

# Aplicación de la topología algebraica en redes neuronales

---

Pablo Olivares Martínez



UNIVERSIDAD  
DE GRANADA

# Sección 1

1. Fundamento matemático
  - 1.1 Complejos simpliciales
  - 1.2 Homología simplicial
  - 1.3 Homología persistente
2. Estudio experimental de las CNNs con TDA
  - 2.1 Análisis de datos topológico
  - 2.2 Propuesta
  - 2.3 Experimentos
  - 2.4 Conjunto de datos
  - 2.5 Resultados
3. Trabajo futuro

# Complejos simpliciales

## Concepto

### Definición

Un **complejo simplicial geométrico** (finito), o simplemente **complejo simplicial** (finito),  $K$  en  $\mathbb{R}^N$ , es una colección (finita) de símplices en  $\mathbb{R}^N$  tal que:

1. Toda cara de un símplice de  $K$  está en  $K$ .
2. La intersección de cualesquiera dos símplices de  $K$  es o el vacío o una cara de ambos símplices.

# Complejos simpliciales

## Visualización

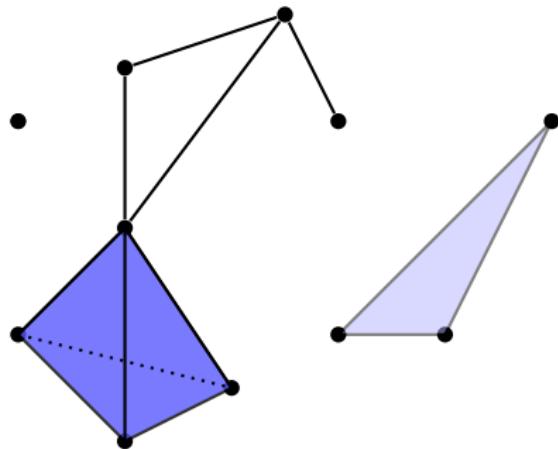


Figura: Visualización de un complejo simplicial.

# Complejos simpliciales abstractos

## Conceptos

### Definición

Un **complejo simplicial abstracto** (o simplemente complejo abstracto) es una colección  $\mathcal{K}$  de conjuntos finitos no vacíos tal que si  $A \in \mathcal{K}$ , entonces para todo  $B \subset A$  con  $B$  no vacío,  $B \in \mathcal{K}$ . Además, diremos que el complejo abstracto es **finito** si dicha colección es finita.

### Observación

Complejo simplicial geométrico  $\neq$  Complejo simplicial abstracto

# Complejos simpliciales abstractos

## Equivalencia

### Definición

Sean  $K$  un complejo simplicial y  $V$  su conjunto de vértices. Sea  $\mathcal{K}$  la colección de todos los subconjuntos  $\{a_0, \dots, a_p\} \subset V$  tales que los vértices  $a_0, \dots, a_p$  generan un simplex de  $K$ . Entonces llamaremos a la colección  $\mathcal{K}$  el **esquema de vértices** de  $K$ .

### Corolario

- Todo complejo abstracto finito  $\mathcal{K}$  es isomorfo al esquema de vértices de algún complejo simplicial  $K$ .
- Dos complejos simpliciales son afínmente isomorfos si, y sólo si, sus esquemas de vértices son isomorfos como complejos simpliciales abstractos.

# Ejemplos de complejos abstractos

## Complejos de Čech

### Definición

Sea  $X$  un espacio topológico y sea  $\mathcal{U} = \{U_v\}_{v \in V}$  un recubrimiento de  $X$  por puntos  $v \in V$ . Llamaremos **nervio** de  $\mathcal{U}$  al complejo simplicial abstracto con conjunto de vértices  $V$  tal que la familia  $v_0, \dots, v_p \in V$  genera un  $p$ -simplice si, y sólo si,  $U_{v_0} \cap \dots \cap U_{v_p} \neq \emptyset$ . Lo notaremos por  $N(\mathcal{U})$ .

### Definición

Sea  $(X, d)$  un espacio métrico y sea  $V$  un subconjunto de puntos finito de  $X$ . Dado  $\varepsilon > 0$ , definimos el **complejo de Čech**  $C(V, \varepsilon)$  como el nervio  $N(\mathcal{B}_\varepsilon)$ , donde  $\mathcal{B}_\varepsilon = \{B_\varepsilon(v) : v \in V\}$ , siendo  $B_\varepsilon(v)$  la bola abierta de centro  $x$  y radio  $\varepsilon > 0$ .

## Ejemplos de complejos abstractos

### Complejos de Vietoris-Rips

Sin embargo, el complejo de Čech es muy costoso de obtener computacionalmente.

¿Solución?

#### Definición

Sea  $(X, d)$  un espacio métrico y sea  $V$  un subconjunto de puntos de  $X$ . Dado  $\varepsilon > 0$ , definimos el **complejo de Vietoris-Rips**  $VR(V, \varepsilon)$  como el complejo abstracto cuyo conjunto de vértices es  $V$ , de forma que  $\{v_0, v_1, \dots, v_p\} \subseteq V$  genera un  $p$ -símplice si, y solo si,  $d(v_i, v_j) \leq \varepsilon$  para todo  $0 \leq i, j \leq p$ .

# Ejemplos de complejos abstractos

## Comparación

### Proposición

Sea  $(X, d)$  un espacio métrico y sea  $V$  un subconjunto de puntos de  $X$ .

