1}^{k-1}} & \cdots & \xrightarrow{\partial_2^{k-1}} & C_1(\mathcal{V}^{k-1}) & \xrightarrow{\partial_1^{k-1}} & C_0(\mathcal{V}^{k-1}) & \xrightarrow{\partial_0^{k-1}} & \emptyset \\
 & & \downarrow \overline{f_p^{k-1,k}} & & \downarrow \overline{f_{p-1}^{k-1,k}} & & & & \downarrow \overline{f_1^{k-1,k}} & & \downarrow \overline{f_0^{k-1,k}} & & \\
\emptyset & \to & C_p(\mathcal{V}^k) & \xrightarrow{\partial_p^k} & C_{p-1}(\mathcal{V}^k) & \xrightarrow{\partial_{p-1}^k} & \cdots & \xrightarrow{\partial_2^k} & C_1(\mathcal{V}^k) & \xrightarrow{\partial_1^k} & C_0(\mathcal{V}^k) & \xrightarrow{\partial_0^k} & \emptyset.
\end{array}
$$

Donde los homomorfismos $\overline{f_p^{i,j}}$ entre espacios vectoriales de cadenas vienen inducidos por el homomorfismo inclusión $f^{i,j}\colon \mathcal{V}^i \hookrightarrow \mathcal{V}^j$ con $0 \leq i \leq j \leq k$, como en 2.2.2. Ahora, aplicando el mismo razonamiento que en 2.2.3 definimos los homomorfismos entre espacios vectoriales de homología $f_p^{i,j}$.

Ahora que ya tenemos una herramienta que nos captura las características topológicas junto con la variable «tiempo» en un complejo simplicial abstracto filtrado, necesitamos

una manera gŕafica de visualizar esta información. Para ello, emplearemos los *diagramas de barras* y los *diagramas de persistencia*.

Para construir los diagramas de barras, dibujamos $\beta_p^{i,i+1}$ puntos para la i-ésima filtración, y los conectamos con los $\beta_p^{i+1,i+2}$ puntos de la filtración i+1 atendiendo al siguiente crietrio: unimos los puntos a de la filtración i y b de la filtración i+1, si la clase del elemento que genera a a es preimagen por $f_p^{i,i+1}$ de la clase del elemento que genera a b. Si la clase del elemento que genera a a es enviada a 0 por $f_p^{i,i+1}$ dibujaremos una linea que sale de a en la filtración i hasta la filtración i+1.

En este caso, diremos que la clase del elemento que genera a a *muere* en la filtración i+1. Si la preimagen de la clase del elemento que genera a a por $f_p^{i-1,i}$ es el 0, diremos que la clase *nace* en la filtración i.

Para los diagramas de persistencia, dibujaremos $\sum_p \beta_p^{i,j}$ puntos cuyas coordenadas en $\mathbb{R}^2$ vendrán dadas por su filtración de nacimiento y de muerte en ese orden.

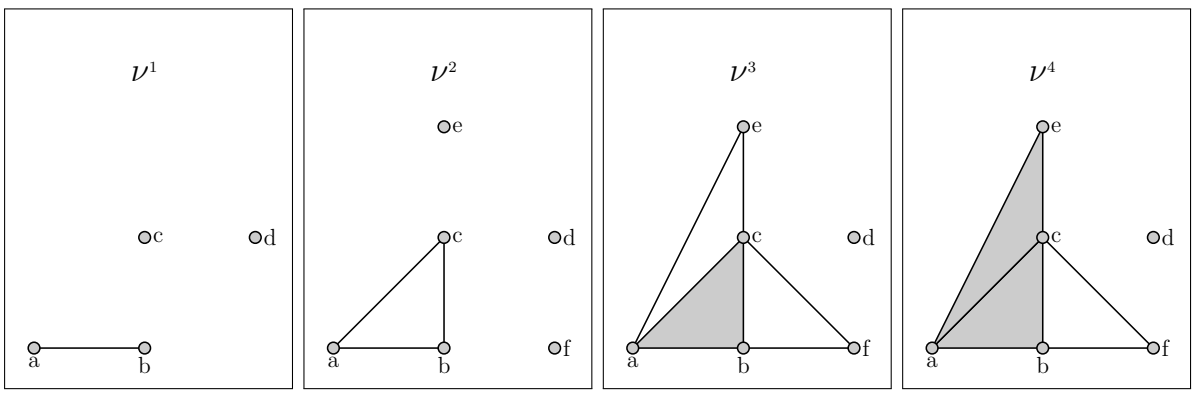
Nota. Estos diagramas dependen de la elección de la base de los espacios vectoriales subyacentes. Una mala elección nos llevará a diagramas ilegibles. No obstante, la existencia de una «buena» base está garantizada (véase [20]) y la coherencia de los diagramas también (véase [2]).

Veamos un ejemplo (propuesto en [15]) ilustrativo de estos conceptos:

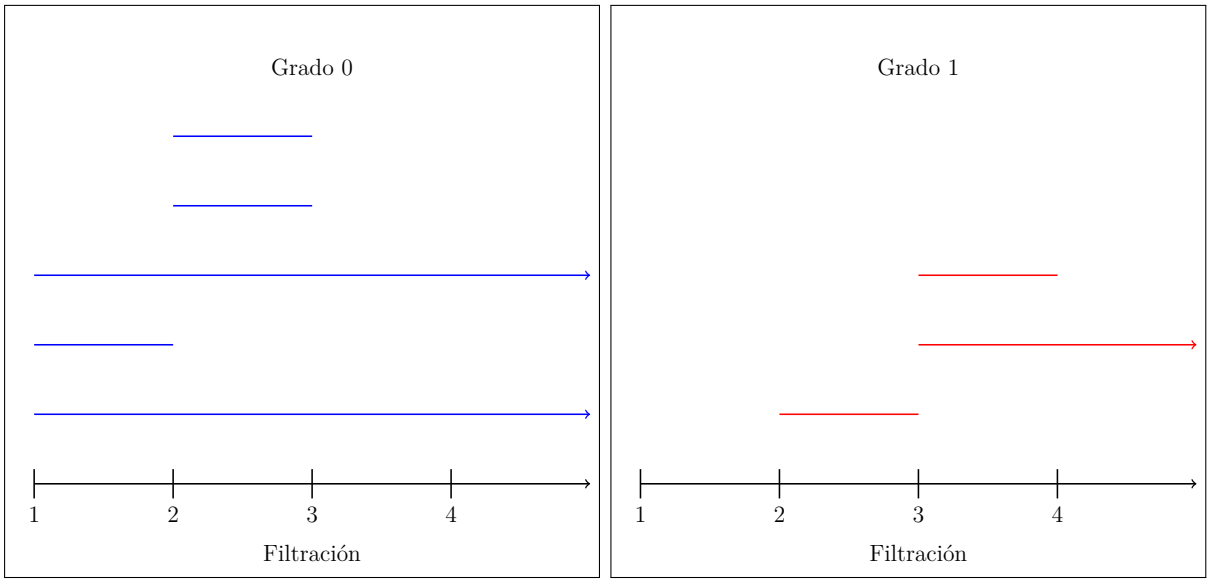
Ejemplo 2.2.3. Consideremos el siguiente complejo simplicial filtrado: $\mathcal{V}^1 \subset \mathcal{V}^2 \subset \mathcal{V}^3 \subset \mathcal{V}^4 = \mathcal{V}$. Donde:

- $\mathcal{V}^1 = \{\{a\}, \{b\}, \{c\}, \{d\}, \{a, b\}\}$.
- $\mathcal{V}^2 = \{\{a\}, \{b\}, \{c\}, \{d\}, \{e\}, \{f\}, \{a, b\}, \{a, c\}, \{b, c\}\}$.
- $\mathcal{V}^3 = \{\{a\}, \{b\}, \{c\}, \{d\}, \{e\}, \{f\}, \{a, b\}, \{a, c\}, \{a, e\}, \{b, c\}, \{b, f\}, \{c, f\}, \{c, e\}, \{a, b, c\}\}$.
- $\mathcal{V}^4 = \{\{a\}, \{b\}, \{c\}, \{d\}, \{e\}, \{f\}, \{a, b\}, \{a, c\}, \{a, e\}, \{b, c\}, \{b, f\}, \{c, f\}, \{c, e\}, \{a, b, c\}, \{a, c, e\}\}$.

Veamos su representación gráfica en $\mathbb{R}^2$:



Ahora vamos a dibujar los diagramas de barras correspondientes:

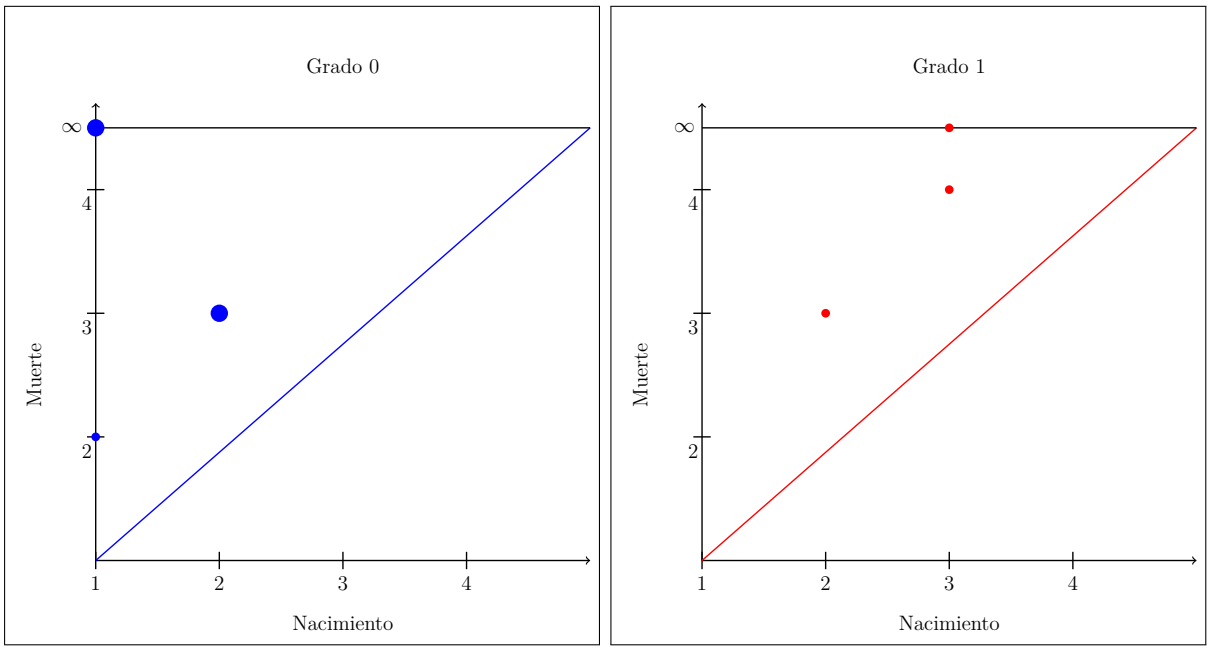


Como podemos observar, en el diagrama de la izquierda (grado 0) tenemos inicialmente (filtración 1 que corresponde al dibujo de $\mathcal{V}^1$) 3 clases de equivalencia que son, en orden ascendente en el diagrama, las clases $[d], [a+b]$ y $[c]$. Como ya hemos visto, esta representación se corresponde con las componentes conexas de $\mathcal{V}^1$. Ahora, a medida que avanzamos en las filtraciones podemos ver cómo la clase $[a+b]$ muere en la filtración 2 (que se corresponde con el dibujo de $\mathcal{V}^2$), nacen dos clases más ($[f]$ y $[e]$ en orden ascendente en el diagrama), ambas clases mueren en la filtración 3 (véase el dibujo de $\mathcal{V}^3$), y finalmente, las clases $[d]$ y $[c]$ persisten.

