

Universidad de Alcalá

Escuela Politécnica Superior

Grado en Ingeniería Informática

Trabajo Fin de Grado

Clasificación de imágenes mediante redes neuronales
convolucionales y transformers multimodales

ESCUELA POLITÉCNICA
Autor: Pablo García García
Tutor: Adrián Domínguez Díaz

2024

**UNIVERSIDAD DE ALCALÁ
ESCUELA POLITÉCNICA SUPERIOR**

Grado en Ingeniería Informática

Trabajo Fin de grado

**Clasificación de imágenes mediante redes neuronales
convolucionales y transformers multimodales**

Autor: Pablo García García

Tutor: Adrián Domínguez Díaz

Tribunal:

Presidente:

Vocal 1º:

Vocal 2º:

Fecha de depósito:

“Computer Science is no more about computers than astronomy is about telescopes.”
Edsger W. Dijkstra

Resumen

Palabras clave:

Abstract

Keywords:

Índice general

Resumen	7
Abstract	9
Acrónimos y siglas	18
Introducción	21
1. Aprendizaje automático y profundo	23
1.1. Breve historia de la Inteligencia Artificial	23
1.2. Tipos de aprendizaje y problemas	23
1.3. Perceptrón	24
1.4. Redes neuronales artificiales	29
1.4.1. Funciones de activación	34
1.5. Redes neuronales convolucionales	36
1.6. Transformers	41
1.6.1. Codificación	42
1.6.2. Decodificación	44
1.6.3. Ejecución y entrenamiento	45
1.7. Transformers de visión	46
1.8. Transformers multimodales	47
1.8.1. Clasificación no supervisada	48
2. Optimización del proceso de valoración de puntos de interés	52
2.1. Tecnologías empleadas	52
2.1.1. Python	52
2.1.2. CUDA	54
2.1.3. Google Cloud Platform	56
2.2. Clasificación de imágenes mediante redes convolucionales	57
2.2.1. Proceso ETL	57
2.2.2. Creación y entrenamiento de una red convolucional en TensorFlow	59
2.2.3. Transfer learning en TensorFlow	62
2.2.4. Aumento de datos	64
2.2.5. Evaluación de los modelos	64
2.2.6. Detección de clases desconocidas	70
2.3. Clasificación de imágenes mediante transformers multimodales	73
2.3.1. Generación de embeddings con Vertex AI	73
2.3.2. Clasificación no supervisada de embeddings	75
2.3.3. Evaluación de la clasificación	77
Bibliografía	83

Índice de figuras

1.1.	Arquitectura de un perceptrón	25
1.2.	Puntos etiquetados en \mathbb{R}^2	26
1.3.	Puntos separados en \mathbb{R}^2	26
1.4.	Valores de $x \oplus y$ en \mathbb{R}^2	27
1.5.	Arquitectura de una red neuronal multicapa	30
1.6.	Red neuronal multicapa	31
1.7.	Descenso por gradiente	32
1.8.	Función lineal	34
1.9.	Función logística	34
1.10.	Tangente hiperbólica	35
1.11.	Función ReLU	35
1.12.	Imágenes y sus mapas de características [10]	37
1.13.	Detección de bordes aplicando los kernel Sobel	38
1.14.	Red convolucional VGG-16	40
1.15.	Arquitectura de un transformer codificador-decodificador [17]	42
1.16.	Visualización del algoritmo de atención [17]	43
1.17.	Arquitectura de un transformer de visión [19]	46
1.18.	Información multimodal [22]	47
1.19.	Asignación de textos a imágenes [24]	48
1.20.	Variantes del algoritmo de atención múltiple-cruzada [21]	48
1.21.	Dendrograma	49
1.22.	k óptimo mediante el método del codo	50
1.23.	Punto de mayor curvatura mediante Kneedle	51
2.1.	Información de una propuesta en Wayfarer	53
2.2.	Cuestionario de una propuesta en Wayfarer	53
2.3.	Mapa y clasificación de una propuesta de Wayfarer	53
2.4.	Python	54
2.5.	Bibliotecas populares de Python	54
2.6.	NVIDIA	55
2.7.	Arquitectura CUDA a nivel de hardware y software [32]	55
2.8.	Comparativa de entrenamiento en CPU frente a en GPU	56
2.9.	Google Cloud Platform	57
2.10.	Árbol de carpetas del dataset	58
2.11.	Visualización de ejemplo de un dataset creado	59
2.12.	Arquitectura de la red convolucional	60
2.13.	Pérdida y precisión durante el entrenamiento de la CNN	61
2.14.	MobileNet [36]	63
2.15.	Pérdida y precisión durante el entrenamiento aplicando transfer learning	63
2.16.	Visualización de ejemplo de un dataset aplicando aumento de datos	65
2.17.	Matrices de confusión	66
2.18.	Precisión, sensibilidad, y F_1	67
2.19.	Curvas ROC	69

2.20. Capacidad de generalización de la red, predicción en Galicia y Guadalajara	69
2.21. Métricas en clasificación con clase desconocida	70
2.22. Arquitectura de clasificación con clases desconocidas	71
2.23. Diagrama de probabilidades	71
2.24. Métricas en clasificación con clase desconocida (doble modelo)	72
2.25. Embeddings de un transformer multimodal	73
2.26. Embeddings en \mathbb{R}^2 mediante PCA y t-SNE	75
2.27. Cálculo del k óptimo mediante el método del codo	76
2.28. Clusters calculados con k -means	76
2.29. Clusters calculados con CJA	77
2.30. Imágenes y clusters	78
2.31. Matrices de contingencia	79
2.32. Matrices de confusión	79
2.33. Coeficiente de la silueta	81

Índice de algoritmos

1.1.	Regla de aprendizaje del perceptrón	27
1.2.	Descenso por gradiente	32
1.3.	Retropropagación (<i>backpropagation</i>)	33
1.4.	Atención simple	43
1.5.	Atención múltiple	44
1.6.	Atención múltiple-cruzada	45
1.7.	k -means	49
1.8.	Clustering jerárquico aglomerativo	50
1.9.	Método del codo	50
1.10.	Kneedle	51

Acrónimos y siglas

API Application Programming Interface

AR Realidad Aumentada

ARI Adjusted Rand Index

AUC Area Under Curve

AWS Amazon Web Services

CJA Clusterización Jerárquica Aglomerativa

CLI Command Line Interface

CLS Classify Token

CNN Convolutional Neural Network

CPU Central Processing Unit

CUDA Compute Unified Device Architecture

DBSCAN Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise

EOS End of Sequence

ETL Extract, Transform, Load

GAN Generative Adversarial Network

GCP Google Cloud Platform

GMM Gaussian Mixture Models

GPU Graphics Processing Unit

HTTP Hypertext Transfer Protocol

IA Inteligencia Artificial

IaaS Infrastructure as a Service

JSON JavaScript Object Notation

NLP Natural Language Processing

OVO One Versus One

OVR One Versus Rest

PaaS Platform as a Service

PCA Principal Component Analysis

ReLU Rectified Linear Unit

RGB Red Green Blue

ROC Reciver Operating Characteristic

SaaS Software as a Service

SDK Software Development Kit

SGD Stochastic Gradient Descent

SM Streaming Multiprocessor

SOS Start of Sequence

SP Streaming Processor

SQL Structured Query Language

t-SNE t-distributed Stochastic Neighbor Embedding

URI Uniform Resource Identifier

ViT Vision Transformer

WCSS Within Cluster Sum of Squares

XOR Exclusive OR

Introducción

Capítulo 1

Aprendizaje automático y profundo

1.1. Breve historia de la Inteligencia Artificial

Ya desde hace varias décadas, se planteaba la posibilidad de que las máquinas fuesen capaces de realizar tareas diferentes a meros cálculos. La persona que realizó dicha afirmación fue la matemática Ada Lovelace, que en 1842 programó el considerado primer algoritmo. No fue hasta bastantes años más tarde en 1956 cuando se celebra la Conferencia de Darmouth por los hoy considerados padres de la IA (Inteligencia Artificial), en la que se propone estudiar la Inteligencia Artificial como una ciencia más. En dicha época existían dos corrientes, la simbólica y la conexiónista.

La primera de ellas se ocupaba de resolver problemas de toma de decisiones y de obtención de conclusiones. Fueron populares los algoritmos de búsqueda y los sistemas expertos. Por otro lado, la corriente conexiónista trataba de simular el comportamiento de las neuronas humanas de manera artificial, haciendo que estas neuronas artificiales pudiesen aprender. De aquí surgió el perceptrón que también fue presentado en esta conferencia. Más tarde, entre 1970 y 1980, con el libro de Minsky sobre los perceptrones y sus limitaciones, investigaciones en falso, y bajos recursos, decayó el interés y la investigación de la IA. Sin embargo, esta etapa vacía finaliza con la llegada del algoritmo de retropropagación que permitía entrenar redes neuronales multicapa, trayendo consigo infinidad de nuevos proyectos.

Años después, avanzados los 2000, se empieza a ver lo poderosos que pueden llegar a ser ciertos modelos de IA al vencer a campeones del mundo en juegos, como a Kasparov en el ajedrez o a Jie en Go. Con la llegada de más y mejores recursos y financiación, hacia 2010 se populariza el uso de redes neuronales para trabajar con imágenes, resolver problemas de clasificación, etc [1].

Hace diez años surge uno de los modelos de IA con el que se inicia el paradigma que más popularidad está tomando en la actualidad. Este es el de la IA generativa. En 2014 Ian Goodfellow presenta las redes GAN (Generative Adversarial Network) con las que crear nuevos datos, por ejemplo rostros humanos que no existen en realidad, tal y como se muestra en <https://thispersondoesnotexist.com/>. Gracias a la IA generativa combinada con modelos de lenguajes, han ido surgiendo en los últimos años herramientas muy poderosas como ChatGPT con la que entablar cualquier tipo de conversación, solicitar información o ayuda para resolver cualquier problema; DALL-E o MidJourney a las que solicitar crear una imagen mediante una descripción por texto, o incluso un vídeo con Sora.

1.2. Tipos de aprendizaje y problemas

Al intentar resolver un problema relacionado con el aprendizaje automático, normalmente el primer paso es elegir un modelo que se adapte correctamente al dominio y tipo del problema. De manera ingenua, se puede entender como una especie de caja negra a la que dada una serie de entradas devuelve una serie de salidas que dependen de dichas entradas, y una serie de operaciones con respecto a un conjunto de parámetros Θ . Por

tanto, para obtener las salidas deseadas para una serie de entradas, el trabajo es encontrar los parámetros óptimos Θ^* que produzcan dichas salidas. Esto se logra mediante un algoritmo de aprendizaje o entrenamiento, siendo el segundo paso elegir uno acorde al modelo. Normalmente se dispone de dos tipos de aprendizaje, aprendizaje supervisado y aprendizaje no supervisado. Como tercer paso, se debe de medir de alguna manera cómo de bien o mal se está comportando el modelo y el algoritmo, tal y como se estudiará más adelante [2].

En los problemas de aprendizaje supervisados, se dispone de un conjunto de datos o *dataset*, que contiene los valores de salida deseados para diferentes valores de entrada, normalmente recogiendo situaciones del pasado para poder extrapolar este conocimiento a situaciones del futuro. Los principales problemas que de aprendizaje supervisado son los problemas de clasificación y de regresión. En los problemas de clasificación, se dispone de una serie de clases C_1, C_2, \dots, C_n , y para una serie de valores de entrada x_1, x_2, \dots, x_m , debe decidirse a qué clase pertenece dicha entrada. Un ejemplo sería decidir si un paciente va a sufrir un cierto tipo de cáncer dada su edad, peso, y otras constantes vitales. Algunos de los modelos más populares para llevar a cabo este tipo de tareas son árboles de decisión, máquinas de soporte vectorial, Naïve Bayes, k -vecinos, y redes neuronales; siendo estas últimas objeto de estudio en este trabajo. Otro tipo de problema popular a la hora de disponer de datos etiquetados, son los problemas de regresión, que se diferencian principalmente de la clasificación en que en este caso, los valores no son clases (valores discretos) sino valores continuos. Para resolver este tipo de problemas se suelen utilizar regresiones lineales y no lineales (exponencial, polinómica, etc), o también se pueden adaptar modelos utilizados en problemas de clasificación, como las redes neuronales. Un ejemplo de un problema de regresión sería predecir las horas que dormirá una persona dada su edad, horas trabajadas en el día, etc.

Por otro lado, en los problemas de aprendizaje no supervisado no se dispone de los valores de salida esperados para una cierta observación (justo al contrario que en el caso supervisado), pues será trabajo del algoritmo encontrar relaciones y patrones entre los datos proporcionados. En este tipo de aprendizaje también se trata el problema de clasificación, sin embargo, es más común llamarlo clustering o segmentación, pues a priori no se conoce el número de clases y cuáles son, es el algoritmo el que deberá encontrar relaciones entre los datos para determinar esto. Algoritmos populares para realizar esta tarea son k -medias, CJA (Clusterización Jerárquica Aglomerativa), GMM (Gaussian Mixture Models), y DBSCAN (Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise). Un ejemplo sencillo de este problema es detectar las diferentes regiones y objetos representados en una imagen, pues inicialmente no se conoce el número de regiones u objetos, y deben detectarse todas, asignando cada píxel de la imagen a cada una de ellas.

1.3. Perceptrón

Ya en el año 1958, el psicólogo Frank Rosenblatt propuso un modelo llamado perceptrón el cual estaba basado en el comportamiento y funcionamiento de las neuronas de un humano, y que podía aprender ponderando cada coeficiente de entrada a la neurona [1]. Hoy en día, tal y como se mostrará en esta sección, el perceptrón es la unidad fundamental de muchos modelos de *machine learning* y *deep learning*.

Como se verá durante esta sección, este modelo ayuda a solucionar problemas de clasificación supervisada. Se dispone de una serie de valores de entrada x_1, x_2, \dots, x_n y se tiene una serie de valores de salida y_1, y_2, \dots, y_m que representan a qué clase pertenece la entrada (2^m clases posibles). Esto se consigue mediante la ayuda de sus parámetros, que son una serie de pesos w_1, w_2, \dots, w_n y un sesgo o *bias* b ; y sus hiperparámetros, entre los que se encuentra una función f de activación.

En la Figura 1.1 se muestra la arquitectura del caso más simple de un perceptrón. Se tienen n entradas y una única salida. La primera parte del diagrama representa que tal y como decía Rosenblatt, cada valor de entrada debe multiplicarse por un cierto peso, de tal forma que si se representa esto en función de sus valores en un instante k , lo que se computa en el nodo n_1 es la siguiente operación.

$$n_1(k) = b_1(k) + \sum_{i=1}^n x_i(k)w_i(k)$$

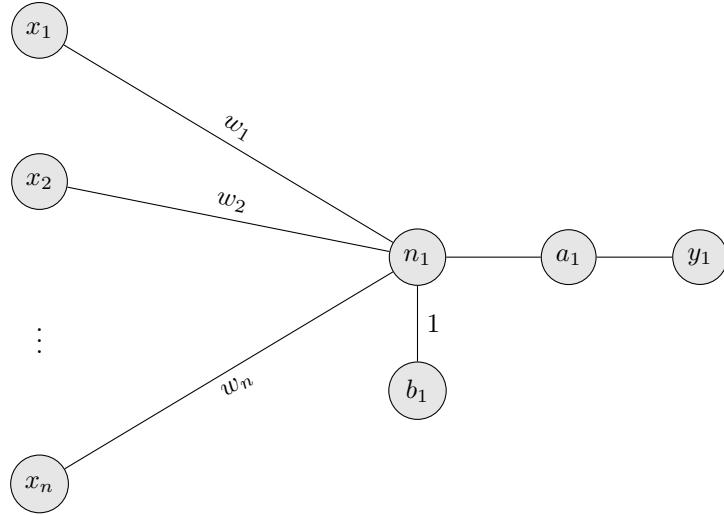


Figura 1.1: Arquitectura de un perceptrón

Una vez se ha realizado este cálculo, el valor pasa por una función de activación en el nodo a_1 , pues esta arquitectura es común utilizarla para clasificar una entrada y es muy útil obtener una salida binaria donde se active únicamente la salida que represente la clase a la que pertenece la entrada dada. Aunque existen diferentes funciones de activación para las neuronas, al trabajar con un perceptrón, la función de activación por excelencia es la función escalón de Heaviside, donde $\mathcal{U} : \mathbb{R} \rightarrow \{0, 1\}$ y su expresión analítica es

$$\mathcal{U}(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ 1 & \text{si } x \geq 0 \end{cases}.$$

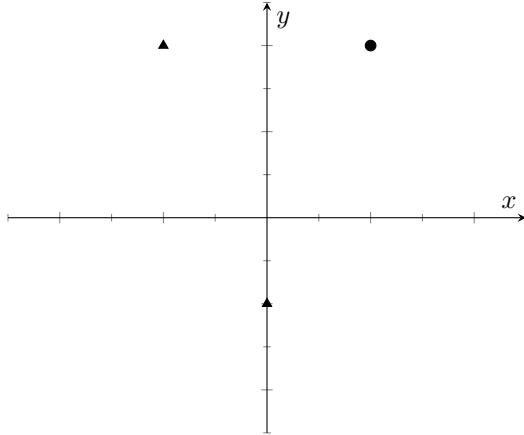
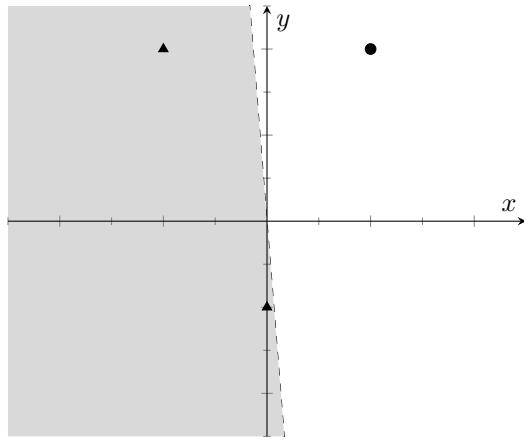
Combinando ambas expresiones, se puede resumir en que la salida del perceptrón es equivalente a la siguiente ecuación:

$$y_1(k) = \begin{cases} 0 & \text{si } b_1(k) + \sum_{i=1}^n x_i(k)w_i(k) < 0 \\ 1 & \text{si } b_1(k) + \sum_{i=1}^n x_i(k)w_i(k) \geq 0 \end{cases}$$

Para dar un ejemplo claro de cómo funciona el perceptrón, se pueden tomar una serie de observaciones que tengan dos valores de entrada y uno de salida. Además, se supondrá que existen dos clases. Esto a fin de cuentas es asignar un valor de 0 o 1 a cada punto de \mathbb{R}^2 tal y como se describe en la Figura 1.2.