Entonces

$$C(V, \varepsilon) \subseteq VR(V, 2\varepsilon) \subseteq C(V, 2\varepsilon).$$

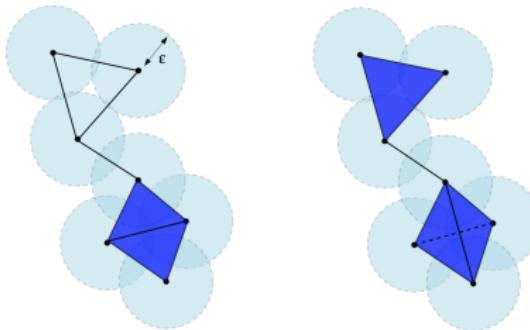


Figura: Complejo de Čech (izquierda) y complejo de Vietoris-Rips (derecha).

# Homología simplicial

## Módulos de homología

### Definición

Sea  $R$  un anillo. Un **complejo de cadenas**  $C_\bullet$  de  $R$ -módulos es una familia  $\{C_n, \partial_n\}$  donde  $C_n$  son  $R$ -módulos y  $\partial_n : C_n \rightarrow C_{n-1}$  homomorfismos de  $R$ -módulos llamados **operadores borde** tales que  $\partial_n \partial_{n+1} = 0$  para todo  $n \in \mathbb{Z}$ .

Llamaremos a los elementos de  $C_n$  **cadenas de dimensión n**. El submódulo de **ciclos** será  $Z_n(C_\bullet) = \ker \partial_n$ , y el submódulo de **bordes**  $B_n(C_\bullet) = \text{Im } \partial_{n+1}$ .

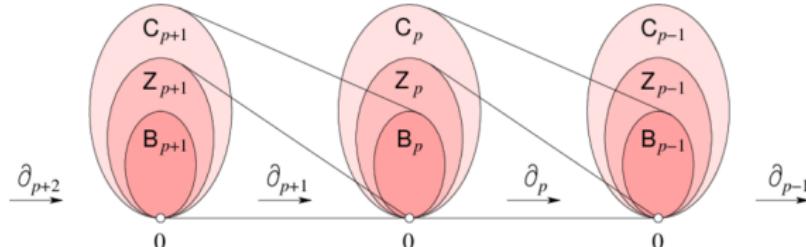


Figura: Edelsbrunner, Herbert & Harer, John. (2010). Computational Topology: An Introduction. 10.1007/978-3-540-33259-6\_7.

# Homología simplicial

## Complejos de cadenas

### Definición

Sea  $C_\bullet$  un complejo de cadenas. Definimos la **homología de  $C_\bullet$**  como la familia de  $R$ -módulos cociente  $\{H(C_n; R)\}_{n \in \mathbb{Z}}$  tal que

$$H_n(C_\bullet) = \frac{Z_n(C_\bullet)}{B_n(C_\bullet)}$$

para todo  $n \in \mathbb{Z}$ .

# Homología simplicial

## Homología simplicial orientada

### Definición

Sea  $K$  un complejo simplicial y sean  $C_p(K; R)$ ,  $C_{p-1}(K; R)$   $R$ -módulos de  $p$ -cadenas. Definimos el **operador borde de  $p$ -cadenas** como el homomorfismo  $\partial_p : C_p(K; R) \rightarrow C_{p-1}(K; R)$  tal que

$$\partial_p(\sigma) = \partial_p([v_0, v_1, \dots, v_p]) = \sum_{i=0}^p (-1)^i [v_0, \dots, \hat{v}_i, \dots, v_p].$$

donde  $\hat{v}_i$  denota el vértice a eliminar.

### Lema

Sean  $\partial_p : C_{p+1}(K; R) \rightarrow C_p(K; R)$ ,  $\partial_p : C_p(K; R) \rightarrow C_{p-1}(K; R)$  operadores borde. Entonces  $\partial_p \circ \partial_{p+1} = 0$ .

# Homología simplicial

## Ejemplo

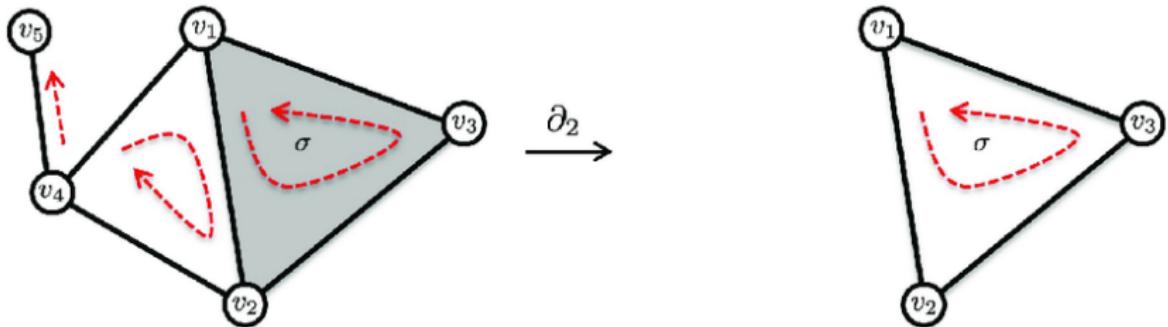


Figura: Chung, Moo. (2023). PH-STAT.