Observemos ahora el diagrama de la derecha (grado 1). Como se puede ver, en la filtración 1 no tenemos ninguna clase de equivalencia, tendremos que esperar a la filtración 2 en la que nace la clase $[ab+bc+ac]$. Esta clase muere en la siguiente filtración, pero nacen otras 2: la clase $[bc+cf+bf]$ y la clase $[ac+ae+ce]$. Esta última morirá en la filtración 4, no obstante, la clase $[bc+cf+bf]$ persiste. Como ya mencionamos, estas clases de equivalencia se corresponden con agujeros 2-dimensionales cuya evolución podemos ir viendo en los dibujos anteriores que representan los pasos en la filtración del complejo simplicial $\mathcal{V}$.

De los anteriores diagramas podemos extraer información topológica muy importante acerca de nuestro complejo simplicial: vemos que presenta dos componentes conexas y un agujero 2-dimensional. Esta información nos la aporta la homología persiste, ya que las clases de equivalencia que persisten representan características topológicas, mientras que las que mueren en alguna filtración representan ruido.

Por último, visualizamos los diagramas de persistencia:



En este caso, si nos fijamos en el diagrama izquierdo (grado 0), vemos que hay una clase de equivalencia ($[a+b]$) que nace en la filtración 1 y muere en la filtración 2, dos clases ($[f]$ y $[e]$) que nacen en la filtración 2 y mueren en la filtración 3, y dos clases que nacen en la filtración 1 y persisten. Para representar esta persistencia se ha dibujado en el diagrama una línea horizontal que simboliza el infinito. Como se puede ver en los diagramas, para remarcar que hay varias clases que comparten nacimiento y muerte se han señalizado con un punto grueso.

Si nos fijamos ahora en el diagrama derecho (grado 1), observamos cómo hay una clase de equivalencia ($[ab+bc+ac]$) que nace en la filtración 2 y muere en la filtración 3, una clase ($[ac+ae+ce]$) que nace en la filtración 3 y muere en la 4, y una clase ($[bc+cf+bf]$) que nace en la filtración 3 y persiste.

◀

2.3 Redes neuronales. Grafos subyacentes

Ahora cambiamos completamente de tema: nos alejamos momentáneamente de la formal topología algebraica y nos acercamos al mundo de la informática. En esta sección haremos una introducción hacia el otro concepto fundamental del presente trabajo: *las redes neuronales artificiales*. A direfencia de la sección anterior, en la presente sección haremos una aproximación un poco menos formal de las nociones que se introducen. Para el desarrollo de esta sección emplearemos la guía proporcionada por [6, 8, 7].

La historia del *aprendizaje profundo* y de las redes neuronales es muy amplia y queda fuera del alcance del presente trabajo. No obstante, conviene reseñar que, aunque los términos aprendizaje profundo y red neuronal nos parezcan algo reciente, la realidad es muy distinta. El origen de esta disciplina data de los años 40 de la mano de McCulloch y Pitts,

y ha sufrido varias etapas de desarrollo hasta llegar a nuestros días. Al igual que con otras líneas de investigación, la inteligencia artificial (y en particular el aprendizaje profundo) sufrió varios estancamientos y contratiempos hasta llegar a nuestros días («inviernos de la IA»). Por lo tanto, debemos agradecer a todos aquellos investigadores que, aun cuando no existía certeza del éxito de la inteligencia artificial, continuaron con su trabajo en la disciplina y la desarrollaron hasta nuestros días.

Supongamos que queremos que nuestro ordenador nos escriba con palabras un número entre 0 y 9, dado dicho número en cifras. Parece una tarea sencilla, ¿no? Bastará con desarrollar un programa que a partir de una entrada (la cifra) nos produzca una salida (la palabra) de entre las nueve posibilidades; en resumidas cuentas, con unas pocas sentencias condicionales tendremos el resultado esperado.

Pensemos ahora en la misma tarea, pero esta vez le proporcionaremos como entrada una imagen de la cifra manuscrita. El problema se acaba de volver significativamente más difícil. La aproximación que propone el aprendizaje automático es dejar que el ordenador «aprenda» a hacer esa tarea. La idea intuitiva es desarrollar un programa que tome dos entradas: la imagen y unos parámetros; y que a partir de estas entradas proporcione una salida, tras esto, ajustar automáticamente los parámetros para mejorar el desempeño del programa. Iterando este proceso de predicción-ajuste, llegaremos a proporcionar la salida correcta. Una vez que hemos encontrado los parámetros correctos, podemos abandonar este proceso de ajuste y tendremos un programa clásico que a partir de unas entradas produce unas salidas.

Teniendo clara la idea intuitiva, vamos a ver su desarrollo hasta llegar a las redes neuronales.

Supongamos que queremos modelar la relación lineal entre una variable objetivo (y) y p variables independientes. Este modelo se conoce como regresión lineal y puede ser expresado como:

$$\hat{y} = w_1 x_1 + w_2 x_2 + \cdots + w_p x_p + b,$$

donde $\hat{y}$ es valor estimado de y, $w_1, w_2, \cdots, w_p$ son los pesos que indican la importancia de cada variable independiente para el modelo, y b es el término independiente. En principio, $w_1, w_2, \cdots, w_p$ y b toman valores en $\mathbb{R}$. Siguiendo la terminología anterior, $\hat{y}$ es nuestra salida, las variables independientes son nuestras entradas y $w_1, w_2, \cdots, w_p$ son los parámetros a ajustar.

Para realizar este ajuste será necesario tener una métrica que nos indique si un conjunto de parámetros es mejor que otro. Para ello, usaremos el error cuadrático medio cuya expresión es la siguiente:

$$J(w_1, w_2, \cdots, w_p, b) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2,$$

donde n es el número de datos (cada dato es un vector de p entradas), y_i es la salida real y $\hat{y}_i$ es la salida estimada por el modelo. Nuestro objetivo es el de minimizar $J(w_1, w_2, \cdots, w_p, b)$ para que el modelo sea el mejor posible. Para minimizar esta función

será necesario ir ajustando los parámetros correctamente. Para ello se emplea el algoritmo conocido como *el descenso del gradiente*.

Supongamos una función continua y suave. Por ser ella continua sabemos que mapea puntos «cercanos» a puntos «cercanos», y por ser suave, sabemos que podemos aproximar valores «cercanos» a un punto de la función por una función lineal cuya pendiente sea la diferencial de la función. Este resultado se conoce como el *teorema de Taylor* (un enunciado más riguroso, así como su demostración, puede verse en [1]). Como bien sabemos, el gradiente de una función en un punto nos indica cuanto aumenta o disminuye el valor de dicha función ante un pequeño cambio en su entrada. Lo que haremos será «movernos un poco» en la dirección marcada por el gradiente pero en sentido opuesto, pues nuestro objetivo es el de minimizar la función. Iterando este proceso, iremos dando pequeños «pasos» minimizando $J(w_1, w_2, \cdots, w_p, b)$. En concreto, la actualización de los parámetros es como sigue:

$$\begin{array}{r} w_i^{siguiente} = w_i^{actual} - \alpha \frac{\partial J(w,b)}{\partial w_i} \\ b^{siguiente} = b^{actual} - \alpha \frac{\partial J(w,b)}{\partial w_i} \end{array} ,$$

donde α es el ratio de aprendizaje: un hiperparámetro que tenemos que elegir. Este paso de actualización se conoce como *propagación hacia atrás*, y el paso del cálculo de $\hat{y}$ se conoce como *propagación hacia adelante*. Una vez hemos logrado la configuración óptima de los parámetros ya podemos emplear este modelo para la predicción de y.

Nota. Notemos que el proceso presentado logra teóricamente la convergencia al mínimo local de $J(w_1, w_2, \cdots, w_p, b)$. Para converger de manera teórica al mínimo global son necesarias técnicas más avanzadas cuya descripción queda fuera del alcance del presente trabajo. Para más información véase [6].

Desafortunadamente, el modelo de regresión lineal es muy limitado: supone una relación lineal entre la variable objetivo y las variables independientes. Se hace necesaria una generalización que conseguiremos introduciendo una función no lineal a la regresión lineal. El primer modelo conocido con esta definición es el *perceptrón*. Este modelo se expresa de la siguiente manera:

$$\hat{y} = r(w_1 x_1 + w_2 x_2 + \cdots + w_p x_p + b),$$

donde, en general, $r(x)$ es una función no lineal que se conoce como *función de activación* y el resto de variables son como en la regresión lineal. En el caso particular del preceptrón, $r(x)$ está definida de la siguiente manera:

$$r(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x > 0 \\ 0 & \text{si } x \leq 0 \end{cases} \tag{2.3.1}$$

Nota. En el caso general, la función $r(x)$ es un hiperparámetro, es decir, debemos escoger una función no lineal. Lo habitual suele ser escoger la función sigmoide, la tangente hiperbólica o la función ReLU (véase [6]).

Notemos que la función $r(x)$ es continua pero no es suave, pues ella no es diferenciable en $x = 0$. Por lo tanto, teóricamente no podemos asegurar que $J(w_1, w_2, \cdots, w_p, b)$ lo sea. Sin embargo, por cuestiones prácticas, este incidente no se tiene en cuenta ya que normalmente no se alcanza el mínimo local de $J(w_1, w_2, \cdots, w_p, b)$ luego no hay problemas en que dicha función no sea diferenciable en dicho punto. Adicionalmente, cabe destacar que la mayoría de los algoritmos empleados para el cálculo de la derivada en el descenso del gradiente sólo calculan una de las derivadas laterales, luego el problema de la no diferenciabilidad queda «resuelto».

Tras salvar el anterior problema, podemos razonar de manera análoga a como hemos hecho para la regresión lineal y tendremos el mismo mecanismo para actualizar los parámetros y minimizar $J(w_1, w_2, \cdots, w_p, b)$. Obtenemos así un modelo más general que no presupone una relación lineal entre la variable objetivo y las variables independientes.

A fin de facilitar el entendimiento de nuestros siguientes pasos, vamos a representar gráficamente la estructura subyacente del perceptrón.