Una solución rápida sería trazar una recta $r : ax + by + c = 0$ que separe \mathbb{R}^2 en dos regiones, de forma que todo punto que pertenezca a una región pertenece entonces a una misma clase, tal y como se observa en la Figura 1.3. Esta recta suele llamarse *decision boundary* o frontera de decisión. El problema entonces es hallar la recta r , pero se cumple que para este ejemplo es de la forma $w_1x + w_2y + b = 0$, siendo el problema encontrar los parámetros adecuados del modelo. La idea puede extrapolarse a diferente tamaño de entrada tomando un hiperplano de la forma $\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b = 0$.

Las preguntas a resolver ahora son, ¿existen siempre dichos parámetros? ¿Cómo pueden hallarse? El propio Minsky se hizo estas preguntas en [3] y se dio cuenta de que dichos parámetros sí pueden hallarse en un número finito de pasos, siempre y cuando los puntos sean linealmente separables. Un ejemplo que no es linealmente separable es el de la función XOR (Exclusive OR) tal y como se muestra en la Tabla 1.1 y Figura 1.4, pues no existe una recta r que separe \mathbb{R}^2 en dos regiones de tal forma que cada región contenga puntos de una única clase, sería necesaria una frontera de decisión no lineal.

Figura 1.2: Puntos etiquetados en \mathbb{R}^2 Figura 1.3: Puntos separados en \mathbb{R}^2

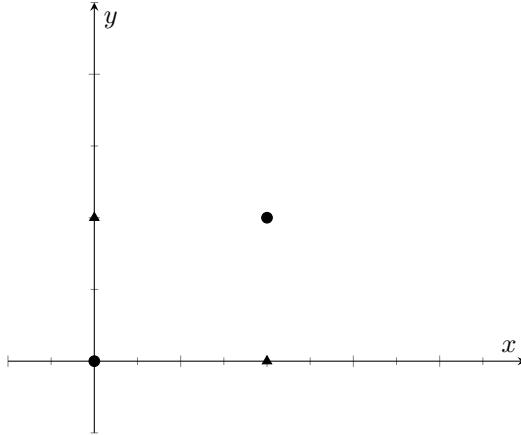
x	y	$x \oplus y$
0	0	0
0	1	1
1	0	1
1	1	0

Tabla 1.1: Función XOR

En cuanto a la pregunta de cómo hallar los parámetros, se consideran las siguientes ecuaciones [4], donde \mathbf{w} es el vector de pesos, t el valor esperado, y a la salida del perceptrón y se aplica el Algoritmo 1.1 para obtener los parámetros óptimos. En dicho algoritmo se supondrá que existe una matriz X de n filas que contiene los diferentes \mathbf{x} .

$$\begin{aligned}
 \mathbf{w}(k+1) &= \mathbf{w}(k) + e(k)\mathbf{x}(k) \\
 b(k+1) &= b(k) + e(k) \\
 e(k) &= t(k) - a(k) \\
 a(k) &= \mathcal{U}(\mathbf{w}^T(k)\mathbf{x}(k))
 \end{aligned} \tag{1.1}$$

A cada una de las iteraciones que realiza el bucle exterior se les denomina épocas o *epoch*, que consiste en realizar el proceso de entrenamiento sobre todo el conjunto de datos. En este caso se está suponiendo que

Figura 1.4: Valores de $x \oplus y$ en \mathbb{R}^2 **Algoritmo 1.1:** Regla de aprendizaje del perceptrón

```

Datos:  $X, t$ 
Resultado:  $w, b$ 
 $b \leftarrow 0$ 
 $w \leftarrow \text{random}$ 
 $k \leftarrow 0$ 
repetir
     $acabar \leftarrow \text{true}$ 
    para  $i \leftarrow k$  hasta  $k + n - 1$  hacer
         $e(i) \leftarrow t(i) - a(i)$ 
         $w(i+1) \leftarrow w(i) + e(i)x(i)$  (mód  $n$ )
         $b(i+1) \leftarrow b(i) + e(i)$ 
         $acabar \leftarrow acabar \wedge e(i) == 0$ 
    fin
     $k \leftarrow k + n - 1$ 
mientras  $\neg$ acabar

```

no va a recibir casos que no sean linealmente separables, pero de lo contrario se puede añadir un contador `max_epochs` y fijar un número máximo para no caer en un bucle infinito. No sería tarea fácil determinar dicho valor, pues aunque el algoritmo converge en los casos previamente explicados, no en todos lo hace de manera rápida.

La ejecución del Algoritmo 1.1 para el caso de la Figura 1.2 finaliza tras dos épocas, donde en la primera de ellas va ajustando los pesos y el sesgo de manera adecuada, y en la segunda verifica que todas las observaciones han sido clasificadas de manera correcta. La frontera de decisión obtenida es la recta $r : 2x - 2 = 0$, que es una recta vertical. Una observación a realizar es que $x(1) \in r$, por tanto ¿a qué clase pertenece? Esto depende de la función de activación empleada, al utilizar \mathcal{U} la clasificación es correcta, pero al cambiarla por otra, podría no serlo y necesitaría de más épocas para realizar correctamente la clasificación.

La última cuestión que queda por tratar respecto al perceptrón es el porqué se verifica que en el caso de que los puntos dados sean linealmente separables, en un número finito de pasos, el Algoritmo 1.1 terminará su ejecución y con el w óptimo, tal y como se enunciaba en el Teorema de Convergencia del Perceptrón. A continuación se presenta su demostración basándose en la que se encuentra en [4], de forma más clara y simple. Para comenzar con la demostración será necesario definir una serie de elementos, comenzando por $\Omega(k)$ y $z(k)$.

$$\Omega(k) = \begin{pmatrix} \mathbf{w}(k) \\ b(k) \end{pmatrix} \quad \mathbf{z}(k) = \begin{pmatrix} \mathbf{x}(k) \\ 1 \end{pmatrix} \quad \Omega(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

Con estos elementos y el cálculo de $a(k)$ en la Ecuación (1.1) es fácil ver que $n(k) = \Omega^T(k)\mathbf{z}(k)$. Recorriendo los posibles valores de $t(k)$, se deseaba que si dicho valor era 1, entonces $n(k) \geq 0$; y en caso de que valiese 0 entonces se deseaba tener $n(k) < 0$, en resumen, que $t(k) - a(k) = 0$. Otra forma de ver esto es afirmar que en el caso en que $t(k) \neq a(k)$, entonces $\Omega(k)$ debe actualizarse de acuerdo a la Ecuación (1.1). De esta forma $\Omega(k+1) = \Omega(k) + e(k)\mathbf{z}(k)$. Ahora se considerará un vector Ω^* de forma que

$$\forall k \exists \Omega^* \quad \mathcal{U}\left(\Omega^{*T} \mathbf{z}(k)\right) = t(k),$$

es decir, Ω^* es el vector de pesos óptimo. Además, por comodidad se normalizarán todas las distancias del problema, de manera que $\|\Omega^*\| = 1$ y $\|\mathbf{z}(k)\| \leq 1$. El último elemento a considerar será δ , que será definido como

$$\delta = \min \left\{ \Omega^{*T} \mathbf{z}(i) \right\},$$

tomando además que $\delta > 0$ pues otra manera de definirlo es la distancia al punto más cercano a la frontera de decisión óptima. Con estos elementos se puede comenzar la demostración. Como la regla de actualización es $\Omega(k+1) = \Omega(k) + e(k)\mathbf{z}(k)$, al vector de pesos en un determinado instante (clasificación fallida) se le suma o resta $\mathbf{z}(k)$ y a priori no se sabe cuántas veces se va a repetir esto, por lo que la idea de la demostración será ver si la norma del vector de pesos tiene una cota superior e inferior, es decir, se para de sumar o restar otros vectores $\mathbf{z}(i)$, de manera que el algoritmo terminaría. Para obtener esto basta con comparar el comportamiento de $\Omega^T(k)\Omega^*$ frente a $\Omega^T(k)\Omega(k)$ (es decir, $\|\Omega\|^2$).

Con el primero de los términos, al tratar de corregir un error se verifica que

$$\Omega^T(k+1)\Omega^* = (\Omega(k) + e(k)\mathbf{z}(k))^T \Omega^* = \Omega^T(k)\Omega^* + e(k)\Omega^{*T} \mathbf{z}(k).$$

Además, por la manera en la que se ha definido δ , el segundo sumando pertenece al intervalo $(-\infty, -\delta] \cup [\delta, \infty)$, pudiendo deducir la siguiente desigualdad, por lo que en una actualización el término sólo varía por lo menos en δ unidades.

$$\Omega^T(k+1)\Omega^* \geq \Omega^T(k)\Omega^* + \delta \tag{1.2}$$

De la misma manera que se ha analizado el comportamiento de $\Omega^T(k)\Omega^*$ se procede con la actualización de $\Omega^T(k)\Omega(k)$.

$$\begin{aligned} \Omega^T(k+1)\Omega(k+1) &= (\Omega(k) + e(k)\mathbf{z}(k))^T (\Omega(k) + e(k)\mathbf{z}(k)) \\ &= \Omega^T(k)\Omega(k) + (e(k)\mathbf{z}(k))^2 + 2e(k)\Omega^T(k)\mathbf{z}(k) \\ &= \Omega^T(k)\Omega(k) + e^2(k)\mathbf{z}^T(k)\mathbf{z}(k) + 2e(k)\Omega^T(k)\mathbf{z}(k) \\ &= \Omega^T(k)\Omega(k) + e^2(k)\mathbf{z}^T(k)\mathbf{z}(k) + 2e(k)n(k) \end{aligned}$$

En el segundo sumando se tiene que siempre será menor o igual que 1, pues por definición $0 \leq \mathbf{z}^T(k)\mathbf{z}(k) = \|\mathbf{z}(k)\|^2 \leq 1$. Además, el tercer sumando siempre será cero o negativo, pues en todos los casos posibles en los que $e(k) \neq 0$ se cumple que $e(k)n(k) < 0$:

- Si $t(k) = 1 \wedge n(k) < 0$, entonces $a(k) = 0 \wedge e(k) > 0$
- Si $t(k) = 0 \wedge n(k) \geq 0$, entonces $a(k) = 1 \wedge e(k) < 0$

De esta situación se puede deducir la siguiente desigualdad, por lo que en una actualización el término sólo varía en como máximo una unidad.

$$\Omega^T(k+1)\Omega(k+1) \leq \Omega^T(k)\Omega(k) + 1 \quad (1.3)$$

Una vez se ha observado cómo varían estos términos al actualizarlos, se puede observar qué pasaría con ellos al hacer m actualizaciones. Con el resultado obtenido en las Ecuaciones (1.2) y (1.3) se pueden deducir las desigualdades $\delta m \leq \Omega^T(m)\Omega^*$ y $\Omega^T(m)\Omega(m) \leq m$.

Ahora al aplicar la desigualdad de Cauchy–Schwarz¹, el valor de $\|\Omega^*\|$, y la propiedad transitiva, se obtiene una cota superior y otra inferior (ambas recuadradas) para $\|\Omega^T(m)\|$, lo que demuestra que el número de actualizaciones es finito y que por tanto el algoritmo converge.

$$\begin{aligned} \boxed{\delta m} &\leq \Omega^T(m)\Omega^* = \|\Omega^T(m)\Omega^*\| \\ &\leq \|\Omega^T(m)\| \|\Omega^*\| = \|\Omega^T(m)\| = \sqrt{\Omega^T(m)\Omega(m)} \\ &\leq \boxed{\sqrt{m}} \end{aligned}$$

$$\delta m \leq \|\Omega(m)\| \leq \sqrt{m} \implies m \leq \frac{1}{\delta^2} \quad \square$$

Esta última desigualdad muestra cómo existe una relación entre el número de iteraciones del algoritmo y la distancia de los datos de entrenamiento a la frontera de decisión óptima (depende únicamente de esto). Cuanto más cerca estén, mayor será el número de iteraciones necesarias.

1.4. Redes neuronales artificiales

El descubrimiento del perceptrón junto con el teorema que garantizaba que cualquier conjunto de puntos linealmente separable podría ser aprendido mediante este, supuso un gran avance en la IA al igual que una gran desilusión por parte de muchos al no poder aprender una función tan simple como la XOR. Esto causó el llamado el primer invierno de la IA, que finalizó con la llegada de las redes neuronales multicapa y el algoritmo de la retropropagación.

En 1989, George Cybenko enunció y consiguió demostrar el Teorema de Aproximación Universal [5]. Este afirma que dada una red neuronal con una capa de entrada, una capa oculta con suficientes neuronas, y una capa de salida; es un aproximador universal de funciones. Es decir, si existe una relación entre dos variables \mathbf{x} e \mathbf{y} , entonces una red neuronal con la arquitectura mencionada y el entrenamiento adecuado, encontrará dicha relación y podrá comportarse como una función f tal que $\mathbf{y} = f(\mathbf{x})$. Este se considera un gran resultado, pues consigue acabar con las limitaciones del perceptrón que habían generado un declinamiento por el interés en la IA.

En la Figura 1.5 se muestra un diagrama que resume la arquitectura de una red neuronal multicapa. Todas las salidas de una capa están conectadas con todas las entradas de la siguiente con un peso y un *bias*. En el diagrama de la Figura 1.6 se puede observar esto en mayor detalle. Estas pueden ser utilizadas en problemas de clasificación o regresión supervisada, pero en una primera aproximación se supondrá que se está resolviendo un problema de regresión.

Al igual que un perceptrón quedaba representado mediante un vector \mathbf{w} de pesos y un valor de sesgo b , para representar una red neuronal multicapa se hace mediante las matrices $W^{(m)}$ y los vectores $\mathbf{b}^{(m)}$ y $\mathbf{f}^{(m)}$, que contienen los pesos, los sesgos, y las funciones de activación. La notación para los sesgos es $b_i^{(m)}$, que representa el sesgo de la entrada i -ésima de la capa m . De igual manera $f_i^{(m)}$ representa la función de

¹ Esta desigualdad afirma que $\|\mathbf{u}\mathbf{v}\| \leq \|\mathbf{u}\| \|\mathbf{v}\|$.

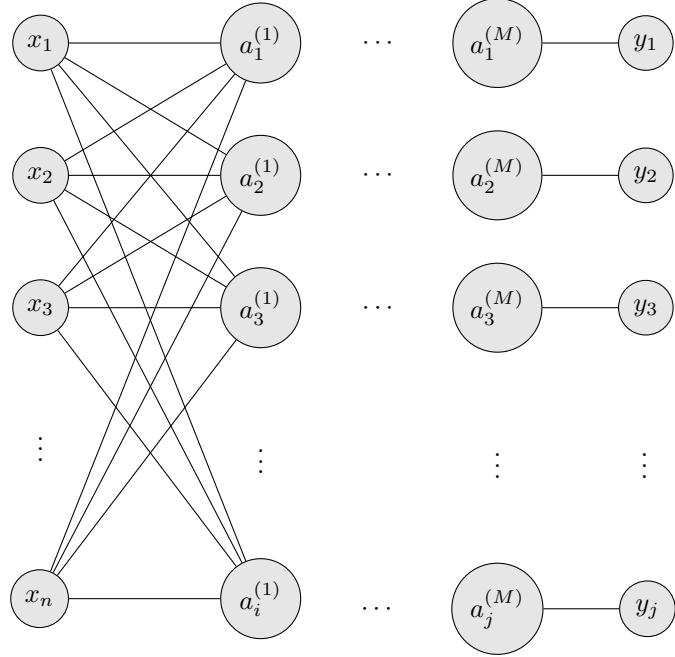


Figura 1.5: Arquitectura de una red neuronal multicapa

activación la neurona i -ésima de la capa m . Para los pesos, $w_{ij}^{(m)}$ denota el peso que une la salida j con la entrada i de la capa m . Para las capas, $1 \leq m < M$. En ningún momento un exponente entre paréntesis representa una potencia, en dicho caso aparecerá sin paréntesis para distinguirlo. Siguiendo los mismos pasos que con el perceptrón, la primera pregunta será cómo calcular la salida de una red neuronal. La salida de una capa se calcula con la Ecuación (1.4), teniendo en cuenta que $\mathbf{x}^{(m)} = \mathbf{y}^{(m-1)}$, por lo que para calcular la salida de la red no hay más que aplicar dicha ecuación hasta llegar a la última capa.

$$\begin{aligned} \mathbf{a}^{(m)}(k) &= \mathbf{f}^{(m)} \left(W^{(m)}(k) \mathbf{x}^{(m)}(k) + \mathbf{b}^{(m)}(k) \right) \\ \begin{pmatrix} a_1^{(m)}(k) \\ a_2^{(m)}(k) \\ \vdots \\ a_j^{(m)}(k) \end{pmatrix} &= \mathbf{f}^{(m)} \left(\begin{pmatrix} w_{11}^{(m)}(k) & w_{12}^{(m)}(k) & \cdots & w_{1i}^{(m)}(k) \\ w_{21}^{(m)}(k) & w_{22}^{(m)}(k) & \cdots & w_{2i}^{(m)}(k) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{j1}^{(m)}(k) & w_{j2}^{(m)}(k) & \cdots & w_{ji}^{(m)}(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1^{(m)}(k) \\ x_2^{(m)}(k) \\ \vdots \\ x_i^{(m)}(k) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_1^{(m)}(k) \\ b_2^{(m)}(k) \\ \vdots \\ b_j^{(m)}(k) \end{pmatrix} \right) \end{aligned} \quad (1.4)$$

A continuación, se puede plantear cuál es la ecuación del error para una red neuronal. Esta es simplemente cuestión de elección al igual que las funciones de activación. Al trabajar con redes neuronales para problemas de regresión, la función de error por excelencia es el error cuadrático, definido como

$$L(k) = \sum (\mathbf{t}(k) - \mathbf{a}^{(M)}(k))^2,$$

aunque existen otras muchas, cada una adecuada a cada tipo de problema y modelo, como por ejemplo el error cuadrático medio, error absoluto, error absoluto medio, error logarítmico, error exponencial, entropía cruzada, etc [6].