# Homología simplicial

## Sucesión de Mayer-Vietoris

### Teorema (Sucesión de Mayer-Vietoris)

Sea  $K$  un complejo simplicial y sean  $K_1, K_2$  subcomplejos de  $K$  tales que  $K = K_1 \cup K_2$ . Entonces existe una sucesión exacta

$$\cdots \rightarrow H_p(K_1 \cap K_2; R) \xrightarrow{f} H_p(K_1; R) \oplus H_p(K_2; R) \\ \xrightarrow{g} H_p(K; R) \rightarrow H_{p-1}(K_1 \cap K_2; R) \rightarrow \cdots$$

tal que  $f(c) = (i_{1\#}(c), -i_{2\#}(c))$ ,  $g(d, e) = j_{1\#}(d) + j_{2\#}(e)$  donde  $i_t : K_1 \cap K_2 \rightarrow K_t$  y  $j_t : K_t \rightarrow K_1 \cup K_2$  para  $t \in \{1, 2\}$  son las respectivas inclusiones.

# Homología simplicial

## Homología y conexión

### Corolario

Sea  $K$  un complejo simplicial y sea  $R$  un anillo unitario commutativo.

Entonces  $H_0(K; R) \cong R^s$ , donde  $s$  es el número de componentes conexas del poliedro  $|K|$ .

# Homología persistente

## Filtraciones

### Definición

Sea  $K$  un complejo simplicial. Una **filtración**  $\mathcal{F}$  de  $K$  es una familia totalmente ordenada de subcomplejos  $\{K^n\}_{n \in \mathbb{N}}$  tal que  $\emptyset, K \in \mathcal{F}$  y si  $i \leq j$ , entonces  $K^i \subseteq K^j$ . En particular, llamaremos a dicho orden **filtro**.

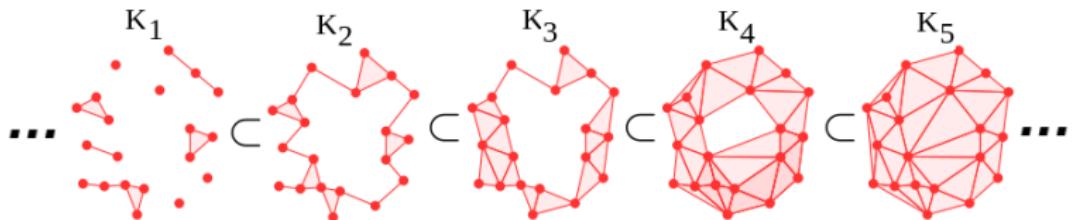


Figura: Kindelan Nuñez, Rolando & Frías, José & Cerda, Mauricio & Hitschfeld, Nancy. (2021). Classification based on Topological Data Analysis.

# Homología persistente

## Módulos de homología persistente

### Definición

Sea  $\mathcal{F}$  una filtración, sea  $p$  un número natural y sean  $i, j \in \{0, \dots, n\}$  tales que  $i \leq j$ . Definimos el  **$(i, j)$ -ésimo  $R$ -módulo de homología persistente de dimensión  $p$**  asociado a  $\mathcal{F}$  como

$$H_p^{i \rightarrow j}(\mathcal{F}; R) := \text{Im } f_p^{i \rightarrow j},$$

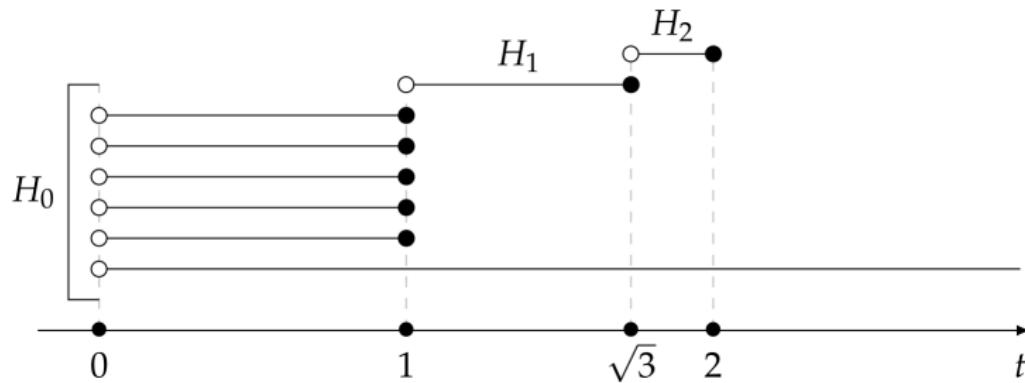
donde  $f_p^{i \rightarrow j}$  es el homomorfismo inducido entre las clases de homología de la inclusión que va de  $K^i$  a  $K^j$ .

# Teorema de correspondencia

Representación de la homología persistente

## Teorema de correspondencia

Sea  $R$  un anillo unitario. Entonces, existe un isomorfismo entre la categoría de  $R[t]$ -módulos graduados finitamente presentados y la categoría de módulos de persistencia discretos de tipo finitamente presentados.