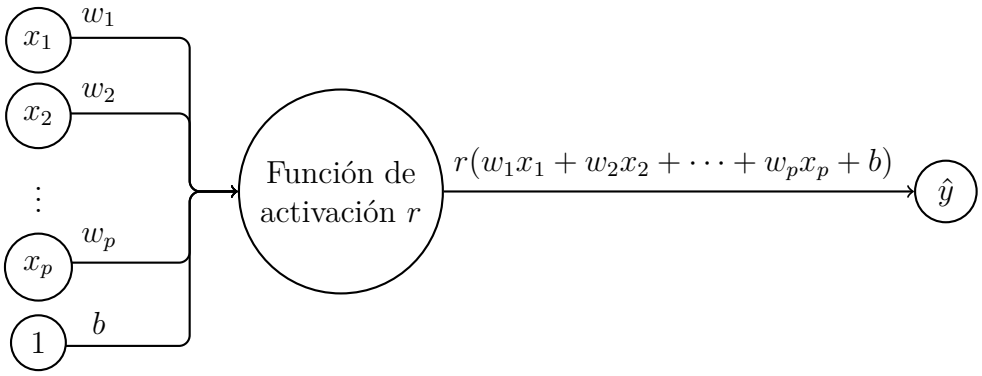


Figura 2.3: Representación gráfica de un perceptrón.

Esta representación gráfica y las limitaciones del perceptrón (para más detalles véase [11]), motivan el siguiente paso en la construcción de las *redes neuronales*. Este paso consiste en añadir más perceptrones en paralelo (nodos) y en serie (capas), consiguiendo lo que se conoce como *perceptrón multicapa*.

El perceptrón multicapa es caso particular de arquitectura de una red neuronal. En esta arquitectura las conexiones entre nodos (neuronas) se realizan únicamente hacia adelante y no se permite la conexión entre nodos de la misma capa, y la función de activación es r(x) definida en 2.3.1. Para los propósitos del presente trabajo, la función de activación no es relevante; pero sí lo es la dirección de las conexiones entre los nodos. Por lo tanto, nos ceñiremos al caso particular de las redes neuronales cuyas conexiones se realizan hacia adelante y sin conexiones dentro de la misma capa, estas redes neuronales se conocen como *redes neuronales prealimentadas*.

Nota. Aunque puede parecer que nos estamos restringiendo a un caso muy particular de las redes neuronales, el *teorema de aproximación universal* nos garantiza que una red de estas características puede aproximar cualquier función Borel-medible cuyo dominio tenga dimensión finita (para más información véase [9]).

En el presente trabajo nos interesa especialmente la estructura combinatoria asociada a las redes neuronales prealimentadas, es decir, los grafos subyacentes. En este sentido, veamos las siguientes definiciones:

Definición 2.3.1. Un *grafo* $G = (V, E)$ consiste en un conjunto finito V, cuyos elementos reciben el nombre de *vértices*, y un conjunto E de pares de elementos de V, cuyos elementos se conocen como *aristas*. Si $\{u, v\}$ es una arista de G, se dice que los vértices u y v son *adyacentes* y llamaremos a u y a v *extremos* de la arista.

Para el caso las redes neuronales prealimentadas, necesitamos un caso particular de grafo:

Definición 2.3.2. Un *grafo dirigido* es un grafo en el que se asigna un orden a los extremos de cada arista. Las aristas dirigidas se denotan (u, v), y nótese que $(u, v) \neq (v, u)$. En el caso de una arista dirigida (u, v), se dice que u es el *origen* y al vértice v se le llama *término* de la arista. Un grafo dirigido se dice *acíclico* si para cada vértice u, no existe una sucesión de aristas cuyo origen y término sea u.

Así pues, vamos a estudiar los grafos dirigidos acíclicos subyacentes a las redes neuronales prealimentadas. No obstante, dadas las características de las redes neuronales prealimentadas, todavía podemos exigirles una condición más a sus grafos subyacentes.

Definición 2.3.3. Sea $G = (V, E)$ un grafo dirigido acíclico. Diremos que G es *grafo nivelado* si tomando una partición de V en subconjuntos $L_1, \ldots, L_h$, se cumple que si $(u, v) \in E$ con $u \in L_i$ y $v \in L_j$, entonces $i > j$. A los conjuntos $L_1, \ldots, L_h$ se los conoce como *niveles* y a h como *altura*.

Para el caso que nos ocupa, consideraremos grafos nivelados en los que no puede haber saltos de nivel, es decir, las aristas del grafo tienen por origen un cierto nivel y su término es el nivel siguiente.

Recapitulando, dada una red neuronal, le asociaremos un grafo dirigido acíclico (nivelado) sobre el que aplicaremos la teoría de homología vista anteriormente. A fin de facilitar la comprensión, veamos un ejemplo:

Ejemplo 2.3.1. Supondremos una red neuronal prealimentada de 2 capas y 13 neuronas.

Etiquetaremos las neuronas (vértices) en orden ascendente desde la primera neurona de la capa de salida hasta la última de la capa de entrada. En las próximas representaciones seguiremos usando esta notación. Nótese que los cálculos y los resultados a los que llegaremos en este trabajo son independientes de esta notación, seguiremos este convenio pues es el elegido en [19].

Veamos su grafo asociado:

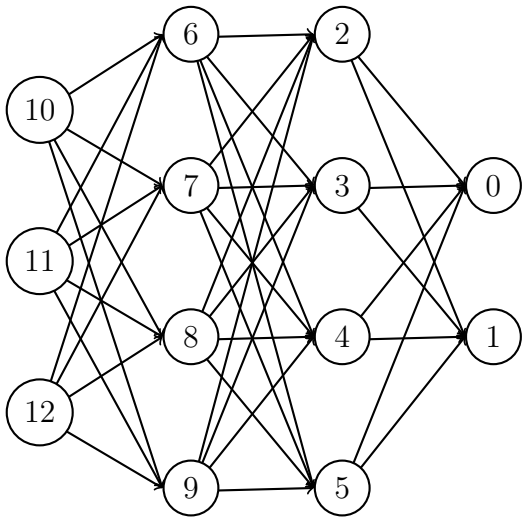


Figura 2.4: Grafo dirigido acíclico (nivelado) asociado a una red neuronal prealimentada de 13 neuronas y 2 capas.

◀

Habiendo fijado los conceptos de red neuronal prealimentada y de su grafo asociado, no parece evidente la aplicación de la homología persistente a estas nociones. Lo que haremos será, dada una red neuronal prealimentada, construir el complejo simplicial asociado a su grafo dirigido acíclico (DAG por sus siglas en inglés); a partir del complejo simplicial construiremos un complejo simplicial filtrado, y sobre éste consideraremos la homología persistente. En esta subsección ilustraremos únicamente el primer paso.

Si bien existen varias maneras de construir un complejo simplicial a partir de un DAG (véase [10]), en el presente trabajo desarrollaremos la más simple de todas ellas: la construcción del complejo simplicial *clique*. Esta construcción, aunque simple, nos servirá de inspiración para la construcción que realizaremos más adelante.

Definición 2.3.4. Definimos el *complejo simplicial clique* asociado a un grafo a partir de la construcción de sus p-símplices, $p \in \mathbb{N} \cup \{0\}$. Los p-símplices de un complejo simplicial clique están construidos de la siguiente manera: el conjunto de vértices $\{u_0, \ldots, u_p\}$ es un p-símplice si y sólo si cada par de vértices está conectado por una arista. Por simplicidad del lenguaje, nos referiremos a un complejo simplicial clique como clique.

Nota. Aunque la definición de clique es sencilla, el cálculo de un clique a partir de un grafo es un problema complejo. De hecho, este problema se conoce como *el problema del clique* y es NP-completo. Para más detalles véase [12].

Nótese que, por ser un complejo simplicial, un clique es cerrado por subconjuntos, esto es, cualquier subcomplejo simplicial de un clique es un clique. Veamos un ejemplo:

Ejemplo 2.3.2. Vamos a construir el clique asociado al ejemplo anterior. Lo denotaremos

por $\mathcal{V}$. Atendiendo a la definición de clique y a la figura 2.4 tendremos que:

$$\mathcal{V} = \{\{0\},\{1\},\{2\},\{3\},\{4\},\{5\},\{6\},\{7\},\{8\},\{9\},\{10\},\{11\},\{12\},\{0,2\},\{0,3\},$$
$$\{0,4\},\{0,5\},\{1,2\},\{1,3\},\{1,4\},\{1,5\},\{2,6\},\{2,7\},\{2,8\},\{2,9\},\{3,6\},\{3,7\},\{3,8\},$$
$$\{3,9\},\{4,6\},\{4,7\},\{4,8\},\{4,9\},\{5,6\},\{5,7\},\{5,8\},\{5,9\},\{6,10\},\{6,11\},\{6,12\},$$
$$\{7,10\},\{7,11\},\{7,12\},\{8,10\},\{8,11\},\{8,12\},\{9,10\},\{9,11\},\{9,12\}\}.$$

Observamos que $\mathcal{V}$ es un clique muy particular, pues está compuesto únicamente por vértices (0-símplices) y aristas (1-símplices). Su representación gráfica es la siguiente:

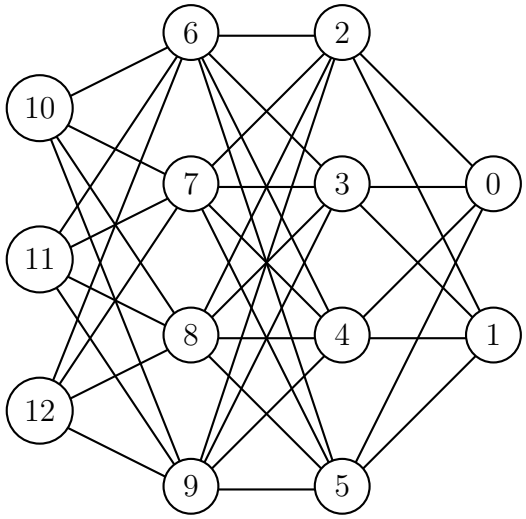


Figura 2.5: Representación gráfica del clique asociado a una red neuronal prealimentada de 13 neuronas y 2 capas.

◀

El ejemplo anterior pone de manifiesto que considerar el clique asociado a un grafo por niveles de una red neuronal prealimentada no es suficiente, pues el resultado es un clique trivial que nos aporta muy poca información sobre la red. Reflexionando sobre ello, se hace notar que debemos hacer una extensión mediante una cierta relación de transitividad.

No obstante, estamos adelantando acontecimientos pues en el siguiente capítulo veremos detalladamente el proceso necesario para la aplicación de la homología persistente a una red neuronal prealimentada. Así pues, finalizamos este capítulo de preeliminares en el que se han expuesto todas las nociones teóricas necesarias para la comprensión del artículo sobre el que versa el presente trabajo.

Capítulo 3
¿Es posible aplicar la homología persistente a las redes neuronales?

La respuesta a la pregunta del título es afirmativa, sin embargo, a lo largo de este caítulo iremos viendo que esta respuesta tiene sus matices. En este capítulo nos vamos a centrar en el desarrollo del artículo [19] sobre el que está basado el presente trabajo. La motivación principal de las técnicas que expondremos es esclarecer el funcionamiento interno de las redes neuronales prealimentadas, que habitualmente son vistas como «cajas negras». Mediante el uso de estas técnicas podremos extraer información relevante acerca de la complejidad y el grado de aprendizaje de las redes neuronales prealimentadas.