La pregunta ahora sería que, al igual que existía una ecuación para actualizar los parámetros del perceptrón, ¿existe para una red neuronal? Para deducirla fácilmente, basta en pensar que L es una función que depende de los parámetros de la red y que se quiere que su valor sea lo más pequeño posible para diferentes vectores de entrada, es decir, encontrar los valores de los parámetros que minimizan L . Esto es un problema clásico de cálculo que en el caso de una variable se resuelve igualando a cero la derivada de la función, y en el caso de varias, mediante la matriz Hessiana. Sin embargo, dichos métodos para una función de tantas

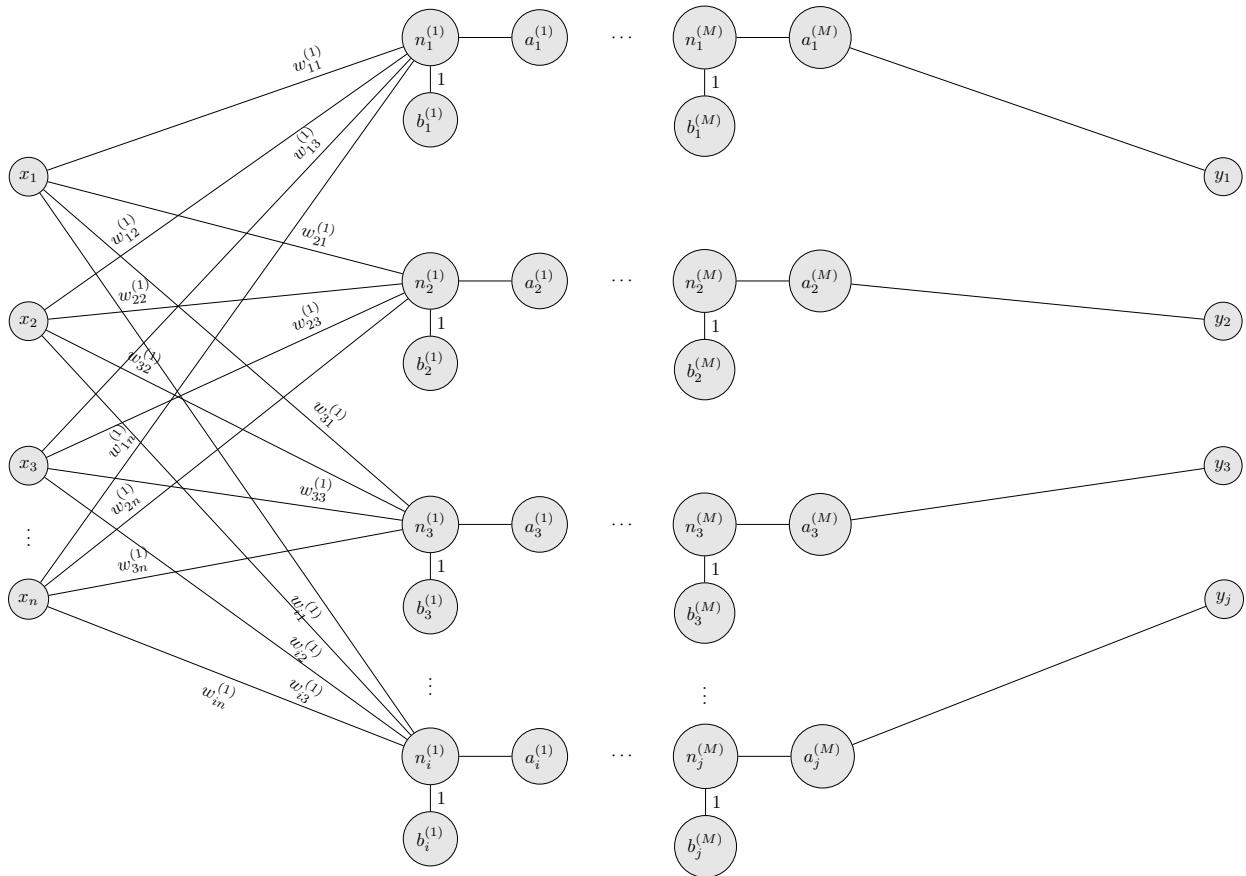


Figura 1.6: Red neuronal multicapa

variables y con expresiones complejas, no son muy eficientes.

Esto se soluciona con ayuda de un algoritmo conocido como descenso por gradiente [7]. Este algoritmo calcula de manera iterativa una aproximación de los mínimos de una función con ayuda del vector gradiente de una función. El vector gradiente de una función f se define como

$$\nabla f(x_1, x_2, \dots, x_n) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right),$$

e indica la dirección en la que la función crece más rápido, siendo la idea principal del algoritmo ir moviéndose en dirección contraria a este.

Algoritmo 1.2: Descenso por gradiente

Datos: f, α, k
Resultado: $\mathbf{x}(k)$
 $\mathbf{x}(0) \leftarrow \text{random}$
para $i \leftarrow 1$ **hasta** k **hacer**
 | $\mathbf{x}(i+1) = \mathbf{x}(i) - \alpha \nabla f(\mathbf{x}(i))$
fin

Como se observa en el Algoritmo 1.2, se comienza en un punto aleatorio, lo que puede variar la calidad de la solución dependiendo de la ejecución, y además se introduce un término α llamado tasa de aprendizaje. Pueden existir casos en los que la magnitud del gradiente sea muy grande, lo que resulta en desplazamientos bruscos y una convergencia más lenta, tal y como se refleja en la Figura 1.7. Si se hubiese fijado un valor máximo de $k = 25$, en los casos de las Figuras 1.7b y 1.7c, no se hubiese llegado a una buena aproximación del mínimo por haber elegido un α inadecuado.

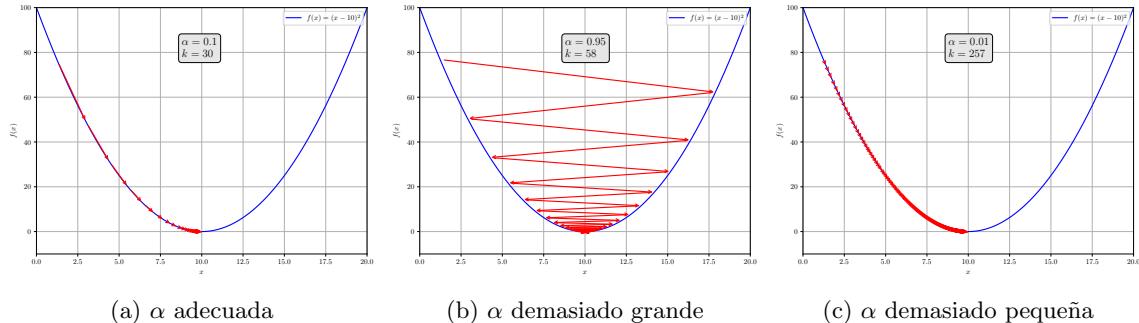


Figura 1.7: Descenso por gradiente

Con esta idea de la función de error y el descenso por gradiente, aparece el famoso algoritmo de la retropropagación o *backpropagation*. Es muy similar al algoritmo de aprendizaje del perceptrón pero adaptado a la estructura de una red neuronal. El primer paso consiste en dada una entrada, calcular la salida de la red con ayuda de la Ecuación (1.4). El segundo paso es calcular el error $L(k)$. Esta función depende de todos los pesos y sesgos de la red, por lo que el tercer paso será modificar estos de acuerdo a ∇L y repetir el procedimiento para el resto de observaciones. Se realizan tantas épocas como sean necesarias.

El problema que queda por resolver es cómo calcular todos los elementos de ∇L , pues por ejemplo es fácil calcular $\frac{\partial L}{\partial a_i^{(M)}}$, pero no parece tan obvio calcular $\frac{\partial L}{\partial w_{ij}^{(m)}}$, pues hay que retroceder $M - m$ capas, y habrá muchos valores que dependan de ese peso. La solución a esto es la regla de la cadena.

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial u_{i1}} \frac{\partial u_{im}}{\partial x} \prod_{j=1}^{m-1} \frac{\partial u_{ij}}{\partial u_{ij+1}}$$

Con ayuda de esta regla se pueden calcular fácilmente los términos no triviales del gradiente, propagando el error hacia atrás por la red hasta llegar al parámetro deseado mediante las sensibilidades $(\delta_i^{(s)})$ [4]. De aquí se intuye el porqué del nombre del algoritmo. De manera informal, lo que hace el algoritmo es castigar a cada neurona de manera proporcional a su participación en el error final.

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial L}{\partial b_i^{(s)}} &= \frac{\partial L}{\partial a_i^{(s)}} \frac{\partial a_i^{(s)}}{\partial n_i^{(s)}} \frac{\partial n_i^{(s)}}{\partial b_i^{(s)}} = \delta_i^{(s)} \\
 \frac{\partial L}{\partial w_{ij}^{(s)}} &= \frac{\partial L}{\partial a_i^{(s)}} \frac{\partial a_i^{(s)}}{\partial n_i^{(s)}} \frac{\partial n_i^{(s)}}{\partial w_{ij}^{(s)}} = \delta_i^{(s)} \frac{\partial n_i^{(s)}}{\partial w_{ij}^{(s)}} = \delta_i^{(s)} a_j^{(s-1)} \\
 \delta_i^{(M)} &= \frac{\partial L}{\partial a_i^{(M)}} \frac{\partial a_i^{(M)}}{\partial n_i^{(M)}} = -2a_i^{(M)} \frac{\partial a_i^{(M)}}{\partial n_i^{(M)}} = -2a_i^{(M)} \frac{\partial f_i^{(M)}}{\partial n_i^{(M)}} \\
 \delta_i^{(m)} &= \frac{\partial L}{\partial n_i^{(m)}} = \sum_{l=1}^p \frac{\partial L}{\partial n_l^{(m+1)}} \frac{\partial n_l^{(m+1)}}{\partial n_i^{(m)}} = \sum_{l=1}^p \delta_l^{(m+1)} \frac{\partial n_l^{(m+1)}}{\partial n_i^{(m)}} = \sum_{l=1}^p \delta_l^{(m+1)} w_{li}^{(m+1)} \frac{\partial f_i^{(m)}}{\partial n_i^{(m)}}
 \end{aligned}$$

con $0 < m < M$ y $0 < s \leq M$

Estas ecuaciones pueden reescribirse de manera matricial para aligerar la notación, que combinándolas con las ideas explicadas referentes al Algoritmo 1.2, da lugar al Algoritmo 1.3, bastante similar al Algoritmo 1.1 pero adaptado a una red neuronal.

Algoritmo 1.3: Retropropagación (*backpropagation*)

Datos: $\mathbf{f}^{(s)}, \mathbf{x}^{(1)}(k), \mathbf{t}(k), \varepsilon$
Resultado: $W^{(s)}, \mathbf{b}^{(s)}$

```

para  $i \leftarrow 1$  hasta  $\varepsilon$  hacer
    para cada  $\mathbf{x}^{(1)}$  hacer
        calcular  $\mathbf{a}^{(M)}(k)$ 
        calcular  $L(k)$  y  $\nabla L(k)$ 
         $\delta^{(M)}(k) \leftarrow -2 \frac{\partial \mathbf{f}^{(M)}}{\partial \mathbf{n}^{(M)}} (\mathbf{t}(k) - \mathbf{a}^{(M)}(k))$ 
         $\delta^{(m)}(k) \leftarrow \frac{\partial \mathbf{f}^{(M)}}{\partial \mathbf{n}^{(M)}} W^{(m+1)^T}(k) \delta^{(m+1)}(k)$ 
         $W^{(m)}(k+1) \leftarrow W^{(m)}(k) - \alpha \delta^{(m)}(k) (\mathbf{a}^{(m-1)}(k))^T$ 
         $\mathbf{b}^{(m)}(k+1) \leftarrow \mathbf{b}^{(m)}(k) - \alpha \delta^{(m)}(k)$ 
    fin
fin

```

En esta variante del algoritmo denominada SGD (Stochastic Gradient Descent) se actualizan los parámetros por cada observación del *dataset* y se ha decidido elegir como criterio de parada alcanzar un número de épocas, aunque también se suelen tomar otros criterios, como la magnitud del error. Además, esta variante es computacionalmente costosa, pues para cada observación se calcula el gradiente. Otra variante del algoritmo es el batch. Esta no actualiza por cada observación como SGD, halla el gradiente del error promedio de todas las observaciones del *dataset*. No es recomendable, pues es muy costosa y si el *dataset* ocupa mucho, puede no caber en memoria. Ambas aproximaciones se pueden combinar para dar lugar a una variante más eficiente que estas dos, denominada mini-batch, que realiza lo mismo que *batch* pero dividiendo el *dataset* en *minibatches* y realizando una actualización de los parámetros por cada uno de ellos. De esta manera no se necesita tener todo el *dataset* en memoria [7].

1.4.1. Funciones de activación

Durante el estudio del perceptrón, se muestra cómo se emplea la función de Heaviside como función de activación en la neurona. Esto se debe a que se busca una función que independientemente de los valores de entrada que reciba, produzca una salida binaria. En ciertos casos, no se deseará una salida binaria pues el problema no tendría porqué ser de clasificación, como se ha visto con las redes neuronales. Además, como se ha visto en el Algoritmo 1.3, será imprescindible poder calcular la derivada de estas funciones. Por estos motivos, se presentan las funciones de activación más conocidas e importantes [8], [9].

- **Función lineal**

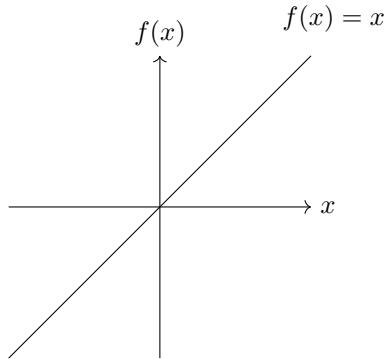


Figura 1.8: Función lineal

Con motivo de emplear una función que no produzca valores binarios, se pueden tomar funciones lineales $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ de la forma $f(x) = ax$. No es muy útil al trabajar con tareas complejas, solo es capaz de cumplir con su tarea en problemas sencillos, y esto en parte se debe a la expresión de su derivada. Al ser un polinomio, es continua y derivable en todo \mathbb{R} , teniendo que

$$\frac{df}{dx} = a.$$

- **Función logística**

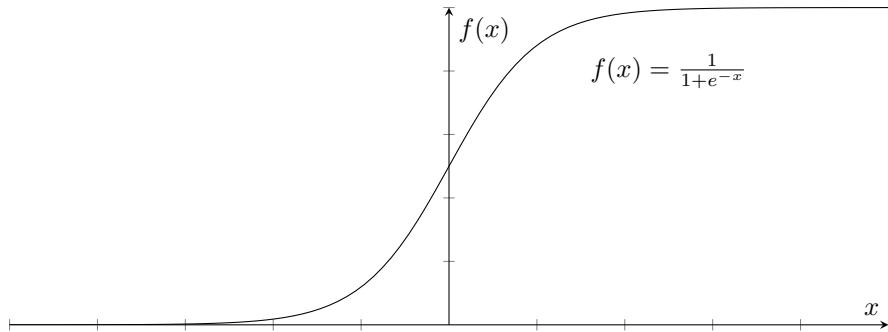


Figura 1.9: Función logística

Esta también es una función que no devuelve valores binarios, es conocida como función sigmoide por la forma de S que tiene, y es una función $f : \mathbb{R} \rightarrow (0, 1)$. Una propiedad que es muy útil es que es solución de la ecuación diferencial

$$\frac{df}{dx} = f(x)(1 - f(x)).$$

Es un intento de mejora de la función de activación empleada en el perceptrón, pues una ligera variación en la entrada puede crear un gran cambio en la salida. Esta función evita que eso suceda, pues una pequeña variación en la entrada produce una variación pequeña en la salida.