## Sección 2

1. Fundamento matemático
  - 1.1 Complejos simpliciales
  - 1.2 Homología simplicial
  - 1.3 Homología persistente
2. Estudio experimental de las CNNs con TDA
  - 2.1 Análisis de datos topológico
  - 2.2 Propuesta
  - 2.3 Experimentos
  - 2.4 Conjunto de datos
  - 2.5 Resultados
3. Trabajo futuro

# Análisis de datos topológico

## Flujo de trabajo

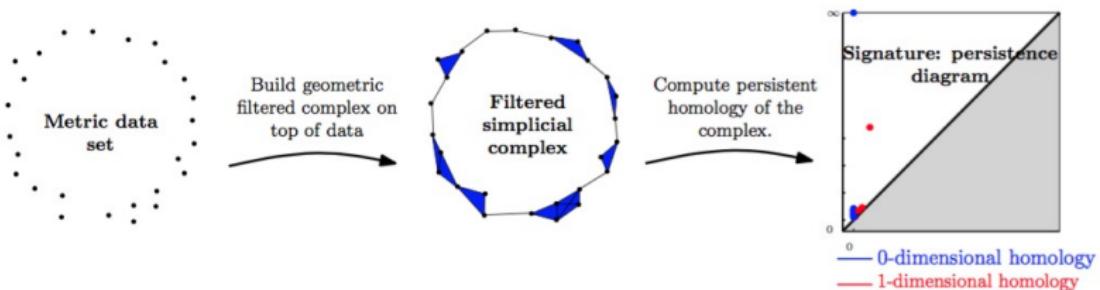


Figura: Chazal, Frédéric & Glisse, Marc & Labruère Chazal, Catherine & Michel, Bertrand. (2013). Optimal rates of convergence for persistence diagrams in Topological Data Analysis.

# Análisis de datos topológico

## Persistencia Total

Dado un código de barras  $\mathcal{B}$ , se conoce como **persistencia total** a la suma de la longitud de los intervalos que forman el código de barras. Esto es,

$$TP = \sum_{(b_i, d_i) \in \mathcal{B}} d_i - b_i,$$

donde  $d_i \in \mathbb{R}$  denota el instante de muerte de la clase de homología y  $b_i \in \mathbb{R}$  el nacimiento de ésta.

### Propiedades:

- Es una medida **absoluta**: interesante para observar cambios tanto en la escala como la complejidad topológica.
- Bajo ciertas condiciones que podemos garantizar en la práctica, es una función **diferenciable**.

## Propuesta

### Persistencia Total Normalizada

**Propuesta:** Dado un código de barras  $\mathcal{B}$ , proponemos un **término de regularización**  $\Omega(\mathcal{B})$  que minimice la persistencia de forma que

$$J_{\Omega}(\mathbf{w}) = J(\mathbf{w}) + \alpha \Omega(\mathcal{B}), \quad \Omega(\mathcal{B}) = \frac{TP}{L} = \frac{1}{L} \cdot \sum_{(b_i, d_i) \in \mathcal{B}} |d_i - b_i|,$$

donde  $L = \max_{(b_i, d_i) \in \mathcal{B}} \{d_i - b_i\}$  es el intervalo de mayor longitud.

#### Propiedades:

- Es una medida **relativa**: interesante para observar cambios a nivel estructural, independientemente de la escala.
- Introduce información directamente relacionada con la «**forma**» de los **datos** en el proceso de optimización.

# Experimentos

## 1. Primera etapa:

- Comparación de la complejidad topológica de los datos a lo largo de la red según la **arquitectura, tamaño de lote y optimizador**.

## 2. Segunda etapa:

- Selección del mejor modelo para cada granularidad del conjunto de datos.
- Comparación de la topología de los datos **con y sin aumento de datos, granularidad del conjunto y partición de datos**.

## 3. Última etapa:

- **Hipótesis:** una menor complejidad topológica en etapas finales podría mejorar la clasificación, mientras que una mayor podría facilitar la transferencia a conjuntos más complejos.
- **Propuesta: mejorar la clasificación y transferibilidad** usando el regularizador topológico.

# Conjunto de datos

## *Vehicle Identification*

- Conjunto de fotografías frontales de distintos coches ofrecido por el Instituto Andaluz Interuniversitario en *Data Science and Computational Intelligence*.
- **Distinta granularidad:**
  - Especificidad Marca: 3232 imágenes con 34 clases.
  - Especificidad Marca-Modelo: 2701 imágenes con 152 clases.
- Imágenes con **distinto origen** → Rescalado a  $224 \times 224$  píxeles y 3 canales.
- Modelos **preentrenados en ImageNet** → Normalización de los datos.

# Conjunto de datos

## Ejemplos



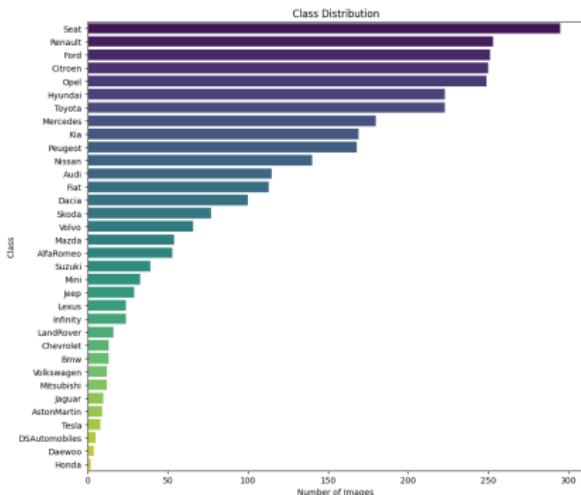
Figura: Ejemplos de instancias por clase en la especificidad de Marca-Modelo.

# Conjunto de datos

## Desbalanceo de datos

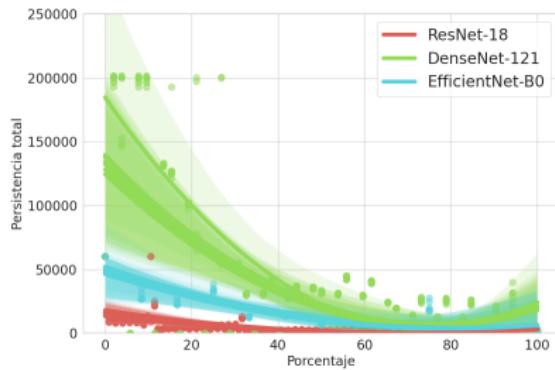
**Problema:** distribución de clases desbalanceada tanto en Marca como en Marca-Modelo.