3.1 Explicación matemática

Partimos de la base del capítulo anterior, en el que se hizo notoria la necesidad de extender la noción de clique asociado a una red neuronal mediate una cierta idea de transitividad. Adicionalmente, debemos construir el complejo simplicial filtrado para poder aplicar la homología persistente.

Como bien sabemos, dada una red neuronal prealimentada, es posible asociarle un DAG. Ademas, aunque en el capítulo anterior no lo mencionamos, a este grafo podemos asociarle unos pesos que serán los parámetros de la red neuronal prealimentada. Pensando de esta manera, tendremos un DAG con pesos w_{ij}, con w_{ij} el parámetro de la red entre u_i y u_j. Notemos que $w_{ij} = 0$ si y sólo si u_i y u_j no están conectadas. Con esto en mente, damos la siguiente definición:

Definición 3.1.1. Definimos la *importancia* de u_i (salida) para u_j (llegada) como:

$$R_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ w_{ij}^+ / \sum_{k,k\neq j} w_{kj}^+ & \text{si } i \neq j \end{cases}$$

donde w_{ij}^+ es la parte positiva del parámetro w_{ij} de la red, esto es, $w_{ij}^+ := \text{máx}\{0, w_{ij}\}$.

Observamos que la importancia de una neurona para sí misma es de 1, y la importancia entre neuronas distintas es la proporción del peso entre ellas con respecto al resto de pesos de la neurona de llegada. Además, es claro que la importancia entre dos neuronas conectadas es un valor entre 0 y 1.

Nota. La noción de importancia entre neuronas y la anterior observación, nos permiten ver los DAG con pesos, asociados a una red neuronal prealimentada, como espacios de probabilidad.

La noción de importancia entre neuronas nos habilita la construcción de un complejo simplicial filtrado a partir del DAG asociado a la red. Sin embargo, teniendo en mente la idea de la transitividad, todavía tenemos que extender la definición de la importancia entre neuronas para aquellas que no estén directamente conectadas. Así pues, damos la siguiente definición:

Definición 3.1.2. Consideremos las neuronas u_0 y u_2 conectadas por el camino: $u_2 \to u_1 \to u_0$, la importancia de u_2 para u_0 es, según el camino entre ellas, $R_{21} \cdot R_{10}$. Por lo tanto, definimos la *importancia extendida* entre neuronas, y la denotamos por $\overline{R_{ij}}$, como:

$$\overline{R_{ij}} = \text{máx}\{R_{u_i u_{m_1}} \cdots R_{u_{m_n} u_j} \mid (u_i, u_{m_1}, ..., u_{m_n}, u_j) \in C_{ij}\} \tag{3.1.1}$$

donde C_{ij} denota el conjunto de todos los posibles caminos de u_i a u_j.

Nota. Nótese que es posible definir $\overline{R_{ij}}$ considerando varios caminos en C_{ij}. El autor ([19]) justifica la elección del máximo por eficiencia computacional.

Como ya mencionamos en el capítulo anterior, numeraremos los nodos (vértices) de un DAG con pesos, asociado a una red neuronal prealimentada, en orden ascendente, desde las neuronas de llegada hasta las de salida. Veamos, a continuación, un ejemplo sencillo para interiorizar estas definiciones que serán clave a lo largo de este capítulo.

Ejemplo 3.1.1. Supongamos la siguiente representación de una red neuronal con sus correspondientes pesos:

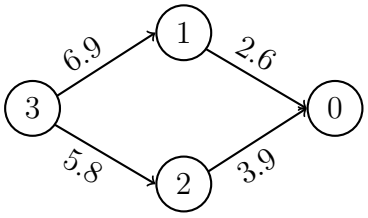


Figura 3.1: Representación de una red neuronal de 4 neuronas y 1 capa.

Tal y como vemos, las neuronas ya han sido ordenadas de manera correcta. Además, en este caso, todos los pesos son positivos, por lo que no nos tenemos que preocupar escoger la parte positiva. Vamos a calcular algunas importancias entre neuronas:

$R_{31} = \frac{6.9}{6.9} = 1 \quad R_{32} = \frac{5.8}{5.8} = 1$
$R_{10} = \frac{2.6}{6.5} = 0.4 \quad R_{20} = \frac{3.9}{6.5} = 0.6$
$\overline{R_{30}} = \text{máx}\{R_{31} \cdot R_{10}, R_{32} \cdot R_{20}\} = R_{32} \cdot R_{20} = 0.6$

◀

El ejemplo anterior pone de manifiesto la intuición detrás de la definición de la importancia entre neuronas: lo que hace es medir la aportación de la neurona emisora, u_i, con respecto al resto de neuronas emisoras de u_j.

La definición de importancia extendida nos habilita la construcción del complejo simplicial filtrado asociado a un DAG con pesos de una manera muy natural. El primer paso será definir el complejo simplicial asociado, pues no vamos a usar un clique, para ello damos la siguiente definición:

Definición 3.1.3. Definimos los *p-símplices asociados a un DAG con pesos* a partir del conjunto de vértices del DAG (que por simplificar notación denotaremos por $\mathcal{V}_0$) como sigue:

$$\mathcal{V}_p^t = \begin{cases} \mathcal{V}_0 & \text{si } p = 0 \\ \{(u_{a_0}, ..., u_{a_p}) \mid u_{a_i} \in \mathcal{V}_0,\ \overline{R_{a_i a_j}} \geq t,\ \forall a_i > a_j\} & \text{si } p \geq 1 \end{cases} \tag{3.1.2}$$

donde $0 \leq t \leq 1$ es un parámetro real.

Ahora que ya tenemos definidos los p-símplices, vamos con la construcción del complejo simplicial asociado. Para ello damos el siguiente resultado:

Proposición 1. *Sea $\mathcal{V}_0 = \{u_0, ..., u_n\}$ un conjunto finito, y $\{w_{ij}\}_{0 \leq j \leq i \leq n}$ un conjunto de números reales. Sea $\overline{R_{ij}}$ la importancia entre neuronas definida en 3.1.1, y $\mathcal{V}_p^t$ los p-símplices definidos en 3.1.2 con t parámetro real entre 0 y 1. Entonces $\mathcal{V}^t = \bigcup_{s=0}^{s=n} \mathcal{V}_s^t$ es un complejo simplicial abstracto.*

Demostración. Supongamos hipótesis generales.
Para probar que $\mathcal{V}^t$ es un complejo simplicial abstracto debemos ver:

1. $u \in \mathcal{V}_0$ implica que $\{u\} \in \mathcal{V}^t$
2. $\sigma \in \mathcal{V}^t$ y $\tau \subset \sigma$ implica que $\tau \in \mathcal{V}^t$

Notemos que la primera propiedad se deduce inmediatamente de 3.1.2 y de la definición de $\mathcal{V}^t$.

Así pues, vamos a probar la segunda propiedad: $\sigma = (u_{a_0}, ..., u_{a_p}) \in \mathcal{V}^t$ implica que $\overline{R_{a_i a_j}} \geq t,\ \forall a_i \geq a_j$. Ahora sea $\tau \subset \sigma$, entonces, $\tau = (u_{b_0}, ..., u_{b_q})$, y como $\{b_0, ..., b_q\} \subset \{a_0, ..., a_p\}$, se tendrá que $\overline{R_{b_i b_j}} \geq t,\ \forall n_i \geq n_j$. El resultado se sigue inmediatamente. □

Ahora que ya tenemos construido nuestro complejo simplicial $\mathcal{V}$ procedemos con la construcción del complejo simplicial filtrado. Para ello, una vez más, damos el siguiente resultado:

Proposición 2. *Sea $(t_i)_{i=1}^n$ una sucesión, monótona decreciente, de números reales entre 1 y 0, e indexada sobre los naturales. Entonces $\mathcal{V}_0 = \emptyset$ y $\mathcal{V}_i = \mathcal{V}^{t_i}$ con $1 \leq i \leq n$, es un complejo simplicial filtrado.*

Demostración. Supongamos hipótesis generales.
Por la proposición anterior, sabemos que $\mathcal{V}^{t_n}$ es un complejo simplicial. Ahora bien, $t_i > t_j$ implica que $\mathcal{V}_p^{t_i} \subset \mathcal{V}_p^{t_j}$ por la definición 3.1.2. Entonces $\emptyset = \mathcal{V}_0 \subset \mathcal{V}_1 \subset \cdots \subset \mathcal{V}_n = \mathcal{V}^{t_n}$. Se sigue inmediatamente el resultado. □

Hasta ahora, hemos conseguido construir el complejo simplicial filtrado asociado a un DAG con pesos, con lo que podemos pensar que ya estamos listos para aplicar la homología persistente y extraer conclusiones. No obstante, la realidad es bien distinta y existe un problema con el que nos topamos en el desarrollo del presente trabajo. Este problema está relacionado con una pobre explicación en [19].

Si leemos detenidamente las definiciones de la presente sección, observamos que la definición 3.1.1 tiene un pequeño defecto: no se especifica el significado exacto de C_{ij}. Este pequeño defecto, que en un principio puede pasar desapercibido, supone que haya al menos dos maneras distintas de calcular los p-símplices dado un DAG con pesos.

Esta disyuntiva da lugar a las dos interpretaciones posibles sobre el cálculo de los p-símplices, las hemos bautizado como: la interpretación *local* y la interpretación *global*. Tal y como hemos podido comprobar, por medio de correo electrónico, la interpretación original que hace el autor se corresponde con la que nosotros hemos bautizado como local.

Veamos un pequeño ejemplo que ilustre la diferencia entre ambas interpretaciones.

Ejemplo 3.1.2. Supongamos la siguiente representación de una red neuronal con las importancias entre neuronas ya calculadas:

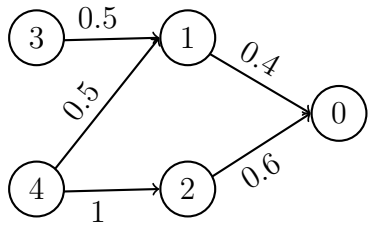


Figura 3.2: Representación de una red neuronal de 5 neuronas y 1 capa.

Vamos calcular $\mathcal{V}_2^{0.4}$ para ver las diferencias entre las dos interpretaciones. En primer lugar, listamos los posibles 2-símplices:

$$\{4,2,0\}, \{4,1,0\}, \{3,1,0\}$$

- Interpretación local
  Como la importancia entre 4-2, 2-0 y 4-0 es mayor que 0.4, entonces $\{4,2,0\} \in \mathcal{V}_2^{0.4}$, donde importancia entre 4-0 viene dada por:

  $$\overline{R_{40}} = \text{máx}\{R_{42} \cdot R_{20}\} = R_{42} \cdot R_{20} = 0.6$$

  Siguiendo la misma regla tenemos que $\{4,1,0\}, \{3,1,0\} \notin \mathcal{V}_2^{0.4}$. Por lo tanto, $\mathcal{V}_2^{0.4} = \{\{4,2,0\}\}$.