■ **Tangente hiperbólica**

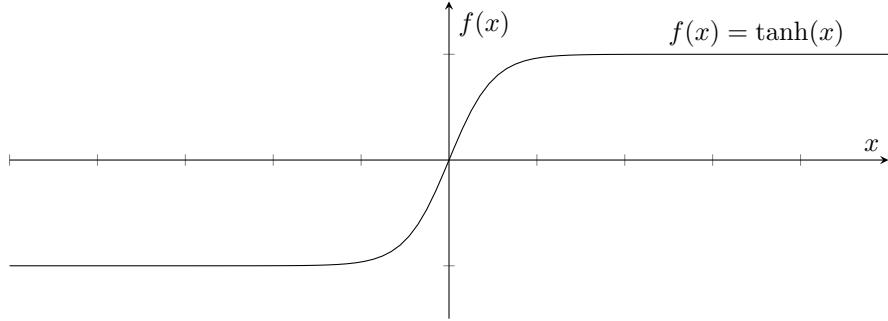


Figura 1.10: Tangente hiperbólica

De nuevo, esta función no devuelve valores binarios, y que guarda cierta relación con la logística, pues esta tiene también forma de sigmoide, pero a diferencia que la logística, esta verifica que $f(-x) = -f(x)$ por lo que es preferible sobre esta, y también hace que al usarla en redes neuronales su entrenamiento converja más rápido. Además $f : \mathbb{R} \rightarrow (-1, 1)$ y su expresión es

$$f(x) = \tanh(x) = \frac{\sinh(x)}{\cosh(x)} = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}},$$

y verifica una segunda propiedad muy útil, es solución de la ecuación diferencial

$$\frac{df}{dx} = 1 - f^2(x).$$

■ **Función ReLU**

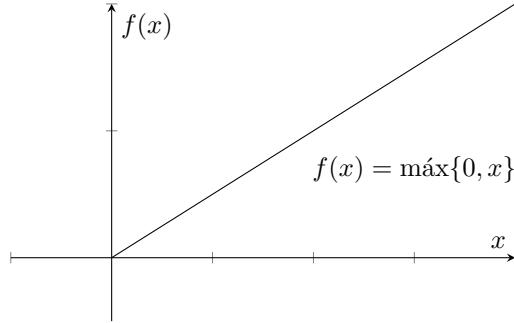


Figura 1.11: Función ReLU

La función ReLU (Rectified Linear Unit) es una de las más populares al trabajar con redes neuronales, pues a pesar de que no es derivable en $x = 0$ (normalmente se soluciona tomando $f'(0) = 1$), soluciona un serio problema que causan las funciones logística y tangente hiperbólica durante el entrenamiento de una red neuronal. Este problema es conocido como *vanishing gradient* y de forma resumida consiste en que cuando la derivada de una función de activación es muy próxima a cero, relentiza enormemente el proceso de aprendizaje, pues si se observa con detalle cómo se calculan las actualizaciones de los pesos y sesgos en el Algoritmo 1.3, si los términos $\delta^{(s)}$ tienden a cero, la diferencia entre los parámetros de una iteración a otra tiende a cero, necesitando una cantidad enorme de iteraciones. Como se observa a continuación, la función ReLU soluciona este problema. Además, la derivada es mucho más sencilla de calcular.

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{d}{dx} \frac{1}{1 + e^{-x}} = 0 \quad \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{d}{dx} \tanh(x) = 0 \quad \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{d}{dx} \text{ReLU}(x) = 1$$

Si bien soluciona este problema mencionado para valores de $x > 0$, genera el mismo problema para valores negativos. Para solucionar este problema se suelen tomar variantes de la función ReLU conocidas como LReLU, PReLU, o ELU; que modifican su expresión para valores de $x \leq 0$ como funciones lineales o exponenciales.

■ Función softmax

Al abordar un problema de regresión con una red neuronal, puede entenderse como encontrar una función $\mathbf{f} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, sin embargo, al utilizar redes neuronales para un problema de clasificación, lo que se necesita es una función $\mathbf{f} : \mathbb{R}^n \rightarrow [0, 1]^m$, es decir, se quiere obtener como respuesta el nombre de la clase a la que pertenece la entrada. La solución a este problema es introducir la función softmax en la capa de salida de la red.

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \frac{e^{\mathbf{x}_i}}{\sum_{j=1}^k e^{\mathbf{x}_j}}$$

Esta función verifica que $\sum_{p=1}^q \mathbf{f}_p(\mathbf{x}) = 1$, es decir, en la capa de salida de la red se obtiene la probabilidad de que una muestra presentada a la red pertenezca a una determinada clase. A dicha muestra se le asigna la clase que mayor probabilidad tiene. En este caso, no debe hablarse de su derivada sino de su matriz Jacobiana donde aparecerán las derivadas que puedan necesitarse durante *Backpropagation*, siendo de la forma

$$\frac{\partial \mathbf{f}_i(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}_j} = \mathbf{f}_i(\mathbf{x})(\delta_{ij} - \mathbf{f}_j(\mathbf{x})),$$

donde δ_{ij} es la función Delta de Kronecker.

1.5. Redes neuronales convolucionales

Una vez explicado cómo funciona una red neuronal y cómo puede usarse para problemas de regresión y clasificación, es interesante poder aplicar estas tareas sobre imágenes en vez de sobre conjuntos de datos numéricos. Una imagen de $n \times m$ píxeles en escala de grises puede entenderse como una matriz de $n \times m$ elementos, sin embargo, suelen utilizarse imágenes a color y esto se puede conseguir utilizando tres canales, rojo, azul, y verde. De esta forma, una imagen se representa como tres matrices. Formalmente, una imagen se representa como un tensor, que puede entenderse como un vector de matrices, o una estructura que indexa elementos mediante una tupla (i, j, k) .

De manera ingenua, una primera aproximación para clasificar imágenes en función de objetos que aparecen en estas, podría ser linealizar este tensor y pasarlo como vector de entrada a un red neuronal multicapa, obteniendo un vector de salida que indique a qué clase pertenece la imagen. Esto, además de que no da resultados positivos pues si se mueve o varía de tamaño el objeto a reconocer, la red ya no lo entendería igual al haber aprendido los valores de cada píxel concreto en cada caso; computacionalmente es muy complicado de abarcar. Suponiendo que se tiene una imagen RGB (Red Green Blue) cuadrada de $n \times n$ píxeles, y que la primera capa oculta tuviera m neuronas, el número de parámetros de esta capa sería $m(3n^2 + 1)$. Suponiendo imágenes de baja calidad, por ejemplo 64×64 píxeles, y que el número de neuronas de la primera capa fuese 5, el número de parámetros es de 61445. Ajustar adecuadamente esa cantidad de parámetros muy costoso, y además daría resultados muy pobres en el caso de encontrar los parámetros adecuados. Se necesita simplificar la magnitud del problema y enseñar a la red a ver y entender, no solo aprender valores de píxeles.

La forma de trabajar con imágenes y redes neuronales consiste en “resumir” las diferentes regiones de la imagen pasando como entrada de la red neuronal aquellas características destacables, es decir, un vector o mapa de características propias de la imagen. Un ejemplo de estos se muestra en la Figura 1.12. Esto se puede lograr mediante las operaciones de convolución y correlación cruzada.

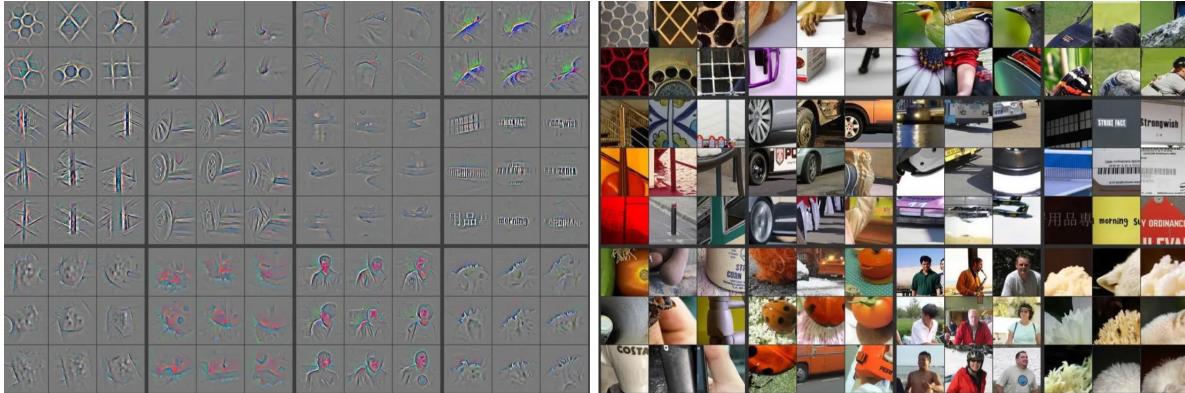


Figura 1.12: Imágenes y sus mapas de características [10]

Una de las operaciones matemáticas más conocidas y que es más usada al trabajar con señales e imágenes es la llamada convolución, denotada por $*$, y dadas las funciones $f(t)$ y $g(t)$, su convolución se define de la siguiente manera.

$$(f * g)(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau)g(t - \tau) d\tau$$

En este caso se está asumiendo que el dominio de $f(\tau)g(t - \tau)$ es \mathbb{R} , lo que permite integrar sobre todo \mathbb{R} , de lo contrario, se modifica la definición para integrar solo sobre un intervalo $[a, b]$. En general, esta operación crea una nueva función a partir de otras dos, que indica cómo interactúan entre sí, y que permite aplicar filtros a señales e imágenes. Como se acaba de comentar para el caso de las imágenes, se puede tratar con señales que no dependan únicamente de una variable, pues estas se representan como una función de dos variables $f(u, v)$. En este caso, la convolución queda definida de la siguiente manera.

$$(f * g)(u, v) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi, \eta)g(u - \xi, v - \eta) d\xi d\eta$$

Si bien en las definiciones previas se ha tomado la integral y tanto \mathbb{R} como \mathbb{R}^2 como dominios continuos sobre los que calcular la convolución, no se debe olvidar que las imágenes no dejan de ser matrices o funciones de dos variables con un dominio discreto, por lo que se debe presentar una definición adecuada a este caso [11].

$$(f * g)(u, v) = \sum_{i=-k}^k \sum_{j=-k}^k g(i, j)f(u - i, v - j)$$

En la expresión anterior, a la función $g(u, v)$ se le llama filtro o *kernel* de convolución. A continuación se muestra un ejemplo de cómo calcular una convolución.

$$\begin{array}{c}
 \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 5 & 6 & 7 & 8 & 9 \\ 9 & 8 & 7 & 6 & 5 \\ 5 & 4 & 3 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 14 & 15 & 16 \\ 16 & 15 & 14 \\ 16 & 15 & 14 \end{pmatrix} \\
 1 \cdot 1 + 2 \cdot 0 + 3 \cdot 0 + 5 \cdot 0 + 6 \cdot 1 + 7 \cdot 0 + 9 \cdot 0 + 8 \cdot 0 + 7 \cdot 1 = 14 \\
 2 \cdot 1 + 3 \cdot 0 + 4 \cdot 0 + 6 \cdot 0 + 7 \cdot 1 + 8 \cdot 0 + 8 \cdot 0 + 7 \cdot 0 + 6 \cdot 1 = 15 \\
 \vdots \\
 7 \cdot 1 + 6 \cdot 0 + 5 \cdot 0 + 3 \cdot 0 + 2 \cdot 1 + 1 \cdot 0 + 3 \cdot 0 + 4 \cdot 0 + 5 \cdot 1 = 14
 \end{array}$$

Aplicando diferentes kernels de convolución a una imagen se pueden extraer diferentes tipos de características de una imagen, como por ejemplo bordes. El filtro Sobel es capaz de hacer esto con los kernels que se muestran a continuación, pues se comportan como aproximaciones de las derivadas parciales de la imagen en un punto teniendo en cuenta los píxeles cercanos [12].

$$G_u = \frac{\partial f(u, v)}{\partial u} \approx \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 \\ -2 & 0 & 2 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad G_v = \frac{\partial f(u, v)}{\partial v} \approx \begin{pmatrix} -1 & -2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \end{pmatrix}$$

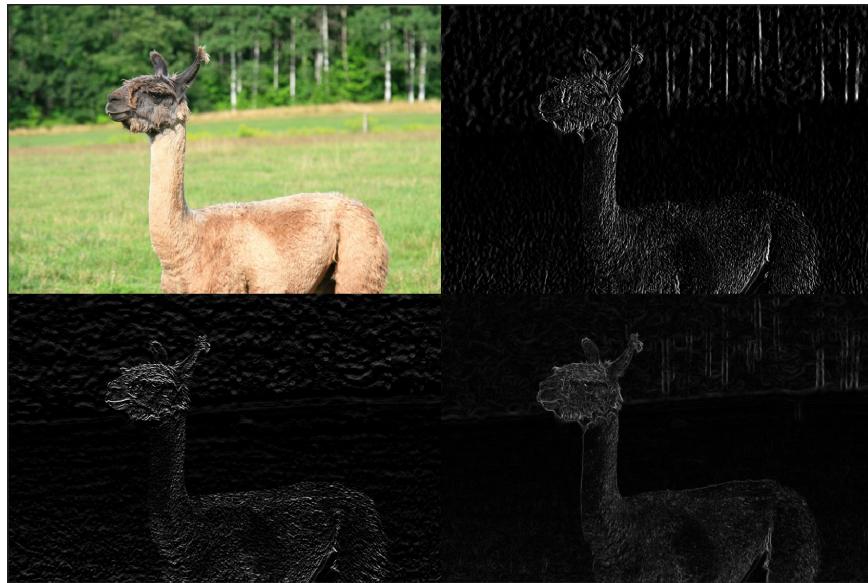


Figura 1.13: Detección de bordes aplicando los kernel Sobel

A continuación se va a calcular la convolución de la matriz del ejemplo anterior con G_u . Al realizar los cálculos como se ha mostrado en el ejemplo anterior, se obtiene como resultado la matriz A , mientras que al utilizar Python se obtiene la matriz B , los resultados no concuerdan. ¿Qué acaba de suceder?

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 4 & 4 \\ -4 & -4 & -4 \\ -4 & -4 & -4 \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} -4 & -4 & -4 \\ 4 & 4 & 4 \\ 4 & 4 & 4 \end{pmatrix}$$

La respuesta a estas preguntas se podría resumir en que se ha realizado una “pequeña trampa” a la hora de explicar cómo calcular la convolución manualmente en el ejemplo, ya que no se ha aplicado correctamente la definición dada. ¿Qué sentido tiene hacer esto? En visión artificial y tratamiento de imágenes, muchos autores

y librerías llaman convolución a la operación que se ha mostrado en el primer ejemplo, cuando en realidad no lo es y trae lugar a confusión. Dicha operación se llama correlación cruzada, denotada por (\star) , y que es muy similar a la convolución, pues su principal diferencia es que en la convolución “real”, el kernel se rota 180 grados antes de calcular la convolución “falsa” o correlación cruzada, es decir, $X * Y = X \star (R_{180} \cdot Y)$, donde R_{180} es la matriz de rotación de 180 grados. En el primer ejemplo se ha utilizado de manera intencionada la matriz I_3 para ver los casos que traen lugar a confusión, pues $I_3 \cdot R_{180} = I_3$. La correlación cruzada de dos imágenes (matrices) se define de la siguiente manera [11].

$$(f \star g)(u, v) = \sum_{i=-k}^k \sum_{j=-k}^k g(i, j)f(u + i, v + j)$$

Esta operación sí es con la que realmente se aplican los filtros a las imágenes y con la que se trabaja en general en el campo de la visión artificial. Es importante ver que ahora, al contrario que con la convolución, $f \star g \neq g \star f$. Algunas librerías de visión artificial tratan a la correlación cruzada como convolución debido al frecuente uso que tiene una sobre la otra y la forma similar que tienen de calcularse. Un ejemplo es OpenCV para Python y C++ en la documentación de su función `filter2D`, donde se comenta que aplica una convolución cuando realmente aplica la correlación cruzada [13].

Finalmente, a la hora de realizar estas operaciones, se pueden definir una serie de parámetros según convenga para obtener un tamaño diferente de salida [14]. Estos son *stride* y *padding*. El primero de ellos hace referencia a cada cuántos elementos se desplaza el kernel y se calcula el producto escalar, mientras que el segundo a cómo llenar los bordes de la matriz original para obtener mayor tamaño de salida, habitualmente se colocan ceros en los bordes y se conoce como *zero-padding*. El tamaño de salida se puede calcular como

$$\frac{n - k + 2p}{s} + 1,$$

y algunos valores por defecto para el *padding* son *valid*, *full*, y *same*. Con *valid* no se añade ningún *padding* de manera que el kernel solo se desliza en las zonas donde la matriz de entrada y el kernel coinciden por completo, con *full* se añaden las filas y columnas de ceros necesarias para poder deslizar el kernel por cualquier zona en la que coincidan la matriz y el kernel, y con *same* también se añaden las necesarias como para producir un tamaño de salida igual al de entrada. A partir de ahora, cuando se utilice el parámetro *full*, las operaciones se escribirán como \circledast y \circledast , pues la definición original se entiende como *valid*. En ambos casos se tomará un *stride* de 1.