Importante tenerlo en cuenta en la evaluación de los resultados.

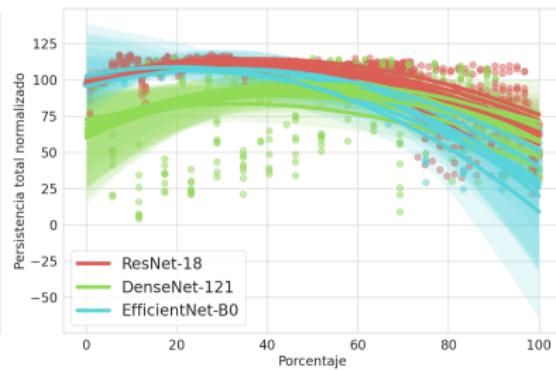


# Análisis de la homología persistente en CNNs

## Primera etapa: resultados



(a) Persistencia total en ResNet-18, DenseNet-121, EfficientNet-B0.



(b) Persistencia total normalizada en ResNet-18, DenseNet-121, EfficientNet-B0.

Figura: Comparación de persistencia total y persistencia total normalizada según la arquitectura para la especificidad Marca.

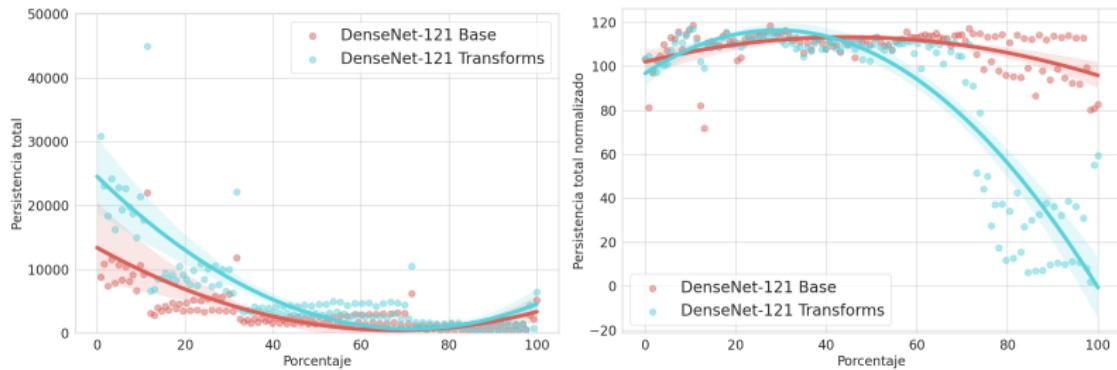
# Análisis de la homología persistente en CNNs

## Primera etapa: discusión

- Las CNNs disminuyen la persistencia total para finalmente aumentarla al final.
- Las clases de homología persistente tienden a ser más homogéneas en el punto medio de la ejecución, de forma que los datos están **más dispersos y desordenados**.
- La **arquitectura** de la red es el **principal factor** que determina cómo evoluciona la complejidad topológica de los datos.
- **SGD realiza cambios más bruscos** en la persistencia total que Adam.
- La homología persistente es **robusta respecto al tamaño de lote** escogido.

# Análisis de la homología persistente en CNNs

## Segunda etapa: resultados

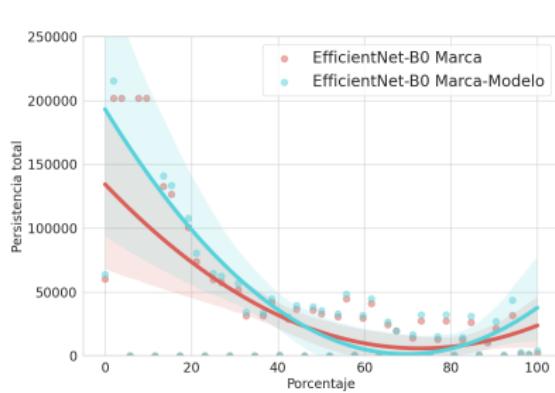


(a) Persistencia total en EfficientNet-B0 base y con aumentos.  
(b) Persistencia total normalizada en EfficientNet-B0 base y con aumentos.

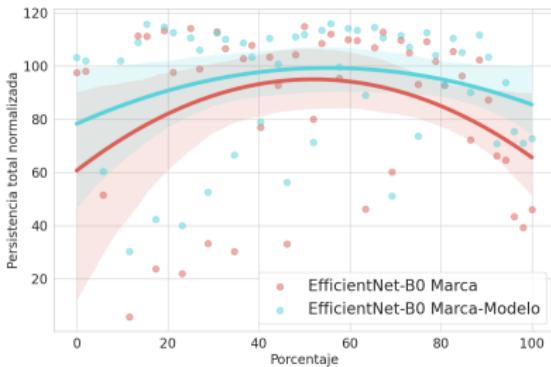
Figura: Comparación de persistencia total y persistencia total normalizada en EfficientNet-B0, versión base y con transformaciones.

# Análisis de la homología persistente en CNNs

## Segunda etapa: resultados



(a) Persistencia total en EfficientNet-B0 para especificidades Marca y Marca-Modelo.