- Interpretación global
  Razonando igual que antes, $\{4,2,0\} \in \mathcal{V}_2^{0.4}$. Ahora bien, como la importancia entre 4-1 y 1-0 es mayor o igual que 0.4, y

  $$\overline{R_{40}} = \text{máx}\{R_{42} \cdot R_{20}, R_{41} \cdot R_{10}\} = R_{42} \cdot R_{20} = 0.6$$

Entonces $\{4,1,0\} \in \mathcal{V}_2^{0.4}$. Sin embargo, $\{3,2,0\} \notin \mathcal{V}_2^{0.4}$ y así, $\mathcal{V}_2^{0.4} = \{\{4,2,0\}, \{4,1,0\}\}$

◀

El ejemplo anterior pone de manifiesto la principal diferencia entre ambas interpretaciones: en la primera, el máximo se calcula sobre los caminos que aparecen en el p-símplice; en la segunda, el máximo se calcula sobre los caminos que aparecen en todos los p-símplices.

Nota. Mientras que la interpretación global es consistente para los 1-símplices (aristas), la interpretación local no lo es. Es decir, si seguimos el razonamiento local, no podremos calcular una arista entre dos vértices no conectados, pues no existirá camino local sobre el que tomar el máximo. Este hecho imposibilitaría el cálculo del complejo simplicial asociado a la red. Por lo tanto, para el cálculo de los 1-símplices en la interpretación local se toma el máximo entre todos los posibles caminos, es decir, se sigue el razonamiento global.

A lo largo de las siguientes secciones veremos más en detalle la diferencia entre ambas interpretaciones y cómo afecta esta diferencia al cálculo de la homología persistente.

3.2 Interpretación global. Ejemplo

A lo largo de esta sección desarrollaremos el cálculo de la homología persistente en el ejemplo propuesto en [19] mediante la interpretación que hemos bautizado como global. Comenzamos con esta interpretación pues es la que hicimos en un primer momento y es la que consideramos natural.

En primer lugar, vamos a detenernos momentáneamente a analizar la interpretación global. Si bien esta interpretación no es la original, como ya mencionamos, esta interpretación es consistente para el cálculo de los 1-símplices. Adicionalmente, esta interpretación es coherente con la definición de clique y con la definición 3.1.1, donde C_{ij} se considera globalmente: se toma el DAG inicial y se le calcula el cierre transitivo. Sobre este nuevo DAG se realizan el resto de cálculos.

No obstante, aunque esta interpretación nos pueda parecer más coherente desde el punto de vista teórico, habrá que realizar una serie de experimentos y comparativas para validar la información obtenida siguiendo esta interpretación.

Aunque no lo hemos mencionado, un DAG con pesos no es más que un DAG al que le asociamos una matriz de pesos (recordemos que, en el caso que nos ocupa, estos pesos vienen dados por la importancia extendida entre neuronas). Sobre esta matriz de pesos y sobre una lista de adyacencia se siguen una serie de pasos para el cálculo del complejo simplicial filtrado. Veremos más en detalle estos pasos en la siguiente sección.

Habiendo descrito de manera genera la interpretación global, vamos a aplicarla al ejemplo propuesto en [19], en el que vamos a calcular los números de Betti y vamos a ver los diagramas correspondientes.

Ejemplo 3.2.1. Supongamos la siguiente representación de una red neuronal con las importancias entre neuronas ya calculadas:

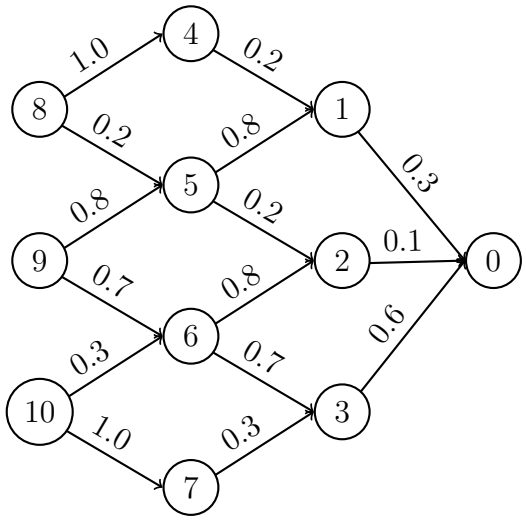


Figura 3.3: Representación de una red neuronal de 11 neuronas y 2 capas.

Dada la anterior representación, tenemos la matriz de pesos asociada:

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0.3 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0.1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0.6 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.2 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.8 & 0.2 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.8 & 0.7 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.3 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0.2 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.8 & 0.7 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.3 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

donde cada entrada de la matriz, a_{ij}, es la importancia de la neurona i para la neurona j $(i \geq j)$.

Ahora vamos con el cálculo del complejo simplicial filtrado asociado. Para ello vamos a ilustrar unos cuantos pasos en la filtración con los correspondientes números de Betti asociados. Tras esto, mostraremos los complejos simpliciales asociados a cada filtración.

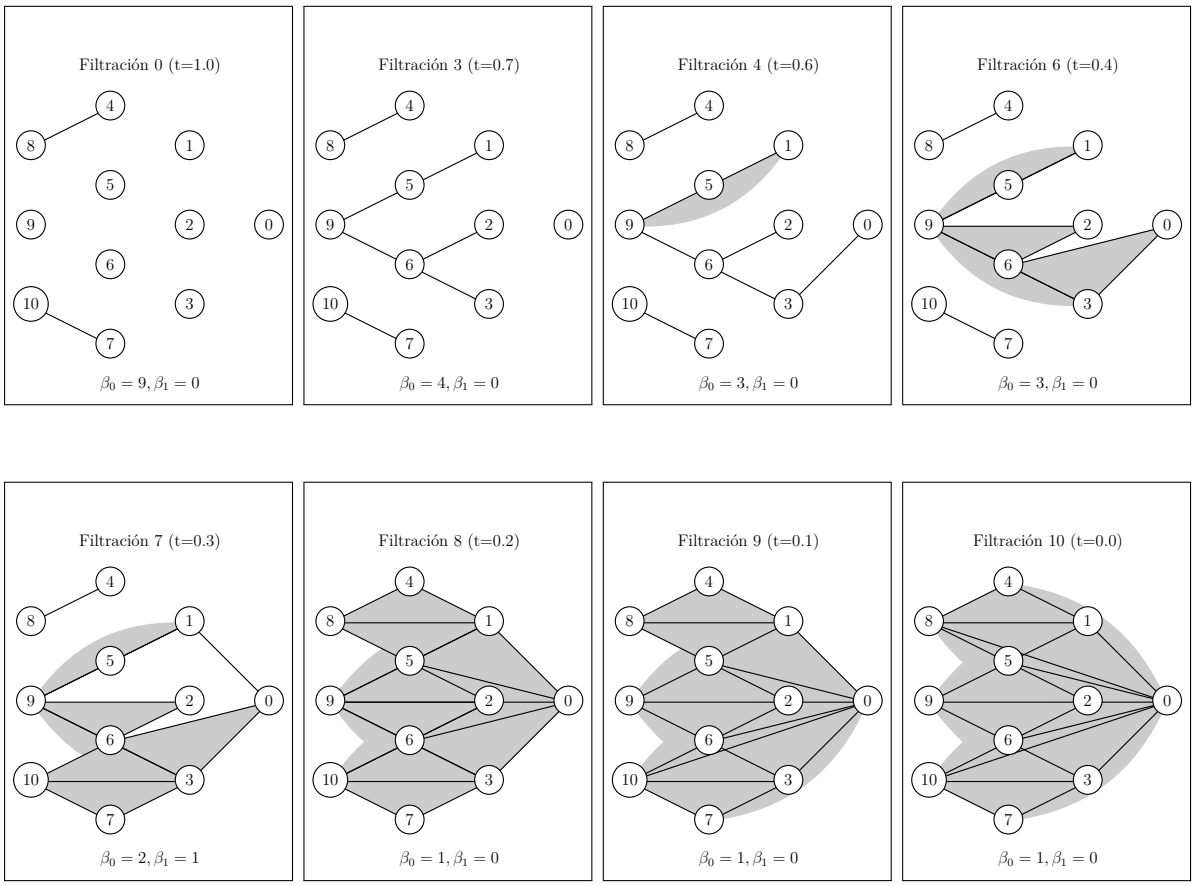


Figura 3.4: Pasos en la filtración del complejo simplicial asociado a la red y números de Betti correspondientes

Para una mayor claridad, se ha omitido el dibujo de algunos símplices. No obstante, damos una lista completa de los complejos simpliciales de cada filtración:

- Filtración 0 (t=1.0):
  - $\boldsymbol{\nu}_0^{1.0} = \{\{10\}, \{9\}, \{8\}, \{7\}, \{6\}, \{5\}, \{4\}, \{3\}, \{2\}, \{1\}, \{0\}\}$
  - $\boldsymbol{\nu}_1^{1.0} = \{\{10, 7\}, \{8, 4\}\}$

  A partir de ahora omitiremos $\boldsymbol{\nu}_0$ pues se mantiene igual para todos los pasos en la filtración.

- Filtración 3 (t=0.7):
  - $\boldsymbol{\nu}_1^{0.7} = \{\{10, 7\}, \{9, 6\}, \{9, 5\}, \{8, 4\}, \{6, 3\}, \{6, 2\}, \{5, 1\}\}$

- Filtración 4 (t=0.6):
  - $\boldsymbol{\nu}_1^{0.6} = \{\{10, 7\}, \{9, 6\}, \{9, 5\}, \{9, 1\}, \{8, 4\}, \{6, 3\}, \{6, 2\}, \{5, 1\}, \{3, 0\}\}$
  - $\boldsymbol{\nu}_2^{0.6} = \{\{9, 5, 1\}\}$