En general, para poder clasificar imágenes, se utilizan redes convolucionales por el motivo explicado, y para realizar dicha tarea se van concatenando diferentes tipos de capas, encontrándose entre estas las que se muestran a continuación [15]. Combinándolas se crea una red convolucional como por ejemplo, la que se muestra en la Figura 1.14, que se trata de la red VGG-16.

■ Capa de entrada

Esta capa recibe la entrada de la red, normalmente la imagen representada como un tensor, es decir, una matriz por cada canal de la imagen.

■ Capa de convolución

En este tipo de capas es donde reside principalmente el conocimiento de una red convolucional, pues dispone de unos parámetros llamados *kernels* y *bias*, o sesgos. Lo que hace esta capa es calcular la correlación cruzada entre la entrada y el kernel y sumar un sesgo, a pesar de que comúnmente se dice que calcula la convolución, como se ha discutido previamente. El número de salidas de esta capa depende del número de kernels y sesgos que se definan, se puede establecer un símil con el número de neuronas de una capa de una red neuronal. La entrada de la capa, que es un tensor, puede entenderse como una serie de matrices $X_i^{(m)}$, los kernels que serían otros tensores, como otra serie de matrices $K_{ij}^{(m)}$, y los sesgos como las matrices $B_i^{(m)}$, teniendo la siguiente ecuación para la salida de una capa de convolución.

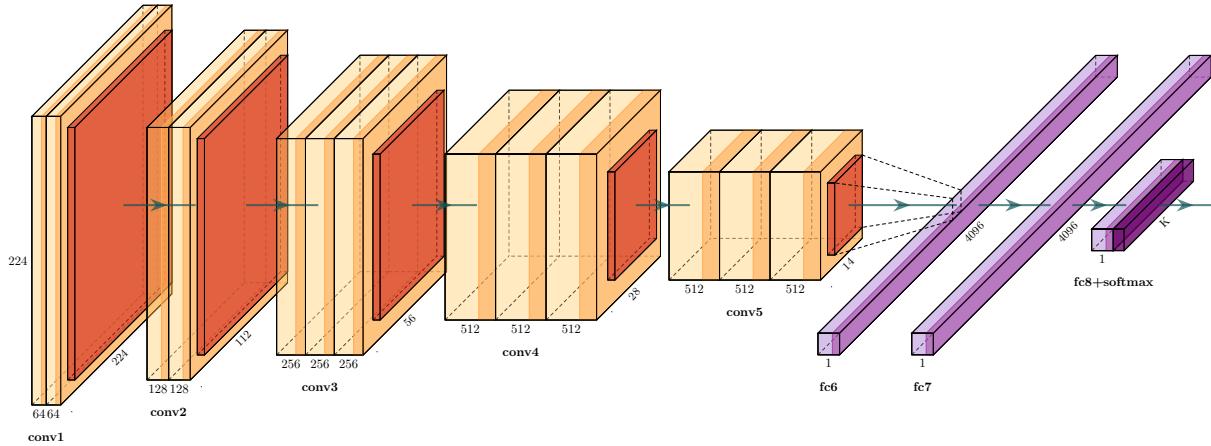


Figura 1.14: Red convolucional VGG-16

$$N_i^{(m)} = B_i^{(m)} + \sum_{j=1}^n X_j^{(m)} \star K_{ij}^{(m)}$$

■ Capa de activación

Al igual que en las redes neuronales clásicas se aplicaba una función de activación a la salida de cada neurona, en las redes convolucionales es habitual hacer esto mismo con las salidas de una capa de convolución y la función ReLU. Se aplica esta a cada elemento del tensor de salida, pudiendo verse como sustituir por ceros aquellos valores negativos producidos por la correlación cruzada.

■ Capa de *pooling* o agrupación

Como previamente se ha mencionado, la ventaja de trabajar con redes convolucionales en vez de con las clásicas, es que estas son capaces de extraer las características importantes de una imagen, “resumiendo” esta antes de comenzar el trabajo de clasificación. Parte de este “resumen” se realiza mediante las capas de *pooling* o agrupación. Se suelen utilizar las funciones maxpooling o avgpooling con kernels de tamaño 2×2 sobre la entrada, reduciendo el tamaño de esta en un 25 %.

$$\text{maxpooling}\{x_1, x_2, \dots, x_n\} = \max\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$$

$$\text{maxpooling} \left(\begin{array}{cc|cc} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 5 & \boxed{6} & 7 & \boxed{8} \\ \hline 9 & 10 & 11 & 12 \\ 13 & \boxed{14} & 15 & \boxed{16} \end{array} \right) = \begin{pmatrix} 6 & 8 \\ 14 & 16 \end{pmatrix}$$

$$\text{avgpooling}\{x_1, x_2, \dots, x_n\} = \frac{x_1 + x_2 + \dots + x_n}{n}$$

$$\text{avgpooling} \left(\begin{array}{cc|cc} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 5 & 6 & 7 & 8 \\ \hline 9 & 10 & 11 & 12 \\ 13 & 14 & 15 & 16 \end{array} \right) = \begin{pmatrix} 3,5 & 5,5 \\ 11,5 & 13,5 \end{pmatrix}$$

■ Capa densa o totalmente conectada

Esta capa se trata de una de las capas de una red neuronal clásica. Recibe los vectores de características una vez han sido simplificados lo suficiente como para que una red clásica pueda trabajar con ellos y encontrar las relaciones entre las características de las imágenes de una misma clase.

■ Capa softmax

Esta capa aplica la función softmax en la salida de la red neuronal para poder ajustar la salida a un problema de clasificación usual, tal y como se ha explicado anteriormente.

Habiendo mostrado ya la arquitectura de una red convolucional con sus correspondientes parámetros (kernels y sesgos) e hiperparámetros (*padding* y *stride*), la pregunta clásica es, ¿cómo obtener los parámetros adecuados? La respuesta de cómo obtenerlos es simple, siendo algo más complicada de responder esta vez la de cuáles son. Al no dejar de ser una red neuronal, para obtener los parámetros de la red se utiliza *Backpropagation* (Algoritmo 1.3) también, añadiendo las siguientes ecuaciones [16] al cálculo del gradiente para las capas de convolución. En este caso también aparece la recursividad mediante las sensibilidades de convolución $\Lambda_i^{(m)}$ hasta llegar a las sensibilidades clásicas $\delta_i^{(m)}$.

$$\begin{aligned}\Lambda_i^{(m)} &= \frac{\partial L}{\partial N_i^{(m)}} \\ \frac{\partial L}{\partial B_i^{(m)}} &= \Lambda_i^{(m)} \\ \frac{\partial L}{\partial K_{ij}^{(m)}} &= X_j^{(m)} \star \Lambda_i^{(m)} \\ \frac{\partial L}{\partial X_j^{(m)}} &= \sum_{i=1}^n \Lambda_i^{(m)} \circledast K_{ij}^{(m)}\end{aligned}$$

En este caso, como se comentaba anteriormente, a pesar de contar con el algoritmo para hallar los parámetros, no es suficiente para entrenar la red y obtener un resultado adecuado. Las redes convolucionales son un modelo de deep learning que necesita cantidades de datos y un poder computacional muy elevado. Para obtener un resultado decente se necesitan muchísimos datos de ejemplo y equipos con muchos recursos, como diferentes GPUs y grandes cantidades de memoria.

1.6. Transformers

Si bien llegado este punto se podría afirmar que se ha conseguido una arquitectura que puede lograr el fin de este proyecto (clasificar imágenes), esta es mejorable en diversas situaciones. Supóngase que se dispone de un gran conjunto de imágenes de animales terrestres, acuáticos, y aéreos; y se necesita un modelo capaz de distinguir animales entre estas tres clases. Tras etiquetar estas imágenes manualmente, encontrar una arquitectura de CNN (Convolutional Neural Network) adecuada, y entrenarla, se obtiene un clasificador capaz de distinguir entre estas tres clases. Tiempo más tarde, surge la necesidad de poder clasificar dentro de estas tres clases, por ejemplo, dentro de los animales acuáticos poder distinguir entre peces de río, ballenas, tiburones, etc. Esto supondría reetiquetar el dataset manualmente, modificar la arquitectura de las capas densas, y volver a entrenar el modelo. Considerando un caso extremo, podría además ser el dataset muy grande y no conocerse el número de especies dentro de cada una de las clases iniciales y querer separar las imágenes por cada una de las especies. Esto no sería posible con una CNN, pues necesitaría tener definidas una serie de clases.

Por otro lado, supóngase que dado un texto que describa una imagen, por ejemplo “*Un pastor alemán corriendo en un bosque*”, se quiere obtener la imagen del dataset que se adapta mejor a esa descripción, o se quiere obtener cómo de similares son dos imágenes del dataset, o se quiere extraer el texto que contiene una imagen, o se quiere comprobar cómo de bien se adapta una descripción de una imagen a esta. Todo este tipo de tareas y similares, serían imposibles de realizar mediante redes convolucionales, ya que no están enfocadas a trabajar con texto, y es aquí donde entran este tipo de modelos llamados transformers. Se presentaron en 2017 en un artículo escrito por investigadores de Google (con un nombre bastante acertado, *Attention is all you need* [17]) como un modelo sustituto de las redes neuronales recurrentes debido al problema que tienen al intentar recordar información de instantes alejados. La idea original era utilizarlos para problemas de NLP (Natural Language Processing), como por ejemplo la traducción de textos, pero se pueden aplicar a una

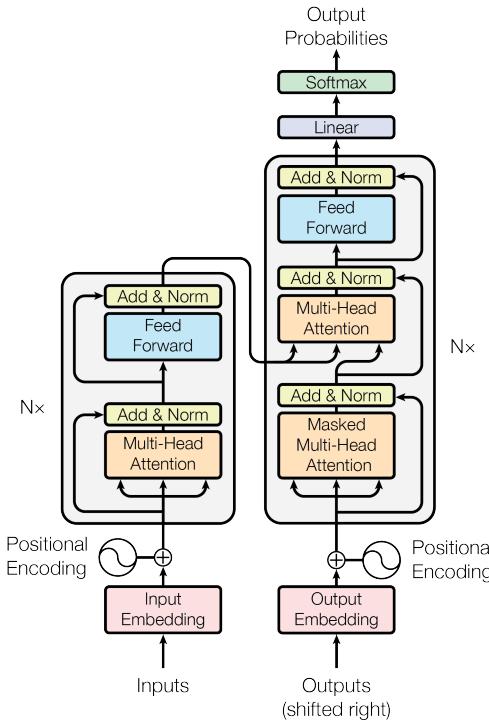


Figura 1.15: Arquitectura de un transformer codificador-decodificador [17]

diversidad de problemas. Basándose en dicho artículo, se presenta una breve explicación de cómo funciona la arquitectura de un transformer.

1.6.1. Codificación

El flujo que sigue un elemento de entrada en un transformer, es bastante más elaborado que el que se sigue en una red neuronal, tal y como se observa en la Figura 1.15. Inicialmente comienza con la etapa de codificación, el la que el elemento recibido (en este primer ejemplo, un texto) se divide en una serie de tokens o elementos básicos e indivisibles, se añaden los tokens **\$SOS\$** (start of sequence) y **\$EOS\$** (end of sequence) para marcar el inicio y el final del contenido, y se convierte cada uno de ellos en una serie de embeddings $e \in \mathbb{R}^{d_m}$ que codifican el token. Un ejemplo sería dividir una frase por palabras, y asignar un vector diferente a cada palabra del diccionario, aunque en los modelos reales de NLP no separan de esta manera. Continuando con el proceso, se necesita almacenar de alguna manera la posición de los tokens de entrada, pues el transformer procesa todos los tokens de manera simultánea y la frase “*Juan es mayor que María*”, es totalmente diferente a, por ejemplo “*María es mayor que Juan*”, a pesar de ser dos secuencias con los mismos tokens. Para lograr esto, a cada embedding e se le suma un vector posicional p donde cada una de sus componentes p_i se obtienen de la siguiente manera, siendo d_m la dimensión de los embeddings y n la posición del token.

$$p_i(n) = \begin{cases} \sin\left(\frac{n}{10000^{\frac{2i}{d}}}\right) & \text{si } i \equiv 0 \pmod{2} \\ \cos\left(\frac{n}{10000^{\frac{2i}{d}}}\right) & \text{si } i \not\equiv 0 \pmod{2} \end{cases}$$

Existen diferentes de maneras de codificar posiciones de tokens, pero en la arquitectura original se utilizó la presentada. El siguiente paso es el conocido como algoritmo de atención, siendo su misión la siguiente. Observando las frases “*Juan es un catador profesional de vino*” y “*María vino ayer de Madrid*”, se ve que el token **vino** aparece en ambas, e inicialmente se le asignaría un embedding idéntico (excepto por la posición), ignorando el contexto en el que aparece el token y perdiendo su significado original. De la misma manera,

en la frase “*Ellos son Juan y María, él es alto y ella es baja*”, necesitaría codificarse que los tokens *alto* y *baja* se refieren respectivamente a los tokens *él* y *ella*, y a su vez a los tokens *Juan* y *María*. La misión del algoritmo de atención es justo esta, transformar los embeddings de cada token para que su codificación se adapte al contexto.

Esto se logra mediante tres matrices Q , K , y V que se llaman query o consulta, key o clave, y value o valor, respectivamente. En este primer ejemplo, dichas matrices son copias de la matriz E de embeddings. La idea es que cada embedding pregunte al resto cómo de relacionados están mediante $QK^T/\sqrt{d_m}$. Esto no es más que el producto escalar de cada par de embeddings normalizado, siendo una manera de medir la similitud entre dos vectores, que al aplicar la función softmax por filas, permite ver claramente para cada embedding cuál le “presta más atención”. A veces, conviene aplicar una máscara M con ciertos valores de $-\infty$ para forzar que algunos embeddings no presten atención a otros. El resultado obtenido se multiplica por la matriz de valores V . Esto representa que si un embedding está relacionado con otro, debe “llevarse” parte de él, para codificar tanto su información como la de aquellos embeddings con los que está relacionado.

$$A = \text{softmax} \left(\frac{QK^T \odot M}{\sqrt{d_m}} \right) V$$

En este punto, se habría detectado la relación entre los tokens de *Juan* y *alto*, y los de *María* y *baja*, reflejando en la matriz A el cambio que debe hacerse a cada embedding para que codifiquen la información del contexto recopilada. La matriz de embeddings, se actualizaría de manera que $E' = E + A$. Al realizar esta suma, el embedding del token *Juan* ya almacena información sobre que es alto. Este proceso se conoce como auto-atención “de cabeza única” o simple, pues normalmente se aplica el conocido como “cabeza múltiple”.

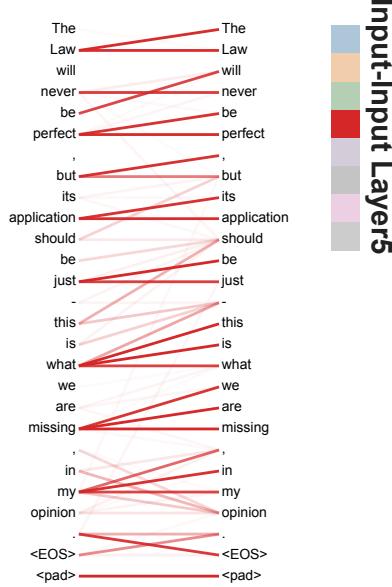


Figura 1.16: Visualización del algoritmo de atención [17]

Algoritmo 1.4: Atención simple

Datos: $E \in \mathbb{R}^{n \times d_m}$, $M \in \mathbb{R}^{n \times n}$

Resultado: $E' \in \mathbb{R}^{n \times d_m}$

$$A \leftarrow \text{softmax} \left(\frac{QK^T \odot M}{\sqrt{d_m}} \right) V$$

$$E' \leftarrow E + A$$

La atención múltiple consiste en ejecutar en paralelo h cabezas de atención. Cada una cuenta con unas

matrices $W_Q^{(i)}$, $W_K^{(i)}$, y $W_V^{(i)}$ de parámetros entrenables del modelo, que transforman el espacio de representación de los embeddings en $d_k = d_m/h$ para obtener h matrices $A^{(i)}$. De esta manera, se consigue que cada cabeza aprenda los diferentes contextos que puede adoptar un token, para finalmente entre todas las cabezas, elegir el adecuado. Por ejemplo, en el caso del token **vino** esto ayuda a verificar si está actuando como verbo o como sustantivo. Para devolver los embeddings al espacio de representación original se utiliza una matriz W_O , también de parámetros entrenables. Esta variación se ve reflejada en el Algoritmo 1.5.