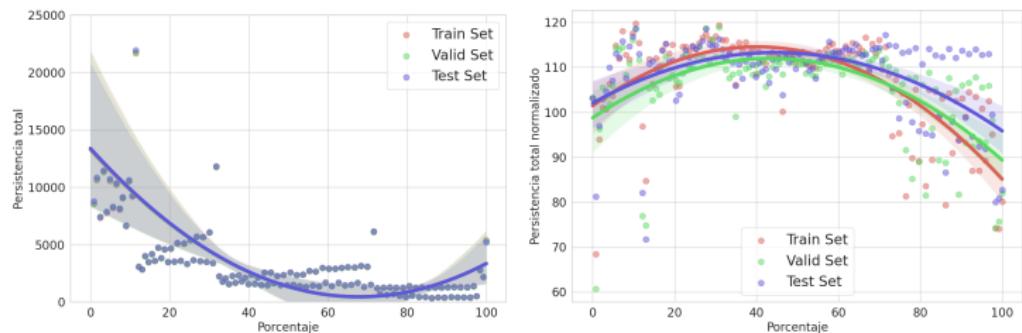


(b) Persistencia total normalizada en EfficientNet-B0 para especificidades Marca y Marca-Modelo.

Figura: Comparación de persistencia total y normalizada en EfficientNet-B0, entrenado con SGD y lote de 64, según avance de datos para Marca y Marca-Modelo.

# Análisis de la homología persistente en CNNs

## Segunda etapa: resultados



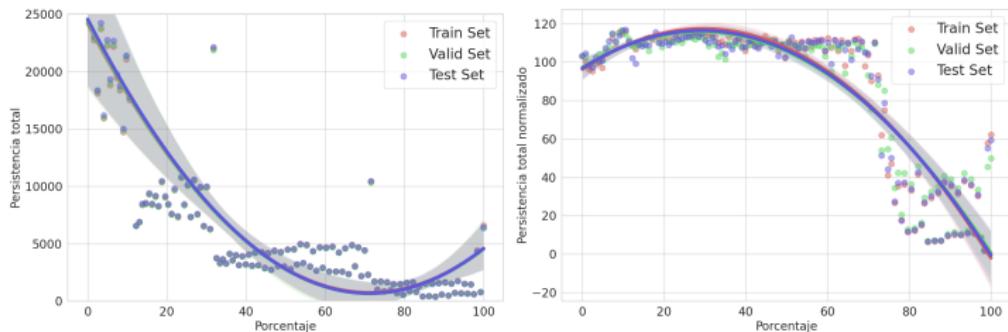
(a) Persistencia en entrenamiento, validación y test.

(b) Persistencia normalizada en entrenamiento, validación y test.

Figura: Comparación de persistencia y persistencia normalizada en conjuntos de entrenamiento, validación y test para Marca-Modelo, sin aumento de datos.

# Análisis de la homología persistente en CNNs

## Segunda etapa: resultados



(a) Persistencia en entrenamiento, validación y test.

(b) Persistencia normalizada en entrenamiento, validación y test.

Figura: Comparación de persistencia y persistencia normalizada en conjuntos de entrenamiento, validación y test para Marca-Modelo, con aumento de datos.

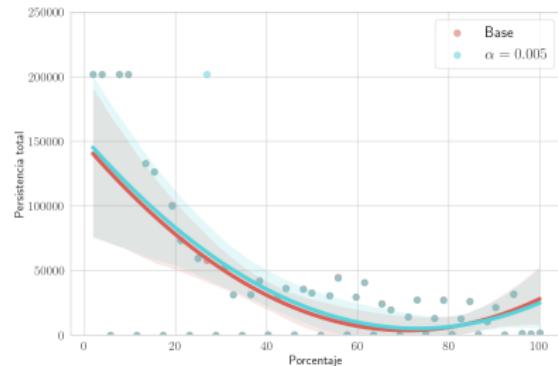
# Análisis de la homología persistente en CNNs

## Segunda etapa: discusión

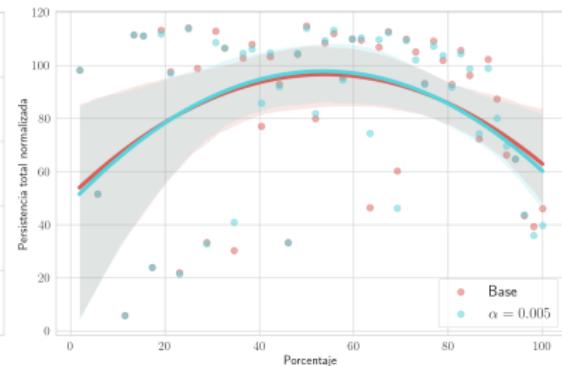
- El aumento de datos promueve una **adaptación temprana a la complejidad de los datos**, reduciendo la intervención intensiva en etapas posteriores.
- La granularidad en la clasificación requiere que los modelos **preserven una mayor complejidad topológica** para mantener distinciones claras entre categorías.
- Modelos con mejores métricas demuestran un **ajuste más preciso** de características topológicas a lo largo de los conjuntos de datos, indicando un aprendizaje más consistente y profundo.

# Propuesta: regularización topológica

## Resultados



(a) Persistencia total en EfficientNet-BO para especificidad Marca.