- Filtración 6 (t=0.4):
  - $\mathcal{V}_1^{0.4} = \{\{10,7\},\{9,6\},\{9,5\},\{9,3\},\{9,2\},\{9,1\},\{8,4\},\{6,3\},\{6,2\},\{6,0\},\{5,1\},\{3,0\}\}$
  - $\mathcal{V}_2^{0.4} = \{\{9,6,3\},\{9,6,2\},\{9,5,1\},\{6,3,0\}\}$
- Filtración 7 (t=0.3):
  - $\mathcal{V}_1^{0.3} = \{\{10,7\},\{10,6\},\{10,3\},\{9,6\},\{9,5\},\{9,3\},\{9,2\},\{9,1\},\{8,4\},\{7,3\},\{6,3\},\{6,2\},\{6,0\},\{5,1\},\{3,0\},\{1,0\}\}$
  - $\mathcal{V}_2^{0.3} = \{\{10,7,3\},\{10,6,3\},\{9,6,3\},\{9,6,2\},\{9,5,1\},\{6,3,0\}\}$
- Filtración 8 (t=0.2):
  - $\mathcal{V}_1^{0.2} = \{\{10,7\},\{10,6\},\{10,3\},\{10,2\},\{9,6\},\{9,5\},\{9,3\},\{9,2\},\{9,1\},\{9,0\},\{8,5\},\{8,4\},\{8,1\},\{7,3\},\{6,3\},\{6,2\},\{6,0\},\{5,2\},\{5,1\},\{5,0\},\{4,1\},\{3,0\},\{1,0\}\}$
  - $\mathcal{V}_2^{0.2} = \{\{10,7,3\},\{10,6,3\},\{10,6,2\},\{9,6,3\},\{9,6,2\},\{9,6,0\},\{9,5,2\},\{9,5,1\},\{9,5,0\},\{9,3,0\},\{9,1,0\},\{8,5,1\},\{8,4,1\},\{6,3,0\},\{5,1,0\}\}$
  - $\mathcal{V}_3^{0.2} = \{\{9,6,3,0\},\{9,5,1,0\}\}$
- Filtración 9 (t=0.1):
  - $\mathcal{V}_1^{0.1} = \{\{10,7\},\{10,6\},\{10,3\},\{10,2\},\{10,0\},\{9,6\},\{9,5\},\{9,3\},\{9,2\},\{9,1\},\{9,0\},\{8,5\},\{8,4\},\{8,1\},\{7,3\},\{7,0\},\{6,3\},\{6,2\},\{6,0\},\{5,2\},\{5,1\},\{5,0\},\{4,1\},\{3,0\},\{2,0\},\{1,0\}\}$
  - $\mathcal{V}_2^{0.1} = \{\{10,7,3\},\{10,7,0\},\{10,6,3\},\{10,6,2\},\{10,6,0\},\{10,3,0\},\{10,2,0\},\{9,6,3\},\{9,6,2\},\{9,6,0\},\{9,5,2\},\{9,5,1\},\{9,5,0\},\{9,3,0\},\{9,2,0\},\{9,1,0\},\{8,5,1\},\{8,4,1\},\{7,3,0\},\{6,3,0\},\{6,2,0\},\{5,2,0\},\{5,1,0\}\}$
  - $\mathcal{V}_3^{0.1} = \{\{10,7,3,0\},\{10,6,3,0\},\{10,6,2,0\},\{9,6,3,0\},\{9,6,2,0\},\{9,5,2,0\},\{9,5,1,0\}\}$
- Filtración 10 (t=0.0):
  - $\mathcal{V}_1^{0.0} = \{\{10,7\},\{10,6\},\{10,3\},\{10,2\},\{10,0\},\{9,6\},\{9,5\},\{9,3\},\{9,2\},\{9,1\},\{9,0\},\{8,5\},\{8,4\},\{8,2\},\{8,1\},\{8,0\},\{7,3\},\{7,0\},\{6,3\},\{6,2\},\{6,0\},\{5,2\},\{5,1\},\{5,0\},\{4,1\},\{4,0\},\{3,0\},\{2,0\},\{1,0\}\}$
  - $\mathcal{V}_2^{0.0} = \{\{10,7,3\},\{10,7,0\},\{10,6,3\},\{10,6,2\},\{10,6,0\},\{10,3,0\},\{10,2,0\},\{9,6,3\},\{9,6,2\},\{9,6,0\},\{9,5,2\},\{9,5,1\},\{9,5,0\},\{9,3,0\},\{9,2,0\},\{9,1,0\},\{8,5,2\},\{8,5,1\},\{8,5,0\},\{8,4,1\},\{8,4,0\},\{8,2,0\},\{8,1,0\},\{7,3,0\},\{6,3,0\},\{6,2,0\},\{5,2,0\},\{5,1,0\},\{4,1,0\}\}$
  - $\mathcal{V}_3^{0.0} = \{\{10,7,3,0\},\{10,6,3,0\},\{10,6,2,0\},\{9,6,3,0\},\{9,6,2,0\},\{9,5,2,0\},\{9,5,1,0\},\{8,5,2,0\},\{8,5,1,0\},\{8,4,1,0\}\}$

Para el cálculo de las anteriores listas se han empleado una serie de algoritmos y programas que detallaremos en la próxima sección.

Finalmente, veamos los diagramas de barras y persistencia asociados al complejo simplicial filtrado representado en 3.4:

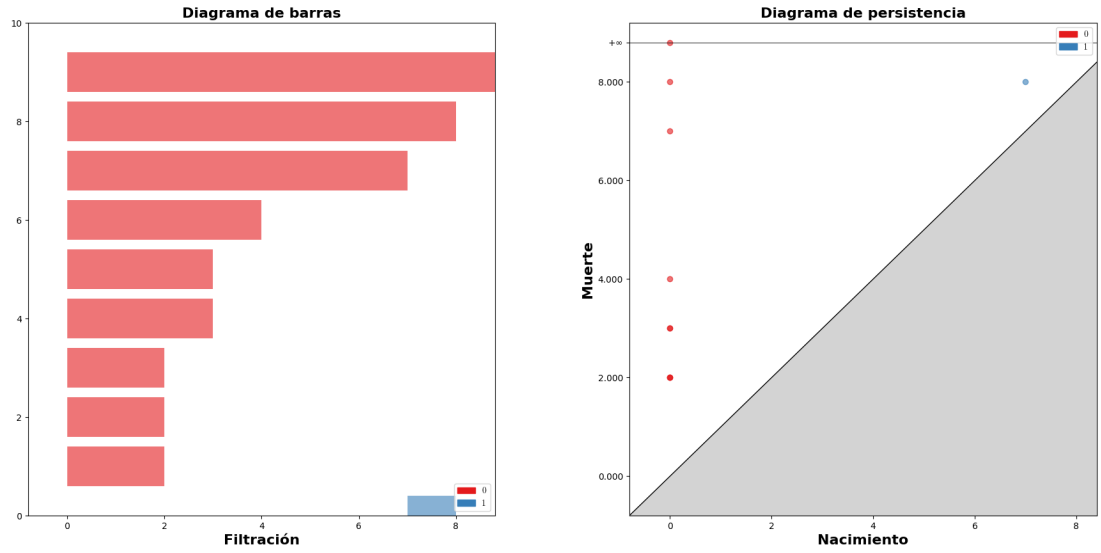


Figura 3.5: Diagramas de barras y persistencia asociados a la red 3.3

Observamos que estos diagramas son ligeramente distintos que los presentados en el capítulo de preeliminares. Esto es debido a que para el cálculo de éstos se ha empleado una librería que los produce automáticamente. Veremos esto en más detalle en la siguiente sección.

Si observamos el diagrama izquierdo (diagrama de barras), vemos que en la filtración 0 nacen 9 clases de equivalencia (componentes conexas) y que a lo largo de las siguientes filtraciones van muriendo hasta que sólo queda una que persiste. Podemos seguir esta evolución si nos vamos fijando en el número β_0 en la figura 3.4. También podemos observar que en la filtración 7 nace una clase de equivalencia (agujero 2-dimensional) y muere en la filtración 8. Esta clase la podemos seguir viendo la figura 3.4 y fijándonos en el número β_1.

Observando ahora el digrama derecho (diagrama de persistencia) vemos la misma información pero con otra representación. En este caso se aprecian 6 puntos rojos que nacen en la filtración 0 y van mueriendo a lo largo de las siguientes filtraciones, excepto uno que persiste. Estos puntos se corresponden con las componentes conexas de la filtración. A diferencia de los diagramas presentados en el capítulo de preeliminares, en este caso, cuando varias clases nacen y mueren en la misma filtración se superponen sus puntos correspondientes en el diagrama dando lugar a puntos más nítidos en el diagrama. También

observamos un único punto azul que se corresponde con la clase de equivalencia que da lugar a un agujero 2-dimensional, esta clase nace en la filtración 7 y muere en la filtración 8.

◀

En el ejemplo anterior, podemos apreciar que, aunque esta interpretación sea más coherente con la teoría desarrollada, la información que nos aporta sobre la red es un tanto escasa, pues los agujeros p-dimensionales colapsan muy rápido. Esto se ve claramente reflejado en el diagrama de barras 3.3. Por ello, será conveniente hacer una serie de experimentos con el fin de probar el desempeño de esta herramienta.

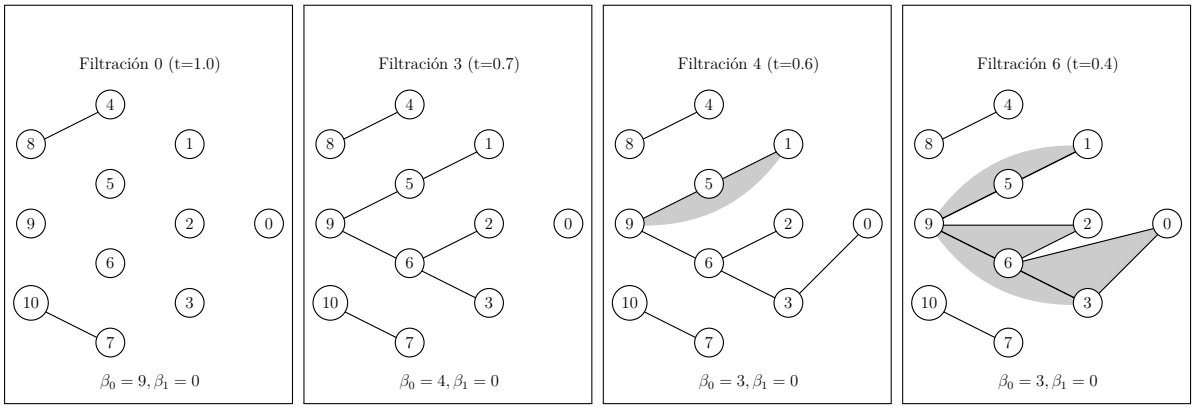
3.3 Interpretación local. Algoritmos y programas

En esta sección veremos cómo funciona la interpretación que propone el autor (que se corresponde con la que hemos bautizado como local) mediante su desempeño en el mismo ejemplo que hemos visto en la sección anterior. Además, aprovecharemos para describir más detalladamente los algoritmos y programas que hemos empleado para el cálculo automático de la homología persistente en este ejemplo.

Comenzamos con el ejemplo tal y cómo lo propone el autor en [19]:

Ejemplo 3.3.1. Supondremos la red 3.3. Como en el ejemplo anterior ya hemos visto una representación de la misma y su matriz asociada, esta vez los omitimos.

Vamos directamente con el cálculo del complejo simplicial filtrado asociado. Al igual que antes, vamos a ilustrar unos cuantos pasos en la filtración con los correspondientes números de Betti asociados. Tras esto, mostraremos los complejos simpliciales asociados a cada filtración.



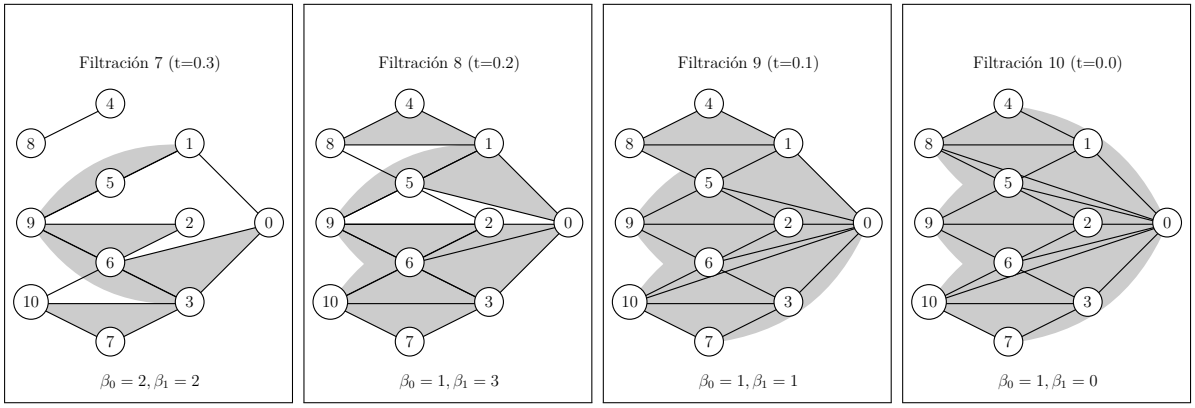


Figura 3.6: Pasos en la filtración del complejo simplicial asociado a la red y números de Betti correspondientes

Para una mayor claridad, se ha omitido el dibujo de algunos símplices. Al igual que antes, damos una lista completa de los complejos simpliciales de cada filtración:

- Filtración 0 (t=1.0):
  - $\nu_0^{1.0} = \{\{10\}, \{9\}, \{8\}, \{7\}, \{6\}, \{5\}, \{4\}, \{3\}, \{2\}, \{1\}, \{0\}\}$
  - $\nu_1^{1.0} = \{\{10, 7\}, \{8, 4\}\}$

  A partir de ahora omitiremos ν_0 pues se mantiene igual para todos los pasos en la filtración.