Algoritmo 1.5: Atención múltiple

Datos: $E \in \mathbb{R}^{n \times d_m}$, $M \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $W_Q^{(i)} \in \mathbb{R}^{d_k \times d_m}$, $W_K^{(i)} \in \mathbb{R}^{d_k \times d_m}$, $W_V^{(i)} \in \mathbb{R}^{d_v \times d_m}$, $W_O \in \mathbb{R}^{hd_v \times d_m}$, $h, 1 < i \leq h$

Resultado: $E' \in \mathbb{R}^{n \times d_m}$

$$d_k \leftarrow \frac{d_m}{h}$$

$$d_v \leftarrow d_k$$

paralelamente hacer

$$\begin{cases} Q^{(i)} \leftarrow E \left(W_Q^{(i)} \right)^T \\ K^{(i)} \leftarrow E \left(W_K^{(i)} \right)^T \\ V^{(i)} \leftarrow E \left(W_V^{(i)} \right)^T \\ A^{(i)} \leftarrow \text{softmax} \left(\frac{Q^{(i)} (K^{(i)})^t \odot M}{\sqrt{d_k}} \right) V^{(i)} \end{cases}$$

esperar

$$E' \leftarrow E + (A^{(1)} | A^{(2)} | \dots | A^{(h)}) W_O$$

El proceso de codificación continúa con una normalización de los embeddings. Para realizar dicha normalización [18], se supone que los elementos de cada embedding \mathbf{e}_i siguen una distribución $\mathcal{N}(\mu_i, \sigma_i)$, y se normalizan de acuerdo a la ecuación $E' = \Sigma \Gamma \odot (E - M) + B$, es decir,

$$E' = \left(\begin{array}{cccc} \sqrt{\sigma_1^2 + \varepsilon}^{-1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sqrt{\sigma_2^2 + \varepsilon}^{-1} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sqrt{\sigma_n^2 + \varepsilon}^{-1} \end{array} \right) \left(\begin{array}{cccc} \gamma_{11} & \gamma_{12} & \cdots & \gamma_{1d_m} \\ \gamma_{21} & \gamma_{22} & \cdots & \gamma_{2d_m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \gamma_{n1} & \gamma_{n2} & \cdots & \gamma_{nd_m} \end{array} \right)$$

$$\odot \left(\begin{array}{cccc} e_{11} - \mu_1 & e_{12} - \mu_1 & \cdots & e_{1d_m} - \mu_1 \\ e_{21} - \mu_2 & e_{22} - \mu_2 & \cdots & e_{2d_m} - \mu_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ e_{n1} - \mu_n & e_{n2} - \mu_n & \cdots & e_{nd_m} - \mu_n \end{array} \right) + \left(\begin{array}{cccc} \beta_{11} & \beta_{12} & \cdots & \beta_{1d_m} \\ \beta_{21} & \beta_{22} & \cdots & \beta_{2d_m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \beta_{n1} & \beta_{n2} & \cdots & \beta_{nd_m} \end{array} \right)$$

donde las matrices Γ y B son parámetros del modelo, y ε , ruido para evitar divisiones por cero. Se pretende que cada valor siga una distribución $\mathcal{N}(0, 1)$, quedando multiplicado y sumado por los parámetros de ganancia y sesgo. Para finalizar la etapa de la codificación, cada embedding normalizado pasa por una red neuronal clásica y se vuelve a normalizar la suma de la entrada y la salida de la red.

1.6.2. Decodificación

La etapa de decodificación es bastante similar a la de codificación, ya que la misión del decodificador se puede resumir de manera informal en mezclar las codificaciones del codificador, y las codificaciones de la entrada del decodificador. Todos los bloques del decodificador que se muestran en la Figura 1.15 ya han sido explicados a excepción de un detalle.

Aparece una capa de atención múltiple que es algo diferente de la comentada, ya que en realidad está calculando la atención múltiple-cruzada (Algoritmo 1.6). Este cálculo es idéntico al de la atención múltiple, pero en vez de utilizar los embeddings del decodificador (E_2) para calcular las consultas, claves, y valores; se utilizan solo para calcular las consultas. Para calcular las claves y valores se utilizan los embeddings de la salida del codificador (E_1), pues de esta manera “preguntan” a los del decodificador para encontrar las relaciones entre los tokens de entrada del codificador y los del decodificador.

Algoritmo 1.6: Atención múltiple-cruzada

Datos: $E_1 \in \mathbb{R}^{n \times d_m}$, $E_2 \in \mathbb{R}^{n \times d_m}$, $M \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $W_Q^{(i)} \in \mathbb{R}^{d_k \times d_m}$, $W_K^{(i)} \in \mathbb{R}^{d_k \times d_m}$, $W_V^{(i)} \in \mathbb{R}^{d_v \times d_m}$, $W_O \in \mathbb{R}^{hd_v \times d_m}$, $h, 1 < i \leq h$

Resultado: $E'_2 \in \mathbb{R}^{n \times d_m}$

$$d_k \leftarrow \frac{d_m}{h}$$

$$d_v \leftarrow d_k$$

paralelamente hacer

$$\begin{cases} Q^{(i)} \leftarrow E_2 \left(W_Q^{(i)} \right)^T \\ K^{(i)} \leftarrow E_1 \left(W_K^{(i)} \right)^T \\ V^{(i)} \leftarrow E_1 \left(W_V^{(i)} \right)^T \\ A^{(i)} \leftarrow \text{softmax} \left(\frac{Q^{(i)} (K^{(i)})^t \odot M}{\sqrt{d_k}} \right) V^{(i)} \end{cases}$$

esperar

$$E'_2 \leftarrow E_2 + (A^{(1)} | A^{(2)} | \dots | A^{(h)}) W_O$$

1.6.3. Ejecución y entrenamiento

Esta arquitectura fue planteada originalmente para lograr la traducción de textos de un idioma a otro, aunque como se comentará más adelante, es aplicable a diversas tareas. Suponiendo que se quiere traducir el texto “Juan es alto”, el flujo de ejecución es el siguiente.

1. Se obtienen los tokens \$SOS\$, Juan, es, alto, \$EOS\$
2. El codificador genera una matriz $E_1 \in \mathbb{R}^{5 \times d_m}$ y se envía al decodificador.
3. En la entrada del decodificador se introduce el token \$SOS\$, y a la salida deberían aparecer los tokens \$SOS\$, John.
4. En la entrada del decodificador se introducen los tokens generados por el propio decodificador \$SOS\$ y John, y a la salida deberían aparecer los tokens \$SOS\$, John, is.
5. Se continúa introduciendo la salida del decodificador en su entrada, hasta obtener en la salida el token \$EOS\$.

Actualmente, los transformers pueden tener o no codificador y decodificador, clasificándose principalmente en función de esto.

- Transformers con codificador y decodificador, normalmente orientados y originalmente diseñados para tareas de traducción. Un ejemplo es T5 de Google.
- Transformers con sólo codificador, normalmente orientados a tareas de clasificación. Un ejemplo son los ViT (Vision Transformer).
- Transformers con sólo decodificador, normalmente orientados a tareas de generación de contenido. Un ejemplo es GPT-4 de OpenAI.

Respecto al entrenamiento, se utilizan las mismas técnicas que en las secciones anteriores, Backpropagation con las funciones de error y optimizadores adecuados, normalmente entropía cruzada y Adam, pues se quiere comparar el token esperado con el predicho. El motivo de utilizar Backpropagation es que un transformer no deja de ser una sucesión de redes neuronales. Por otro lado, añadir que para cada ejemplo de traducción se obtienen diferentes ejemplos con los que entrenar, pues para predecir el token i , se necesita predecir correctamente el token $i - 1$, por lo que la predicción hasta cada token sirve como un ejemplo de entrenamiento diferente, lo que permite tener una gran cantidad de ejemplos.

1.7. Transformers de visión

En la sección anterior se presentaban los transformers como un modelo capaz de mejorar el resultado que se puede obtener con redes convolucionales, además de añadir la capacidad de poder trabajar con texto. Hasta este momento se ha demostrado cómo mediante la arquitectura y algoritmos descritos son capaces de trabajar con textos, siendo ahora las principales preguntas, ¿cómo puede un transformer procesar una imagen? ¿Será necesario variar su arquitectura?

En 2021, Google vuelve a publicar otro artículo [19] sobre transformers donde plantean la posibilidad de utilizar este tipo de modelo en tareas relacionadas con imágenes al haber obtenido resultados tan positivos con textos. Al igual que en el artículo donde se presentaban los transformers por primera vez, este también cuenta con un título que resume la solución al problema para presentar los transformers de visión o ViT: “*Una imagen son 16 × 16 palabras*”.

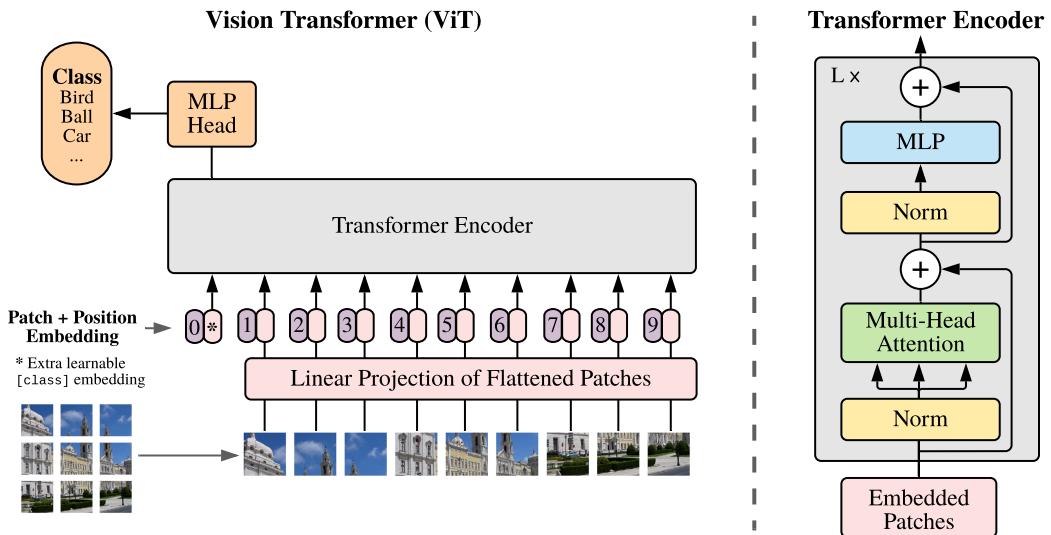


Figura 1.17: Arquitectura de un transformer de visión [19]

En dicho artículo, se propone reutilizar lo máximo posible la arquitectura original del transformer. La primera de las diferencias reside en la entrada del modelo, y para ello se toma que una imagen consiste en un elemento de dimensiones $h \times w \times c$ y se propone separarlo en n subimágenes $p^2 \times c$. Esto es análogo a separar un texto en palabras, excepto que en este caso, todos las divisiones tienen el mismo tamaño. De aquí proviene el nombre del artículo, ya que se propone dividir las imágenes originales en subimágenes de 16×16 píxeles. De esta manera se obtienen tokens de longitud cp^2 , pero el modelo trabaja con embeddings de tamaño d_m , que mediante una serie de parámetros entrenables se realiza esta conversión de dimensiones.

Al igual que en el transformer clásico, se necesita guardar información sobre la ubicación de cada subimagen. Aquí aparece la siguiente diferencia, pues cada elemento se ubica mediante una fila y columna, surgiendo el debate sobre si es necesario codificar las filas y columnas, o si basta con almacenar la posición de forma

linealizada. Tras varios ensayos, se demuestra que a penas existen diferencias en los resultados obtenidos.

La siguiente de las diferencias reside en el número de embeddings con los que trabaja un ViT. En el transformer clásico si se contaba con n tokens, entonces la matriz de embeddings tenía dimensiones $n \times d_m$, mientras que con un ViT, es de $(n + 1) \times d_m$. Los transformers de visión trabajan con un token adicional comúnmente llamado CLS (Classify Token), que codifica información del resto de embeddings, es decir, codifica información de la imagen. Este vector permite la clasificación de las imágenes, pues con un ViT debidamente entrenado si recibe dos imágenes con cierta relación, entonces sus CLS deberían ser similares. En general, la salida de este modelo es este vector, para después, utilizarlo como la entrada de una red neuronal para poder clasificarlo. Aquí se observa que los ViT solo constan de la parte del codificador.

1.8. Transformers multimodales

En las secciones anteriores se ha demostrado cómo es posible la codificación y clasificación de texto e imágenes (en el caso de texto también generación), hasta el momento sin aparente mejora frente a los tipos de redes neuronales presentadas, pues no se ha respondido la cuestión de cómo trabajar con imágenes y textos simultáneamente, cómo modificar la clasificación de las imágenes o textos sin modificar la arquitectura (una red neuronal clásica clasifica en función del CLS), cómo realizar la clasificación sin conocer el número de clases, cómo realizar la clasificación sin contar con un dataset etiquetado, y una larga lista de tareas aparentemente complicadas y sin relación entre sí pero que tienen una solución común, los transformers multimodales.

Los modelos multimodales son un tipo de modelos que permiten la entrada de información de diferentes fuentes en diferentes modalidades como por ejemplo, texto, audio, imágenes, vídeo, etc; y que son capaces de establecer relaciones entre estas [20]. Desde el artículo que presentaba el modelo del transformer, cada vez son más las variantes de su arquitectura que aparecen para poder trabajar con diferentes tipos de datos, llegando en la actualidad hasta los transformers multimodales. Los más populares y que ayudan a responder las preguntas que se planteaban a lo largo de este trabajo, son aquellos capaces de trabajar con imágenes y textos.

El objetivo principal de este tipo de transformers es ser capaz de representar los embeddings de texto y los de imágenes en un espacio común, de manera que por ejemplo los tres elementos mostrados en la Figura 1.18, tengan un embedding similar al tratar de representar un mismo concepto [21].



(a) Imagen de la palabra gato



(b) Imagen de un gato

Cat

(c) Texto con la palabra gato

Figura 1.18: Información multimodal [22]

Una manera de comparar si dos embeddings son similares es mediante el coseno del ángulo que forman ambos embeddings [23], pues no dejan ser vectores. Si el valor es próximo a uno significa que están codificando un concepto semánticamente relacionado al tener una dirección similar. Si el valor es próximo a cero, codifican ideas distintas, pues son dos vectores ortogonales, sus direcciones no son similares. En el caso de la Figura 1.18, si el transformer ha sido entrenado adecuadamente, el coseno formado por cada una de las tres posibles parejas de vectores debería ser similar y cercano a 1, indicando que las tres representaciones se refieren al mismo concepto.

$$\cos(\theta) = \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}}{\|\mathbf{a}\| \cdot \|\mathbf{b}\|}$$

Gracias a esta idea de tener conceptos en diferentes modalidades representados en un mismo espacio, se pueden realizar tareas muy útiles como la búsqueda de una imagen dada una descripción textual, la búsqueda de la imagen más similar a otra, la búsqueda del texto más similar a otro, etc. Todos estos problemas son en realidad el mismo, pues todos los elementos quedan representados como un vector y basta con comparar los productos escalares entre cada par de embeddings, aplicar una función softmax, y elegir el mayor de todos, eligiendo así el embedding que tiene una dirección más similar a la dada. En la Figura 1.19 se visualiza cómo mediante esta idea es posible asignar a cada una de las n imágenes, un conjunto de k descripciones, donde $n \geq k$.

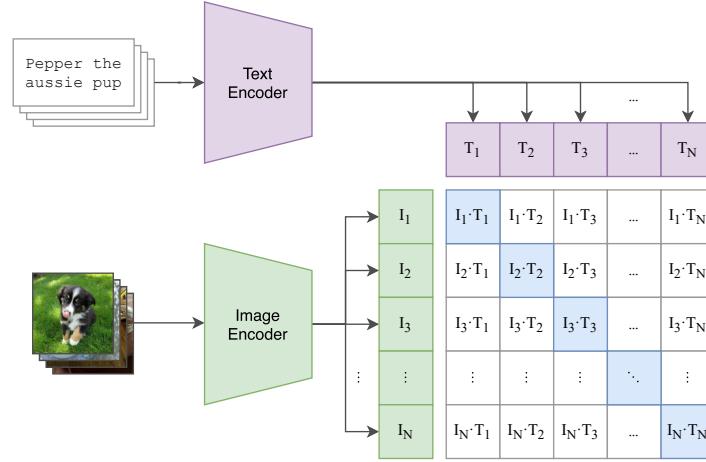


Figura 1.19: Asignación de textos a imágenes [24]

Existen diversas arquitecturas de transformers multimodales capaces de trabajar con imágenes y texto, aunque la forma lograr codificar en embeddings conceptos similares representados de manera diferente, no deja de ser trabajo de los algoritmos de atención múltiple y múltiple-cruzada (Algoritmos 1.5 y 1.6). Dependiendo de la arquitectura, existen diferentes variantes del algoritmo de atención múltiple-cruzada (Figura 1.20), aunque el objetivo en todos los casos es el mismo, mezclar y fusionar los embeddings de la imagen y el texto para poder establecer relaciones entre datos aparentemente distintos [21].

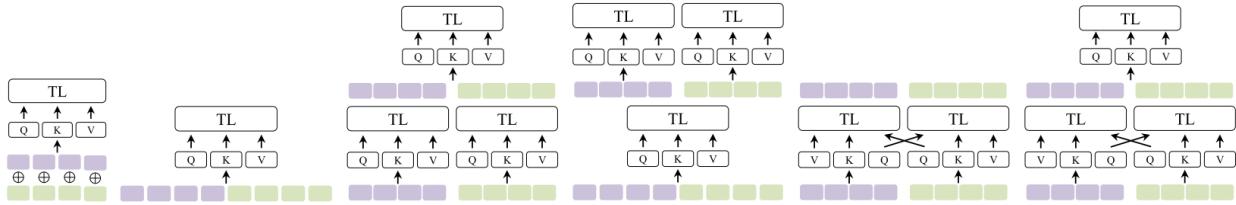


Figura 1.20: Variantes del algoritmo de atención múltiple-cruzada [21]

1.8.1. Clasificación no supervisada

En este punto queda una pregunta por responder. ¿Cómo se realiza la clasificación de textos, imágenes, videos, u otras modalidades de información sin conocer el número de clases adecuado y sin tener que modificar la arquitectura del modelo? En general, los transformers con codificador orientados a tareas de clasificación, cuentan con el CLS, que en el caso de los ViT originales entregan a una red neuronal clásica, pues no deja de ser un vector d_m -dimensional. Al no conocer las clases ni cuántas hay, un posible enfoque es sustituir la red neuronal por un algoritmo de clasificación no supervisada.