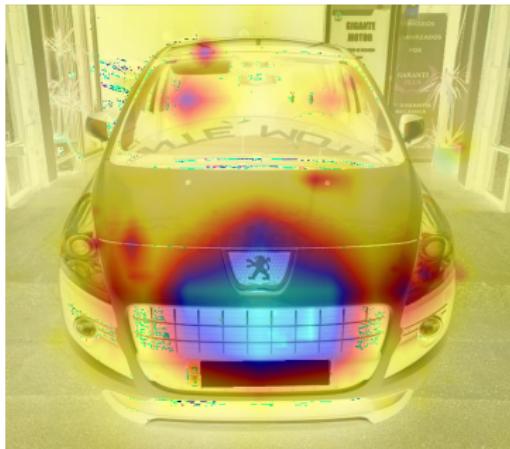


(b) Persistencia total normalizada en EfficientNet-BO para Marca.

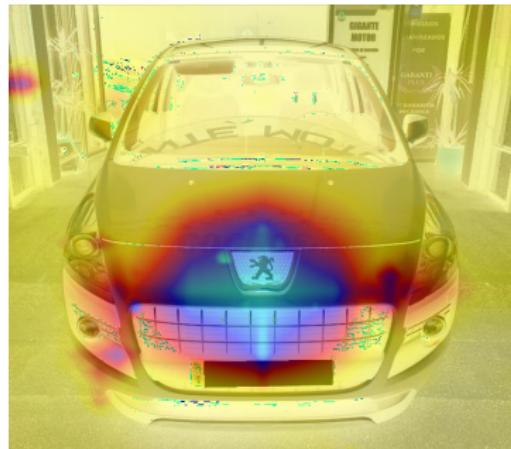
Figura: Comparación de persistencia total y normalizada en EfficientNet-BO refinado, evaluado con y sin regularizador para Marca.

# Propuesta: regularización topológica

## Ejemplos



(a) Ejemplo mal clasificado sin regularización.

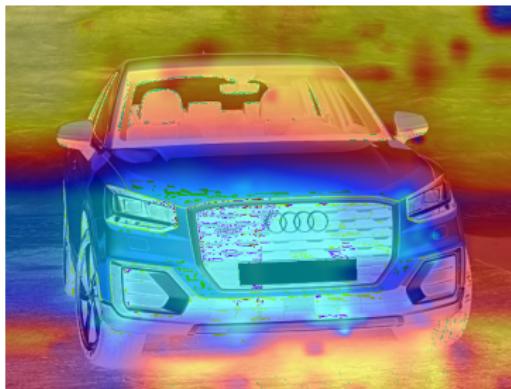


(b) Ejemplo bien clasificado con regularización.

Figura: Comparación de resultados en EfficientNet-B0 para Marca con y sin regularización.

# Propuesta: regularización topológica

## Ejemplos



(a) Ejemplo mal clasificado sin regularización.

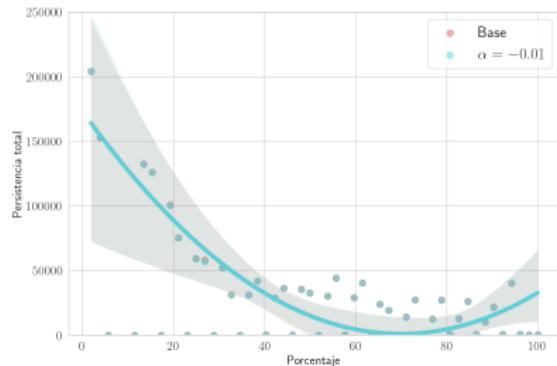


(b) Ejemplo bien clasificado con regularización.

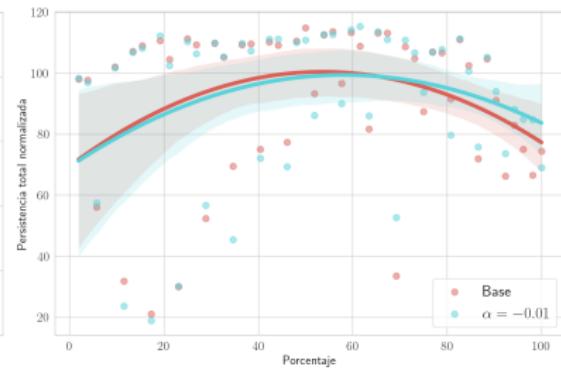
Figura: Resultados de clasificación en DenseNet-121 para Marca-Modelo con y sin regularización.

# Propuesta: regularización topológica

## Resultados



(a) Persistencia total en transferencia a Marca-Modelo.



(b) Persistencia total normalizada en transferencia a Marca-Modelo.

Figura: Persistencia total y persistencia total normalizada en EfficientNet-B0 transferido, desde Marca a Marca-Modelo.

# Propuesta: regularización topológica

## Ejemplos



(a) Ejemplo mal clasificado sin regularización.

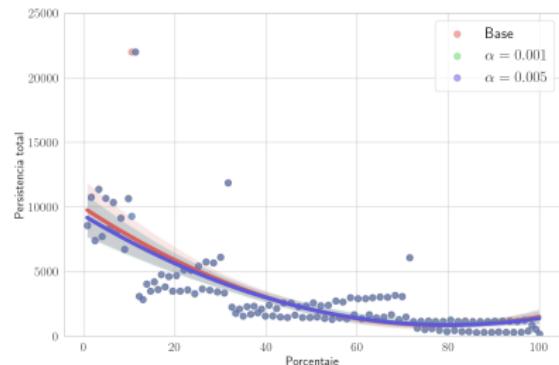


(b) Ejemplo bien clasificado con regularización.