- Filtración 3 (t=0.7):
  - $\nu_1^{0.7} = \{\{10, 7\}, \{9, 6\}, \{9, 5\}, \{8, 4\}, \{6, 3\}, \{6, 2\}, \{5, 1\}\}$

- Filtración 4 (t=0.6):
  - $\nu_1^{0.6} = \{\{10, 7\}, \{9, 6\}, \{9, 5\}, \{9, 1\}, \{8, 4\}, \{6, 3\}, \{6, 2\}, \{5, 1\}, \{3, 0\}\}$
  - $\nu_2^{0.6} = \{\{9, 5, 1\}\}$

- Filtración 6 (t=0.4):
  - $\nu_1^{0.4} = \{\{10, 7\}, \{9, 6\}, \{9, 5\}, \{9, 3\}, \{9, 2\}, \{9, 1\}, \{8, 4\}, \{6, 3\}, \{6, 2\}, \{6, 0\}, \{5, 1\}, \{3, 0\}\}$
  - $\nu_2^{0.4} = \{\{9, 6, 3\}, \{9, 6, 2\}, \{9, 5, 1\}, \{6, 3, 0\}\}$

- Filtración 7 (t=0.3):
  - $\nu_1^{0.3} = \{\{10, 7\}, \{10, 6\}, \{10, 3\}, \{9, 6\}, \{9, 5\}, \{9, 3\}, \{9, 2\}, \{9, 1\}, \{8, 4\}, \{7, 3\}, \{6, 3\}, \{6, 2\}, \{6, 0\}, \{5, 1\}, \{3, 0\}, \{1, 0\}\}$
  - $\nu_2^{0.3} = \{\{10, 7, 3\}, \{9, 6, 3\}, \{9, 6, 2\}, \{9, 5, 1\}, \{6, 3, 0\}\}$

- Filtración 8 (t=0.2):

  - $\nu_1^{0.2} = \{\{10,7\},\{10,6\},\{10,3\},\{10,2\},\{9,6\},\{9,5\},\{9,3\},\{9,2\},\{9,1\},\{9,0\},\{8,5\},\{8,4\},\{8,1\},\{7,3\},\{6,3\},\{6,2\},\{6,0\},\{5,2\},\{5,1\},\{5,0\},\{4,1\},\{3,0\},\{1,0\}\}$

  - $\nu_2^{0.2} = \{\{10,7,3\},\{10,6,3\},\{10,6,2\},\{9,6,3\},\{9,6,2\},\{9,6,0\},\{9,5,1\},\{9,3,0\},\{8,4,1\},\{6,3,0\},\{5,1,0\}\}$

  - $\nu_3^{0.2} = \{\{9,6,3,0\}\}$

- Filtración 9 (t=0.1):

  - $\nu_1^{0.1} = \{\{10,7\},\{10,6\},\{10,3\},\{10,2\},\{10,0\},\{9,6\},\{9,5\},\{9,3\},\{9,2\},\{9,1\},\{9,0\},\{8,5\},\{8,4\},\{8,1\},\{7,3\},\{7,0\},\{6,3\},\{6,2\},\{6,0\},\{5,2\},\{5,1\},\{5,0\},\{4,1\},\{3,0\},\{2,0\},\{1,0\}\}$

  - $\nu_2^{0.1} = \{\{10,7,3\},\{10,7,0\},\{10,6,3\},\{10,6,2\},\{10,6,0\},\{10,3,0\},\{9,6,3\},\{9,6,2\},\{9,6,0\},\{9,5,2\},\{9,5,1\},\{9,5,0\},\{9,3,0\},\{9,1,0\},\{8,5,1\},\{8,4,1\},\{7,3,0\},\{6,3,0\},\{5,1,0\}\}$

  - $\nu_3^{0.1} = \{\{10,7,3,0\},\{10,6,3,0\},\{9,6,3,0\},\{9,5,1,0\}\}$

- Filtración 10 (t=0.0):

  - $\nu_1^{0.0} = \{\{10,7\},\{10,6\},\{10,3\},\{10,2\},\{10,0\},\{9,6\},\{9,5\},\{9,3\},\{9,2\},\{9,1\},\{9,0\},\{8,5\},\{8,4\},\{8,2\},\{8,1\},\{8,0\},\{7,3\},\{7,0\},\{6,3\},\{6,2\},\{6,0\},\{5,2\},\{5,1\},\{5,0\},\{4,1\},\{4,0\},\{3,0\},\{2,0\},\{1,0\}\}$

  - $\nu_2^{0.0} = \{\{10,7,3\},\{10,7,0\},\{10,6,3\},\{10,6,2\},\{10,6,0\},\{10,3,0\},\{10,2,0\},\{9,6,3\},\{9,6,2\},\{9,6,0\},\{9,5,2\},\{9,5,1\},\{9,5,0\},\{9,3,0\},\{9,2,0\},\{9,1,0\},\{8,5,2\},\{8,5,1\},\{8,5,0\},\{8,4,1\},\{8,4,0\},\{8,2,0\},\{8,1,0\},\{7,3,0\},\{6,3,0\},\{6,2,0\},\{5,2,0\},\{5,1,0\},\{4,1,0\}\}$

  - $\nu_3^{0.0} = \{\{10,7,3,0\},\{10,6,3,0\},\{10,6,2,0\},\{9,6,3,0\},\{9,6,2,0\},\{9,5,2,0\},\{9,5,1,0\},\{8,5,2,0\},\{8,5,1,0\},\{8,4,1,0\}\}$

Finalmente, veamos los diagramas de barras y persistencia asociados al complejo simplicial filtrado representado en 3.6:

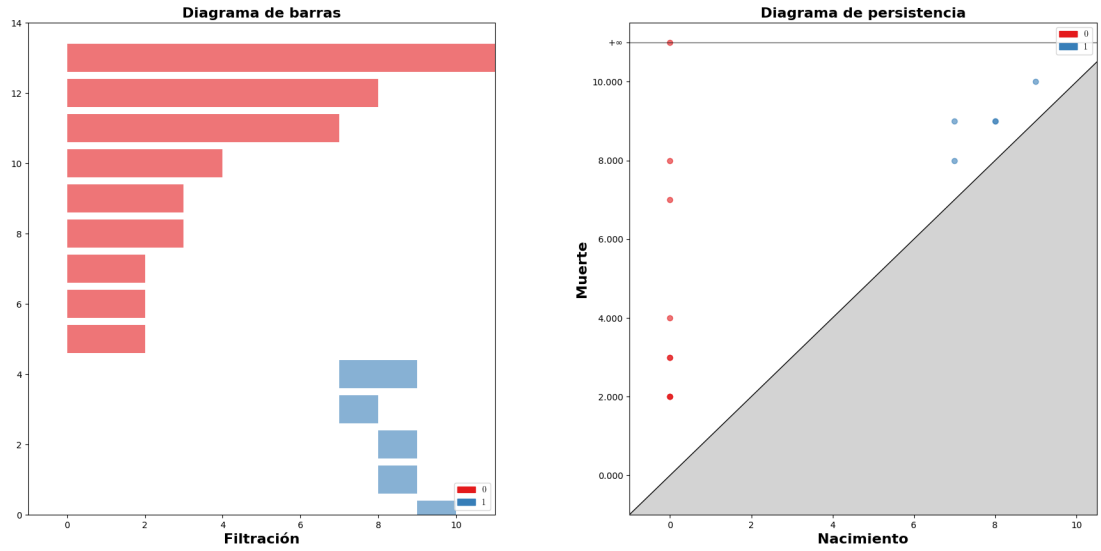


Figura 3.7: Diagramas de barras y persistencia asociados a la red 3.3

Nótese que en esta interpretación, a diferencia de la anterior, tenemos agujeros p-dimensionales ocultos, como el que aparece en 3.6 en la filtración 9.

Observamos que, en este caso, los diagramas obtenidos son muy diferentes a los de la sección anterior. Si bien obtenemos las mismas clases de equivalencia de la homología de grado 0 (componentes conexas), vemos que hemos obtenido un resultado muy distinto para las clases de equivalencia de la homología de grado 1 (agujeros 2-dimensionales). En este caso hemos obtenido 5 clases de equivalencia mientras que en el caso anterior sólo teníamos 1. El hecho de que tengamos las mismas clases de equivalencia de la homología de grado 0 se debe a que, como ya hemos comentado, el cálculo de las aristas en esta interpretación se realiza siguiendo el razonamiento global, lo que resulta un tanto incoherente con el cálculo del resto de los p-símplices.

Cabe reseñar que este ejemplo reproduce fielmente el propuesto por el autor en [19], aunque habiendo solucionado alguna errata presente en los dibujos del autor.

◀

Del ejemplo anterior el autor extrae unas conclusiones muy importantes. Por una parte, observa que si las neuronas de entrada se conectan directamente a las de salida, el conocimiento de la red será «pobre» ya que será equivalente a la detección de patrones. Por otra parte, el incremento del número de Betti β_1 indica que la red determina la neurona de llegada por combinación de las neuronas de salida. De este modo, supone que el aumento de β_1 refleja la complejidad del conocimiento adquirido por la red. Por lo tanto, mediante la homología persistente es posible medir la complejidad del conocimiento adquirido por la red.

Este supuesto puede tener especial sentido en el caso de las redes neuronales convolucionales (CNN). Aunque una descripción detallada de las mismas queda fuera del alcance del presente trabajo, en estas redes la información se presenta de manera jerarquizada, es decir, las neuronas de las capas iniciales detectan patrones simples como líneas horizontales y verticales, y a medida que se avanza en las capas, estos patrones se combinan para representar objetos más complejos, por ejemplo una rueda de un coche. Estas redes son muy utilizadas en el ámbito de la visión por computador.

Habiendo presentado detalladamente el ejemplo que propone el autor, vamos a describir todos los algoritmos y programas que hemos empleado para el cálculo automático de los complejos simpliciales asociados, los números de Betti y los diagramas correspondientes.