Uno de los más conocidos es el algoritmo k -medias [25] o k -means en inglés. Dado un número k de clusters o clases, dicho algoritmo es capaz de clasificar una serie de n elementos $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d$ en k clases

sin conocimiento previo. Para ello, fija de manera aleatoria k puntos $\mu_i \in \mathbb{R}^d$ llamados centroides, que representan el centro de cada cluster. Durante cada iteración, se valora si algún elemento debe cambiar de cluster en función de su distancia a los centroides, y se recalcula la posición de cada uno de ellos. De manera formal, se realiza una partición del dataset S en k conjuntos de manera que

$$\bigcup_{i=1}^k S_i = S, \quad \bigcap_{i=1}^k S_i = \emptyset, \quad \text{y } S_i \neq \emptyset$$

con el fin de minimizar el WCSS (Within Cluster Sum of Squares), es decir,

$$\operatorname{argmín}_{S_1, \dots, S_k} \sum_{i=1}^k \sum_{\mathbf{x} \in S_i} \|\mathbf{x} - \mu_i\|^2.$$

Este proceso se describe en el Algoritmo 1.7. El criterio de parada no es único, también se puede elegir un umbral ε . Dicho umbral podría ser un número máximo de iteraciones, una distancia de cambio de los centroides, etc.

Algoritmo 1.7: k -means

Datos: S, k
Resultado: S_1, S_2, \dots, S_k
partir S aleatoriamente
repetir
 para $i \leftarrow 1$ **hasta** k **hacer**
 $S_i(t) \leftarrow \{\mathbf{x} : \|\mathbf{x} - \mu_i(t)\|^2 \leq \|\mathbf{x} - \mu_j(t)\|^2 \wedge \mathbf{x} \notin S_l(t), \forall (j, l) \in [1, k] \times [1, i]\}$
 $\mu_i(t+1) \leftarrow \frac{1}{|S_i(t)|} \sum_{\mathbf{x} \in S_i} \mathbf{x}$
 fin
mientras $\forall i \in [1, k] S_i(t) \neq S_i(t+1)$

Otro de los algoritmos de clasificación no supervisada más popular es el de clusterización jerárquica aglomerativa. La traza de este algoritmo crea un árbol comúnmente llamado dendrograma (Figura 1.21), que representa una clasificación de los elementos del dataset [26].

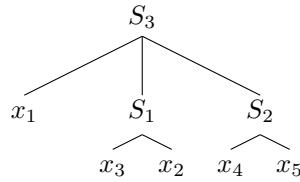


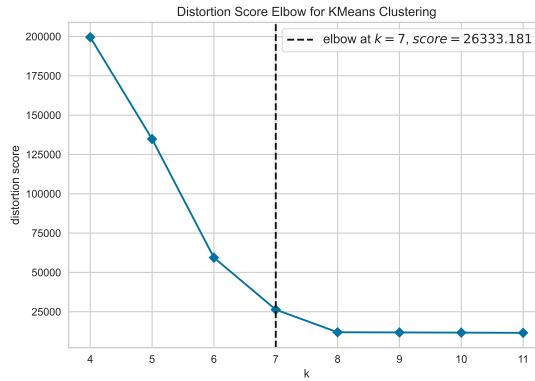
Figura 1.21: Dendrograma

Para lograr la partición del dataset de n elementos en k clusters (con $k \leq n$), inicialmente cada elemento se encuentra en un cluster distinto y durante las iteraciones del algoritmo se van uniendo los clusters más próximos, y determinando la distancia entre estos mediante una función. Existen multitud de ellas, dando lugar a variantes del algoritmo como single, complete, average, Ward, etc. [27]

Una característica que tienen en común estos dos algoritmos es que, si bien no necesitan de conocimiento previo para realizar la clasificación, sí necesitan conocer el número de clases. En el caso que no se tiene conocimiento suficiente sobre el dataset para poder determinar el valor óptimo de clases, se puede utilizar el conocido como método del codo o rodilla. Este método propone utilizar k -means para determinar el k óptimo, tomando aquel que genere un punto que sería el codo en una gráfica que represente cada WCSS para cada k , que tendría forma de brazo [28], tal y como describe el Algoritmo 1.9.

Algoritmo 1.8: Clustering jerárquico aglomerativo

Datos: S, k
Resultado: S_1, S_2, \dots, S_k
 $\forall i S_i \leftarrow \{\mathbf{x}_i\}$
para $j \leftarrow n$ **hasta** k **hacer**
 $D \in \mathbb{R}^{j \times j}$
 $\forall (p, q) D_{pq} \leftarrow \text{dist}(S_p, S_q)$
 $l, m = \underset{a, b}{\operatorname{argmín}} D_{ab}$
 $S_l \leftarrow S_l \cup S_m$
 $S_m \leftarrow \emptyset$
fin
eliminar $\forall i S_i = \emptyset$

Figura 1.22: k óptimo mediante el método del codo**Algoritmo 1.9:** Método del codo

Datos: S, k, a, b
Resultado: k'
 $\mathbf{s} \in \mathbb{R}^n$
 $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$
para $i \leftarrow a$ **hasta** n **hacer**
 $\mu \leftarrow k - \text{means}(S, k)$
 $s_i \leftarrow \sum_{j=1}^k \sum_{\mathbf{x} \in S_j} \|\mathbf{x} - \mu_j\|^2$
 $k_i \leftarrow i$
fin
 $k' \leftarrow \text{kneedle}(\mathbf{k}, \mathbf{s})$

La cuestión que queda por resolver es cómo “calcular el codo”. Este punto se suele definir como el de mayor curvatura, por lo que si dada una serie de valores \mathbf{s} de WCSS, mediante una función $\mathcal{K}(k, y)$ se pudiese calcular la curvatura en ese punto, bastaría con tomar el k que maximice $\mathcal{K}(k, y)$. Para realizar esta tarea se suele utilizar el llamado algoritmo *kneedle*. Dicho nombre proviene del juego de palabras knee (rodilla) y needle (aguja), que en el título de la publicación original [29], se compara con buscar una aguja en un pajar. Tal y como muestra el Algoritmo 1.10, la idea es normalizar los valores, y tomar como punto de curvatura máxima aquel x que maximiza $f(x) - x$. Se puede fijar un umbral para evitar máximos locales.

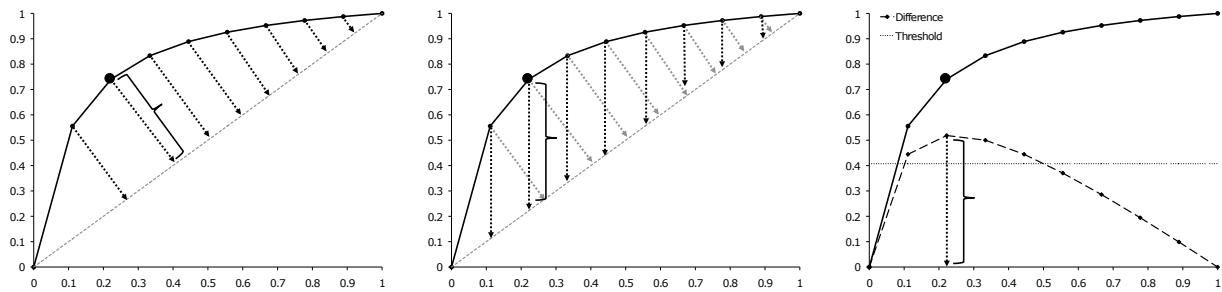


Figura 1.23: Punto de mayor curvatura mediante Kneedle

Algoritmo 1.10: Kneedle

Datos: s, k

Resultado: k'

$d \in \mathbb{R}^n$

para $i \leftarrow \min\{k\}$ hasta $\max\{k\}$ hacer

$$\begin{cases} s'_i \leftarrow \frac{s_i - \min\{s\}}{\max\{s\} - \min\{s\}} \\ k'_i \leftarrow \frac{k_i - \min\{k\}}{\max\{k\} - \min\{k\}} \end{cases}$$

fin

$k' \leftarrow \arg\max d$

Capítulo 2

Optimización del proceso de valoración de puntos de interés

Después de analizar diversos modelos de aprendizaje automático, junto con sus características y los algoritmos asociados, se ofrece un ejemplo práctico que ilustra la aplicación de estos modelos para abordar un problema de la vida real y buscar una solución adecuada. Para ello se presenta la compañía Niantic, fundada en 2010 como parte de una startup de Google, que se especializa en el desarrollo de juegos para dispositivos móviles que utilizan AR (Realidad Aumentada). Algunas de sus creaciones más destacadas han sido los juegos Ingress y Pokémon GO.

Una de las herramientas creadas por esta empresa es Niantic Lightship, que permite a desarrolladores Unity integrar realidad aumentada y mapas con puntos de interés basados en la ubicación real del jugador. Dado que para Niantic resultaba inviable marcar dichos puntos de interés alrededor de todo el mundo, creó Niantic Wayfarer. En esta herramienta, usuarios experimentados de sus juegos pueden hacer propuestas de puntos de interés (llamados Wayspots) para que de manera colaborativa, otros usuarios las valoren. Sin embargo, tras varios años desde su lanzamiento, debido al gran número de propuestas y al reducido número de valoradores, la comunidad notifica largos tiempos de espera en el proceso de valoración de las propuestas. Por este motivo, se propone en este proyecto realizar una primera aproximación a la automatización de este proceso mediante las técnicas de visión e inteligencia artificial presentadas en el marco teórico.

La valoración de un Wayspot en Wayfarer consta de diferentes etapas. En primer lugar se muestra un título y descripción del Wayspot junto con la imagen que aparecería en los juegos. Además aparece una imagen secundaria con una visión desde otra perspectiva, junto con otro texto que ayudarían al valorador a ubicar la propuesta, tal y como se muestra en la Figura 2.1. También aparece un breve cuestionario con una serie de preguntas genéricas que ayudan a determinar si aquello que se solicita cumple una serie de criterios (Figura 2.2). Además, se muestra un mapa que contiene los Wayspots cercanos para verificar que no exista ya, y comprobar con Street View la ubicación sugerida (Figura 2.3). Finalmente, se pide clasificar la propuesta en una o varias categorías.

2.1. Tecnologías empleadas

2.1.1. Python

Para realizar la codificación del proyecto se ha utilizado el lenguaje de programación Python. Es un lenguaje de alto nivel en el que se pueden seguir diferentes paradigmas de programación, como por ejemplo, el orientado a objetos o el funcional. Sus dos grandes ventajas son su sintaxis, que es muy sencilla y legible; y la gran variedad de bibliotecas que posee para realizar cualquier tipo de tareas, desde desarrollo web, proyectos de aprendizaje automático, desarrollo de videojuegos, creación de animaciones, etc.



Figura 2.1: Información de una propuesta en Wayfarer

Apropiado ¿Es el lugar apropiado para ser visitado por peatones? <input type="button" value=""/>	<input type="button" value=""/>	<input type="button" value=""/>	<input type="button" value=""/>	<input type="button" value=""/>
Seguro ¿Es seguro el acceso peatonal y público a este lugar? <input type="button" value=""/>	<input type="button" value=""/>	<input type="button" value=""/>	<input type="button" value=""/>	<input type="button" value=""/>
Exactitud ¿Los detalles que acompañan a esta propuesta son correctos e informativos? <input type="button" value=""/>	<input type="button" value=""/>	<input type="button" value=""/>	<input type="button" value=""/>	<input type="button" value=""/>
Permanente y distinto ¿Es un lugar o un objeto permanente, físico, tangible e identificable que marca una zona? <input type="button" value=""/>	<input type="button" value=""/>	<input type="button" value=""/>	<input type="button" value=""/>	<input type="button" value=""/>
Socializar ¿Es un buen lugar para conocer gente y socializar? <input type="button" value=""/>	<input type="button" value=""/>	<input type="button" value=""/>	<input type="button" value=""/>	<input type="button" value=""/>
Ejercicio ¿Es un buen lugar para practicar una actividad física ligera? <input type="button" value=""/>	<input type="button" value=""/>	<input type="button" value=""/>	<input type="button" value=""/>	<input type="button" value=""/>
Explorar ¿Crees que esta ubicación es importante para la comunidad local? <input type="button" value=""/>	<input type="button" value=""/>	<input type="button" value=""/>	<input type="button" value=""/>	<input type="button" value=""/>

Figura 2.2: Cuestionario de una propuesta en Wayfarer

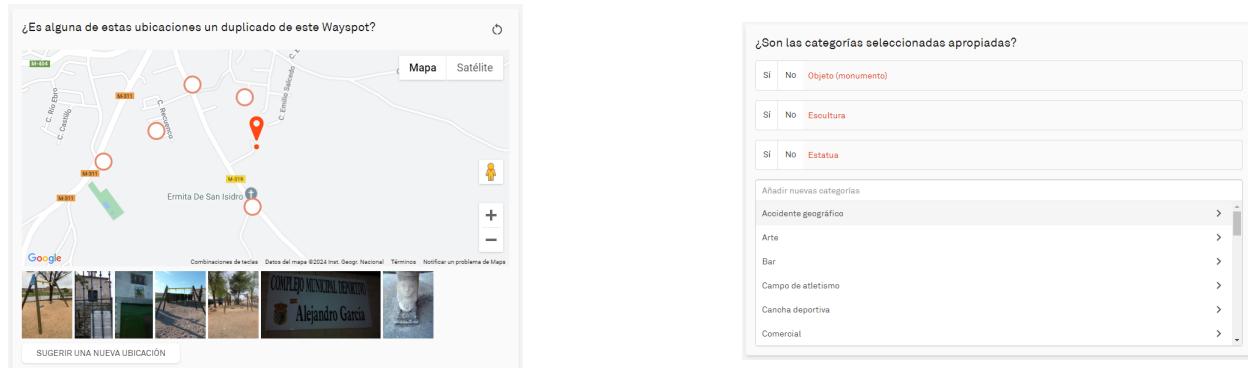


Figura 2.3: Mapa y clasificación de una propuesta de Wayfarer

Para este proyecto, las principales utilizadas son TensorFlow y Scikit-learn. La primera de ellas fue creada por Google y permite construir de manera sencilla modelos de aprendizaje automático, contando con las im-



Figura 2.4: Python

plementaciones de los principales elementos que los forman, así como algoritmos de entrenamiento, datasets de ejemplo, y funciones auxiliares de utilidad para trabajar con los datos empleados durante el proceso. La segunda de ellas, además de contar también con diversas implementaciones de modelos y algoritmos de aprendizaje automático, es bien conocida por contar con las implementaciones de diferentes métricas para modelos, lo que permite comprobar de manera rápida y visual la calidad de los modelos entrenados. Finalmente, estas bibliotecas hacen uso de otras como pueden ser Matplotlib, utilizada para generar cualquier tipo de figura desde Python.

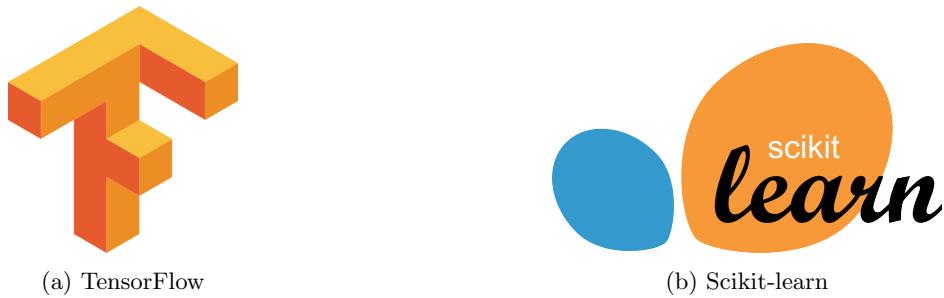


Figura 2.5: Bibliotecas populares de Python

Por otro lado, no todo son ventajas. Python es un lenguaje interpretado y de tipado dinámico, lo que hace que su ejecución sea mucho más lenta que la de otros lenguajes. Sin embargo, existen soluciones como NumPy, una biblioteca que permite trabajar con grandes matrices de datos en tiempos de ejecución menores que al utilizar listas, gracias a que gran parte de su codificación se realizó utilizando lenguajes de más bajo nivel como C.

2.1.2. CUDA

CUDA (Compute Unified Device Architecture) es una tecnología de la marca estadounidense NVIDIA. Esta tecnología hace referencia a un conjunto de elementos que permiten ejecutar código de manera masivamente paralela en una tarjeta gráfica de la compañía, de manera que el tiempo de ejecución es mucho menor que al ejecutarlo de manera secuencial. Entre estos elementos se encuentran el controlador, el compilador, las interfaces para los diferentes lenguajes (la más común la de C/C++), las librerías que contienen algoritmos optimizados, y los propios núcleos CUDA de la GPU (Graphics Processing Unit) [30].

El hardware de las tarjetas gráficas de NVIDIA se divide en SM (Streaming Multiprocessor), que a su vez están compuestos de SP (Streaming Processor) o núcleos CUDA, entre otros elementos. A nivel de software, la unidad básica paralela es el hilo, que a nivel de hardware se ejecuta en un SP. Dichos SP, son unos núcleos capaces de hacer operaciones más sencillas que las que un núcleo de una CPU (Central Processing Unit) podría realizar, pero de manera más rápida. A su vez, los hilos se agrupan en bloques, teniendo en cuenta que a nivel de hardware cada bloque se ejecuta en un único SM. Finalmente, todos los elementos se agrupan

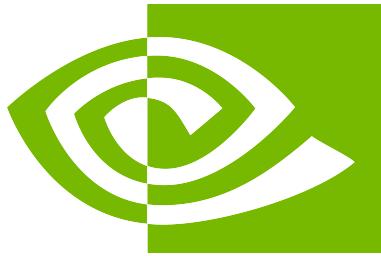


Figura 2.6: NVIDIA

en una cuadrícula (o *grid*) compuesta de bloques. Cada cuadrícula se ejecuta en una única GPU a nivel de hardware, y ejecuta a nivel de software un kernel [31], [32].