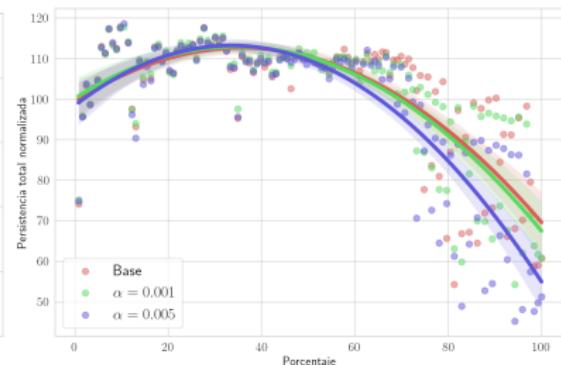
Figura: Comparación de resultados en la transferencia de EfficientNet-B0 desde Marca a Marca-Modelo, con y sin regularización.

# Propuesta: regularización topológica

## Resultados



(a) Persistencia total en transferencia de Marca-Modelo a Marca.



(b) Persistencia total normalizada en transferencia de Marca-Modelo a Marca.

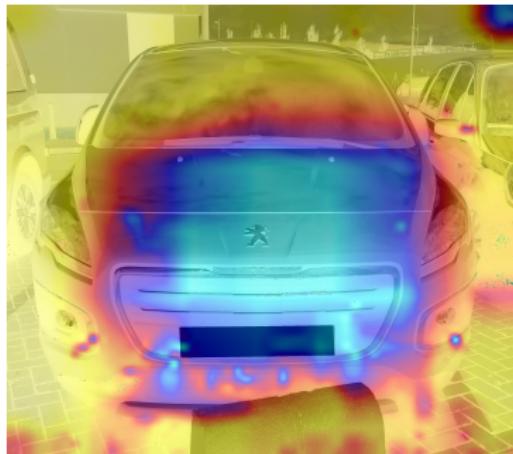
Figura: Comparación de persistencia total y persistencia total normalizada en DenseNet-121, transferido con SGD y lote de 32, desde Marca-Modelo a Marca.

# Propuesta: regularización topológica

## Ejemplos



(a) Ejemplo mal clasificado sin regularización.



(b) Ejemplo bien clasificado con regularización.

Figura: Comparación de resultados en la transferencia de DenseNet-121 desde Marca-Modelo a Marca, con y sin regularización.

## Propuesta: regularización topológica

### Resultados

- Se ha obtenido una mejora considerable en la exactitud y F1-Score refinando el modelo EfficientNet-B0 con el *backbone* congelado.
- Se ha obtenido una mejora de hasta el **2 % en la exactitud y del 3 % en F1-Score** refinando el modelo DenseNet-121 con el *backbone* congelado.
- Se ha obtenido una mejora de hasta el **4 % en la exactitud y del 5 % en F1-Score** transfiriendo el modelo EfficientNet-B0 desde Marca a Marca-Modelo.
- Se ha obtenido una leve mejora en la exactitud y F1-Score transfiriendo el modelo DenseNet-121 desde Marca-Modelo a Marca.

## Propuesta: regularización topológica

### Discusión

- Se confirman las hipótesis planteadas.
- El regularizador topológico **mejora la capacidad de clasificación**.
- La inclusión de TDA **potencia la capacidad de transferencia de conocimiento**.
- La regularización es **sensible a la elección del hiperparámetro  $\alpha$** . Se recomienda tomar valores entre 0.001 y 0.1.

# Sección 3

1. Fundamento matemático
  - 1.1 Complejos simpliciales
  - 1.2 Homología simplicial
  - 1.3 Homología persistente
2. Estudio experimental de las CNNs con TDA
  - 2.1 Análisis de datos topológico
  - 2.2 Propuesta
  - 2.3 Experimentos
  - 2.4 Conjunto de datos
  - 2.5 Resultados
3. Trabajo futuro

## Trabajo futuro

- Comparar otras arquitecturas y conjuntos de datos para obtener conclusiones más robustas.
- Estudiar el impacto de componentes individuales en la topología de los datos.
- Desarrollar mecanismos robustos para la elección de hiperparámetros en regularización topológica.
- Analizar artefactos post-regularización y mejorar el regularizador.

¡Muchas gracias por su atención!

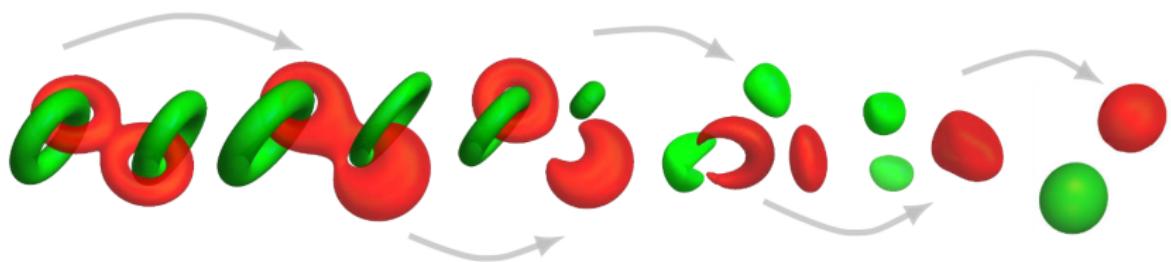


Figura: Naitzat, Gregory & Zhitnikov, Andrey. (2020). Topology of Deep Neural Networks. Journal of Machine Learning Research. 21. 1-40.