Para el desarrollo de los algoritmos y programas se ha empleado el lenguaje *Python* ([18]) y el programa *Neovim* como entorno de desarrollo. Hemos elegido Python como lenguaje de programación ya que es un lenguaje de alto nivel (lo que lo hace bastante sencillo) y el código producido es de fácil lectura. Este lenguaje es de código abierto y es muy empleado en el campo de la inteligencia artificial. No obstante, este lenguaje tiene el inconveniente de ser poco eficiente ya que se trata de un lenguaje interpretado. Para solucionarlo, hemos empleado librerías que ofrecen una interfaz en Python pero que están programadas en lenguajes más eficientes como C++. Estas librerías son *GUDHI* ([17]) para el cálculo de los diagramas, y *Dionysus* ([14]) para el cálculo de los números de Betti.

En cuanto a los algoritmos empleados para el cálculo de los complejos simpliciales, nos hemos basado en los algoritmos propuestos en [16] y los hemos adaptado a nuestras necesidades particulares. Veamos tales algoritmos en detalle

En primer lugar, se define un objeto grafo dirigido acíclico (GDA). Este objeto representa un grafo dirigido acíclico mediante una lista de adyacencia. Tras esto, se define un objeto grafo dirigido acíclico con pesos (GDAP). Este objeto consta de un objeto grafo dirigido acíclico y de una matriz de pesos asociada, esta matriz es la original dada por la red neuronal y define completamente las aristas del objeto grafo asociado. La definición es la siguiente:

```
#Un GDAP es un GDA con una matriz asociada. La matriz determina las
#aristas y los vértices del GDA asociado.

def __init__(self, M):
        self.G = GDA.Grafo_dirigido_aciclico(len(M))
        self.M = M
        for i in range(0,len(self.M)):
            for j in range(i):
                if( self.M[i][j] > 0 ):
                    self.G.crea_arista(i,j)
```

Ahora debemos distinguir entre los algoritmos empleados para el cálculo local y global. Empezaremos con éste último.

Para el cálculo global hemos empleado la siguiente función:

```
#Devuelve una lista de los símplices maximales de cada vértice si al
#menos uno de ellos pasa el filtro t. Recorre la lista de vértices
#adyacentes a uno dado y en caso de que no haya adyacencia directa,
#calcula los caminos indirectos y los añade. Si la adyacencia directa
#pasa el filtro, la añade.
def __calcula_simplices_global(self,t)->List[List[int]]:
        simp=[]
        #Necesario para recorrer los adyacentes. OPTIMIZACIÓN
        P=self.filtracion(t)
        T=P.clausura_transitiva()
        for i in range(len(self.M)):
            for j in T.G.adj[i]:
                if(self.M[i][j]==0):
                    p=[]
                    self.busca_pesos(i,j,p)
                    if(len(p)>0):
                        m=max([v[0] for v in p])
                        if(m>=t):
                            l = [k[1] for k in p]
                            simp.extend(l)
                            simp.append([i,j])
                elif (self.M[i][j]>=t):
                    simp.append([i,j])
        return simp
```

donde la función «filtración» es común a ambas interpretaciones y su funcionamiento es el siguiente: recorre la matriz asociada al grafo, si la entrada a_{ij} supera el filtro t pasa a la siguiente, en caso contrario la sustituye por 0; tras esto devuelve el GDAP asociado a la nueva matriz. La función «clausura transitiva» calcula la clausura transitiva de un GDA y la devuelve. La función «busca pesos», común a ambas interpretaciones, es especialmente importante ya que hace una búsqueda en profundidad sobre la matriz para calcular el peso apropiado. Damos su definición a continuación:

```
#Almacena en p una lista de tuplas donde el primer argumento es el
#posible peso entre origen(o) y destino(d); y el segundo argumento es el
#camino que produce dicho peso.
def busca_pesos(self, o, d, p=[], q=1, c=[]):
        #BÚSQUEDA EN PROFUNDIDAD
        if(o==d):
            c.append(o)
            p.append((q.__round__(4),c))
            q=1
```

```
            c=[]
        else:
            for j in range(d,o):
                if(self.M[o][j]!=0):
                    #NOTA: Podríamos optimizarlo para que si q<t pase al
                    siguente vértice. SÓLO VÁLIDO PARA V.LOCAL
                    self.busca_pesos(j,d,p,q*self.M[o][j],c+[o])
```

Notemos que este algoritmo es el clave dentro de toda esta implementación, y además, es recursivo, lo que lo hace bastante ineficiente. Esta observación nos lleva a cuestionar la aplicabilidad de estos algoritmos a casos reales en los que el número de neuronas de la red es muy grande. No obstante, para el presente trabajo nos ha resultado suficiente con esta implementación.

Finalizamos la implementación de la interpretación global con una última función que nos devuelve la lista de los símplices del complejo simplicial:

```
#Devuelve un lista con el complejo simplicial asociado al GDAP.
V.GLOBAL
def get_simplex_global(self, t : float)->List[List[int]]:
        simplices=self.__calcula_simplices_global(t)

        #En este caso hay que añadir los vértices
        simplices.extend([[i] for i in range(len(self.M))])

        #Ahora añadimos los subsímplices de los calculados
        for s in simplices:
            for L in range(3,len(s)+1):
                for sub in it.combinations(s,L):
                    if(list(sub) not in simplices):
                       simplices.append(list(sub))

        Limpiamos aquellos símplices con aristas irreales
        tr=[s for s in simplices if len(s)>2]
        for e in tr:
            if(any([list(sub) not in simplices for sub in
                it.combinations(e,len(e)-1)])):
                simplices.remove(e)

        return simplices
```

Veamos ahora la implementación de los algoritmos asociados a la interpretación local. Como ya hemos descrito los algoritmos comunes a ambas interpretaciones, en este caso sólo son necesarias dos funciones:

```
#Devuelve una lista de los símplices maximales de cada vértice que
```

```
#pasan el filtro t. Lo que hace es recorrer la lista de vértices
#adyacentes y en caso de que no haya adyacencia directa, calcula los
#caminos indirectos.
def __calcula_simplices(self,t)->List[List[int]]:
        simp=[]
        #Necesario para recorrer los adyacentes. OPTIMIZACIÓN '''
        P=self.filtracion(t)
        T=P.clausura_transitiva()
        for i in range(len(self.M)):
            for j in T.G.adj[i]:
                if(self.M[i][j]==0):
                    p=[]
                    self.busca_pesos(i,j,p)
                    if(len(p)>0):
                        l = [k[1] for k in p if k[0]>=t]
                        simp.extend(l)
                elif (self.M[i][j]>=t):
                    simp.append([i,j])
        return simp
```

Y ahora veamos la función que devuelve la lista de símplices propiamente dicha:

```
#Devuelve un lista con el complejo simplicial asociado al GDAP.
#V.LOCAL
def get_simplex_local(self, t : float)->List[List[int]]:
        simplices=self.__calcula_simplices(t)

        simplices.extend([[i] for i in range(len(self.M))])

        #Hemos calculado símplices "maximales", nos faltan sus
        #subsímplices
        for s in simplices:
            for L in range(2,len(s)+1):
                for sub in it.combinations(s,L):
                    if(list(sub) not in simplices):
                       simplices.append(list(sub))
        return simplices
```

Como ya hemos comentado, los algoritmos aquí expuestos son bastante ineficientes al ser recursivos. Aunque hemos tratado de optimizarlos en la medida de lo posible, no hemos conseguido una mejora significativa en el tiempo de ejecución. Aunque para los ejemplos del presente trabajo nos ha bastado con esta implementación, se queda como trabajo futuro la optimización de la presente implementación.

3.4 Ejemplos

(En construcción)

Capítulo 4
Conclusiones

(En construcción)

Bibliografía

[1] Bello Hernández, Manuel: *Apuntes de Cálculo diferencial en varias variables*, 2019.

[2] Cavanna, Nicholas J. and Donald R. Sheehy: *The generalized persistent nerve theorem*, 2018. URL https://arxiv.org/abs/1807.07920.

[3] Edelsbrunner, Herbert and John Harer: *Computational Topology - an Introduction.* American Mathematical Society, 2010, ISBN 978-0-8218-4925-5.

[4] Elduque Palomo, Alberto Carlos: *Introduction to algebra*, 2017.

[5] Ghrist, Robert: *Elementary Applied Topology.* CreateSpace Independent Publishing Platform, 2014, ISBN 978-1502880857.

[6] Goodfellow, Ian, Yoshua Bengio, and Aaron Courville: *Deep Learning.* MIT Press, 2016. URL http://www.deeplearningbook.org.

[7] Gutiérrez Jiménez, José Manuel y Víctor Lanchares Barrasa: *Elementos de matemática discreta.* Universidad de La Rioja. Servicio de Publicaciones, 2010, ISBN 978-84-693-6451-2.

[8] Heras Vicente, Jónathan: *Notas del curso de inteligencia artificial*, 2022.

[9] Hornik, Kurt, Maxwell Stinchcombe, and Halbert White: *Multilayer feedforward networks are universal approximators.* Neural Networks, 2(5):359–366, 1989, ISSN 0893-6080. URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0893608089900208.

[10] Jonsson, Jakob: *Simplicial Complexes of Graphs.* Springer Berlin, Heidelberg, January 2008, ISBN 978-3-540-75858-7.

[11] Kalyanakrishnan, Shivaram: *The perceptron learning algorithm and its convergence*, 2017. URL https://www.cse.iitb.ac.in/~shivaram/teaching/old/cs344+386-s2017/resources/classnote-1.pdf.

[12] Karp, Richard M.: *Reducibility among Combinatorial Problems*, pages 85–103. Springer US, Boston, MA, 1972, ISBN 978-1-4684-2001-2. https://doi.org/10.1007/978-1-4684-2001-2_9.

[13] Macho Stadler, Marta: *De la homología a la cohomología: teoremas de dualidad*, 2006.

[14] Morozov, Dmitriy, May 2021. URL https://mrzv.org/software/dionysus2/.

[15] Otter, Nina, Mason A Porter, Ulrike Tillmann, Peter Grindrod, and Heather A Harrington: *A roadmap for the computation of persistent homology.* EPJ Data Science, 6(1), aug 2017. URL https://doi.org/10.1140%2Fepjds%2Fs13688-017-0109-5.

[16] Sedgewick, Robert and Kevin Wayne: *Algorithms, 4th Edition.* Addison-Wesley, 2011, ISBN 978-0-321-57351-3.

[17] The GUDHI Project: *GUDHI User and Reference Manual*. GUDHI Editorial Board, 2015. URL `http://gudhi.gforge.inria.fr/doc/latest/`.

[18] Van Rossum, Guido and Fred L. Drake: *Python 3 Reference Manual*. CreateSpace, Scotts Valley, CA, 2009, ISBN 1441412697.

[19] Watanabe, Satoru and Hayato Yamana: *Topological measurement of deep neural networks using persistent homology*, Jan 2022. ISSN 1573-7470. URL `https://doi.org/10.1007/s10472-021-09761-3`.

[20] Zomorodian, Afra and Gunnar Carlsson: *Computing persistent homology.* Discrete & Computational Geometry, 33(2):249–274, Feb 2005, ISSN 1432-0444. URL `https://doi.org/10.1007/s00454-004-1146-y`.