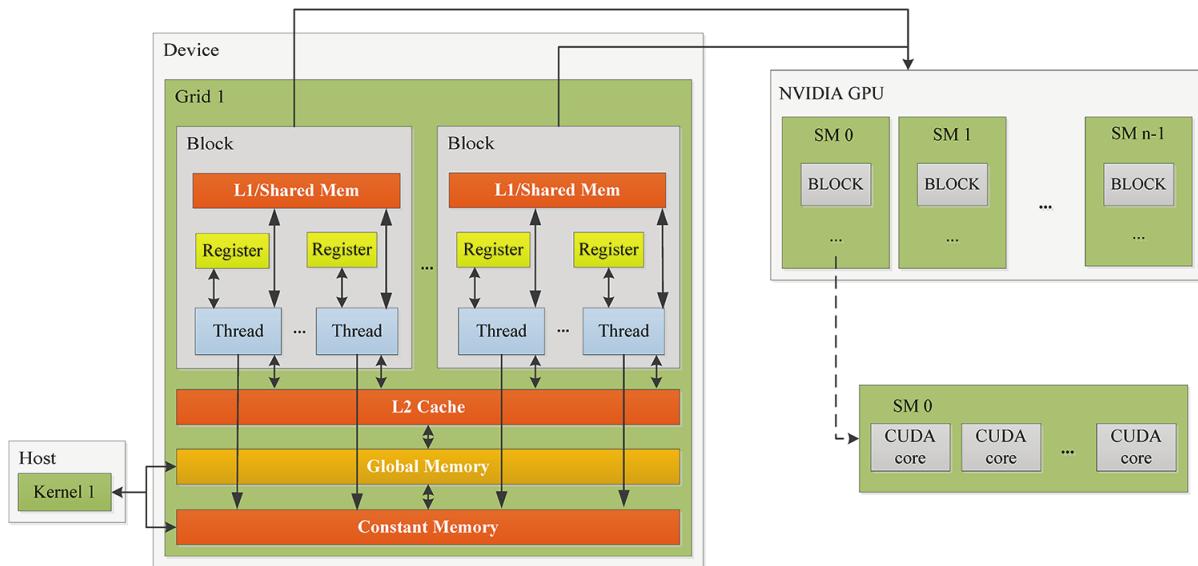


Figura 2.7: Arquitectura CUDA a nivel de hardware y software [32]

El hecho de poder realizar miles de operaciones sencillas de manera simultánea, reduce enormemente el tiempo de ejecución de algoritmos que son paralelizables, es decir, que contienen pasos sencillos que son independientes de otros y se pueden realizar al mismo tiempo, como es el caso de una convolución o multiplicación de matrices. Además, se cuenta con diferentes niveles de memoria, con los que se agilizan los tiempos de lectura de elementos que son utilizados frecuentemente.

La mayoría de algoritmos de aprendizaje automático de TensorFlow tienen implementada su versión paralela, de manera que si se cuenta con una GPU compatible con CUDA, TensorFlow la utilizará para ahorrar el mayor tiempo posible durante los entrenamientos de los modelos. En este caso se dispone de un equipo que cuenta con un procesador Intel Core i7-8700, una GPU NVIDIA GeForce GTX 1060 6GB, y 32 GB de RAM; lo que hace posible la ejecución concurrente de dichos algoritmos. Esta tarjeta gráfica cuenta con 1280 SP o núcleos CUDA repartidos en 10 SM.

Si bien el trabajo de indicar a TensorFlow que haga uso de CUDA es sencillo, no es tan trivial la configuración de drivers de NVIDIA, instalación de CUDA, versión de Python, versión de TensorFlow, versión de sistema operativo, etc. Con el frecuente cambio de versiones de cada componente, se presentan nuevas incompatibilidades entre ellos, haciendo que guías oficiales fallen y que el proceso de configuración inicial sea complicado en sistemas operativos como Windows 11. La manera más sencilla actualmente de realizar

una instalación de CUDA y TensorFlow es sobre el sistema operativo Ubuntu en su versión 22.04 LTS. Para instalar y configurar el resto de componentes se ha hecho uso de LambdaStack (<https://lambdalabs.com/lambda-stack-deep-learning-software>). Mediante el uso del comando de terminal

```
wget -nv -O- https://lambdalabs.com/install-lambda-stack.sh | sh -
```

automáticamente lanza LambdaStack que se encarga de instalar las versiones de Python y sus librerías (TensorFlow y PyTorch entre otras) adecuadas, los drivers de NVIDIA correctos, componentes de CUDA, realiza las configuraciones de variables de entorno, etc. En general, deja el entorno de Ubuntu configurado para poder trabajar en cualquier proyecto de inteligencia artificial en el que se quiera hacer uso de una GPU de NVIDIA. También cuentan con una imagen de Docker que ofrece una experiencia similar. El uso de este servicio es completamente gratuito, y es el que utiliza la compañía que lo gestiona en sus servicios de cloud computing (que sí son de pago).

Para probar la eficacia del uso de CUDA para proyectos de esta índole, se ha seleccionado un modelo de los que se presentan en la Sección 2.2.2 (entrenamiento de una red convolucional desde cero), y se ha lanzado midiendo el tiempo, el mismo entrenamiento pero con diferente número de épocas sobre CPU y GPU. La Figura 2.8 evidencia cómo el entrenamiento en la GPU llega a ser hasta cinco veces más rápido que en la CPU. Todos los entrenamientos de la Sección 2.2.2 han sido realizados sobre la GPU.

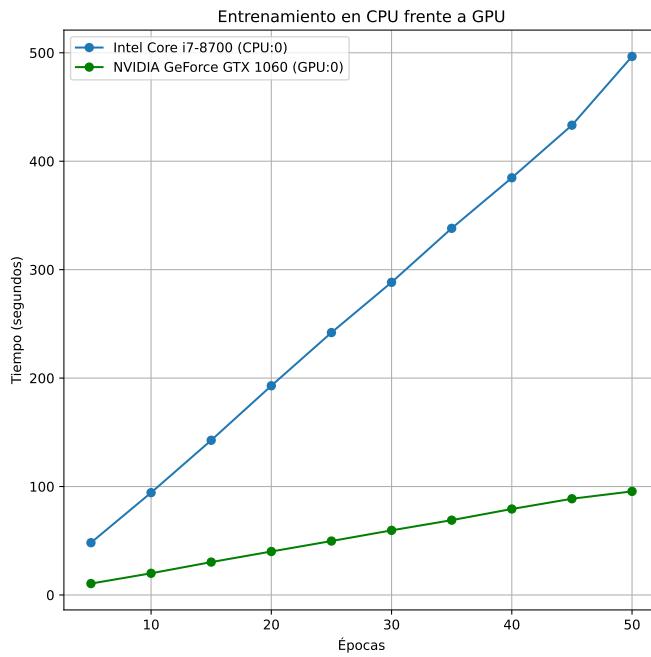


Figura 2.8: Comparativa de entrenamiento en CPU frente a en GPU

2.1.3. Google Cloud Platform

GCP (Google Cloud Platform) es una de las plataformas de cloud computing más conocidas, junto con AWS (Amazon Web Services) y Microsoft Azure. Este tipo de plataformas se encargan de ofrecer servicios IaaS (Infrastructure as a Service), PaaS (Platform as a Service), y SaaS (Software as a Service) muy útiles para empresas a la hora de desarrollar todo tipo de proyectos. Google divide los tipos de servicios que ofrece en diferentes categorías, siendo algunas de las principales las siguientes [33].

- **Inteligencia artificial y aprendizaje automático:** GCP cuenta con una amplia gama de servicios de inteligencia artificial en sus distintas áreas como por ejemplo, procesamiento de lenguaje, visión artificial, IA generativa, etc. Su plataforma Vertex AI engloba una gran variedad de modelos muy útiles y permite

entrenar, desplegar, y gestionar dichos modelos de manera sencilla. En general, se podrían categorizar como servicios PaaS y SaaS.

- Inteligencia empresarial: Google ofrece herramientas (SaaS) como podrían ser Looker y Looker Studio, que permiten trabajar con datos, analizarlos, visualizarlos, generar informes, y en general, todo tipo de tareas del campo de Business Intelligence.
- Computación: dentro de este campo Google ofrece diferentes variantes de hardware virtualizado, como por ejemplo, máquinas virtuales, GPUs, ejecución de aplicaciones en contenedores, etc. En resumen, se trata de diferentes servicios IaaS y PaaS
- Bases de datos y almacenamiento: Google ofrece múltiples servicios de almacenamiento de ficheros y bases de datos tanto SQL (Structured Query Language) como NoSQL, de manera segura y escalable. De manera similar al apartado anterior, son principalmente servicios IaaS y PaaS.

La mayoría de estos servicios son accesibles de manera sencilla vía CLI (Command Line Interface), API (Application Programming Interface), o los diferentes SDK (Software Development Kit) de los lenguajes de programación más populares.



Figura 2.9: Google Cloud Platform

2.2. Clasificación de imágenes mediante redes convolucionales

Una primera aproximación a agilizar el proceso de valoración comentado, sería detectar el objeto que se muestra en la imagen de la propuesta, para que en caso de que sea algo aceptable proseguir con el proceso de valoración, o en caso contrario, rechazar directamente la propuesta. En general, en función del objeto que aparezca en la imagen, se tienen directamente las respuestas a las preguntas de la Figura 2.2.

Para comenzar este caso práctico, lo primero a realizar es el proceso conocido como ETL (Extract, Transform, Load), que consiste en la extracción, transformación, y carga de los datos; para posteriormente poder trabajar con ellos y proporcionárselos al modelo. Comenzando por la extracción de datos, se presenta el primero de los problemas. La idea es utilizar imágenes que realmente hayan pasado por este proceso de valoración para poder hacer el proyecto lo más realista posible, sin embargo, ni Wayfarer ni ninguno de los juegos poseen alguna API (al menos de manera pública) que permita recolectar de manera programática las imágenes utilizadas o información relativa a ellas.

2.2.1. Proceso ETL

La solución adoptada para este proceso, ha sido recolectar manualmente imágenes que han superado el proceso de valoración, pudiendo consultar algunas de ellas desde el mapa de uno de los juegos (<https://intel.ingress.com/>). En este caso, se estarían clasificando entre las n clases de objetos aceptables las imágenes recibidas, cosa que en un primer momento parece carecer de sentido pues se conoce el resultado de la valoración. Sin embargo, al no tener acceso a propuestas rechazadas, no se pueden recolectar estos datos para entrenar los modelos, pero si de la empresa responsable se tratase, se dispondría de una enorme cantidad

de imágenes válidas y no válidas etiquetadas (gracias a la parte del proceso de valoración que muestra la Figura 2.3), y que se podrían cargar de manera automática. En resumen, cambiando simplemente los datos que se cargarían y su fuente, se podrían tomar las siguientes decisiones sin necesidad de modificar el resto del proyecto.

- Si $I \in C_i, 0 \leq i < m$, rechazar la propuesta
- Si $I \in C_j, m \leq j < n$, continuar evaluando la propuesta

Continuando con la extracción de los datos, y preparándolos para la carga, se ha creado una carpeta `tfg_dataset` que representa el conjunto de las imágenes que se utilizan durante el proyecto. Dentro de esta, se ubicarán dos subcarpetas, `train` y `test`, que hacen referencia a las imágenes que se utilizarán para entrenar los modelos, y las que se utilizarán para evaluar su rendimiento. Para generar dichas carpetas partiendo de una que contiene las imágenes separadas por clases, se ha codificado la función `split_tt` que permite hacer la división del conjunto en los de entrenamiento y test con el porcentaje especificado. Previamente a la ejecución de esta función, se recomienda ejecutar otra que se ha codificado llamada `renombrar_imagenes`, que dada la ruta raíz donde se encuentran las carpetas de cada clase, renombra las imágenes de cada carpeta de manera que queden enumeradas. Esta es la manera de etiquetar el conjunto de datos y prepararlo para la carga. Se puede visualizar un breve esquema de esta estructura en la Figura 2.10.

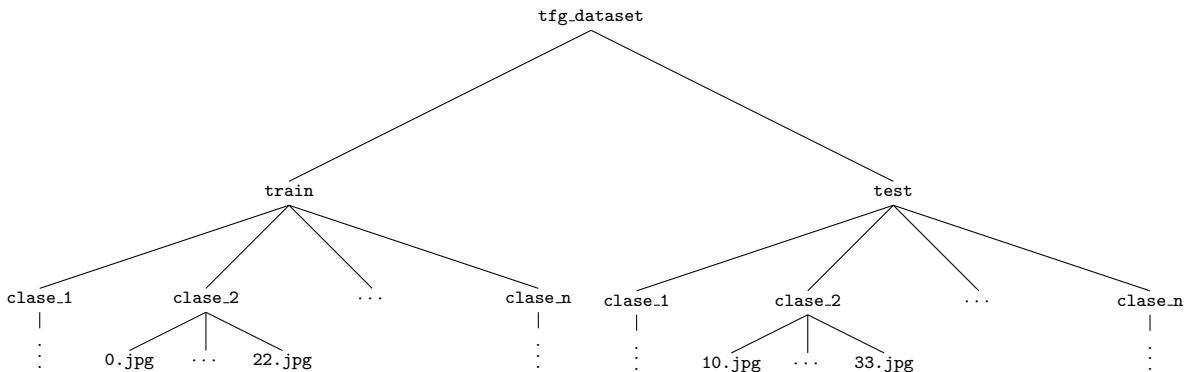


Figura 2.10: Árbol de carpetas del dataset

Para cargar el dataset en TensorFlow directamente desde la estructura de carpetas creadas, se hará uso de la función `image_dataset_from_directory` de `utils`. Esta contiene una serie de parámetros interesantes a comentar.

- `directory`: es el directorio raíz del dataset, en este caso `tfg_dataset`.
- `image_size`: es una tupla de dos elementos con las dimensiones en píxeles que deberán tener las imágenes del dataset.
- `labels`: mediante el valor `inferred` las etiquetas toman el mismo valor que el nombre de las carpetas.
- `label_mode`: hace referencia a la forma de codificar las etiquetas. Se empleará el valor `categorical` para codificar las etiquetas utilizando one-hot-encoding, es decir, si se tienen por ejemplo cuatro clases y un elemento pertenece a la cuarta, dicha etiqueta queda codificada como 0001.
- `batch_size`: hace referencia al tamaño de batch o lote que será utilizado durante el entrenamiento. Si en la función de entrenamiento se elige un tamaño diferente, se utilizará el menor de los valores.
- `validation_split`: hace referencia al porcentaje de los datos de entrenamiento que se reservan para validar el modelo durante el entrenamiento, es decir, permiten calcular el error del modelo al hacer una predicción de datos que nunca ha visto mientras entrena. Se reservarán un 20 % de los datos para validar.



Figura 2.11: Visualización de ejemplo de un dataset creado

- **seed:** hace referencia a la semilla que se utiliza para ordenar las imágenes de manera aleatoria.
- **subset:** seleccionando el valor **both** permite devolver el conjunto de entrenamiento y validación con la llamada a la función, es decir, `x_train, x_val = image_dataset.from_directory(...)`.

Como se puede observar, esta función que está haciendo principalmente el trabajo de la carga de datos, también hace parte del proceso de transformación, ya que permite modificar las dimensiones de la imagen (en este caso se utilizará un valor de 224×224 píxeles, se justificará más adelante), y también permite modificar la codificación de las etiquetas. Además, cada píxel (en cada canal de color) toma un valor entre 0 y 255. Es muy importante normalizar estos valores en el proceso de transformación para facilitar el trabajo a los diferentes modelos. Para ello, con ayuda de una capa de reescalado de Keras, se divide el valor de cada píxel entre 255 para obtener valores entre 0 y 1. Con motivo de verificar que todos estos pasos se han realizado correctamente, se codificado una función llamada `sample_ds_dfd` que permite visualizar nueve ejemplos aleatorios de un dataset creado con la función de TensorFlow mencionada, obteniendo como resultado la Figura 2.11.

2.2.2. Creación y entrenamiento de una red convolucional en TensorFlow

En esta primera aproximación se va a crear y entrenar una red convolucional desde cero con el dataset mencionado. En este caso, se han elegido cuatro tipos de objetos que frecuentemente se proponen como puntos de interés: parques infantiles, carteles informativos, marcadores de ruta, e hitos del Camino de Santiago. Mediante la clase `Sequential` de Keras, se puede proporcionar una lista de las capas que conforman el modelo. La primera de ellas será una capa de convolución, con la particularidad de que se debe indicar el tamaño de entrada, siendo este un tensor de las dimensiones indicadas en la creación del dataset. Se alterna cada capa de convolución ReLU de stride 3×3 y 32 o 64 filtros, con una capa de maxpooling con stride 2×2 . Estos valores han sido elegidos de manera arbitraria. Esta arquitectura se puede visualizar en la Figura 2.12.

Mediante estas capas, se supone que la red debe extraer características de las imágenes, como por ejemplo

- Aparece un objeto rectangular
- Tiene dos patas

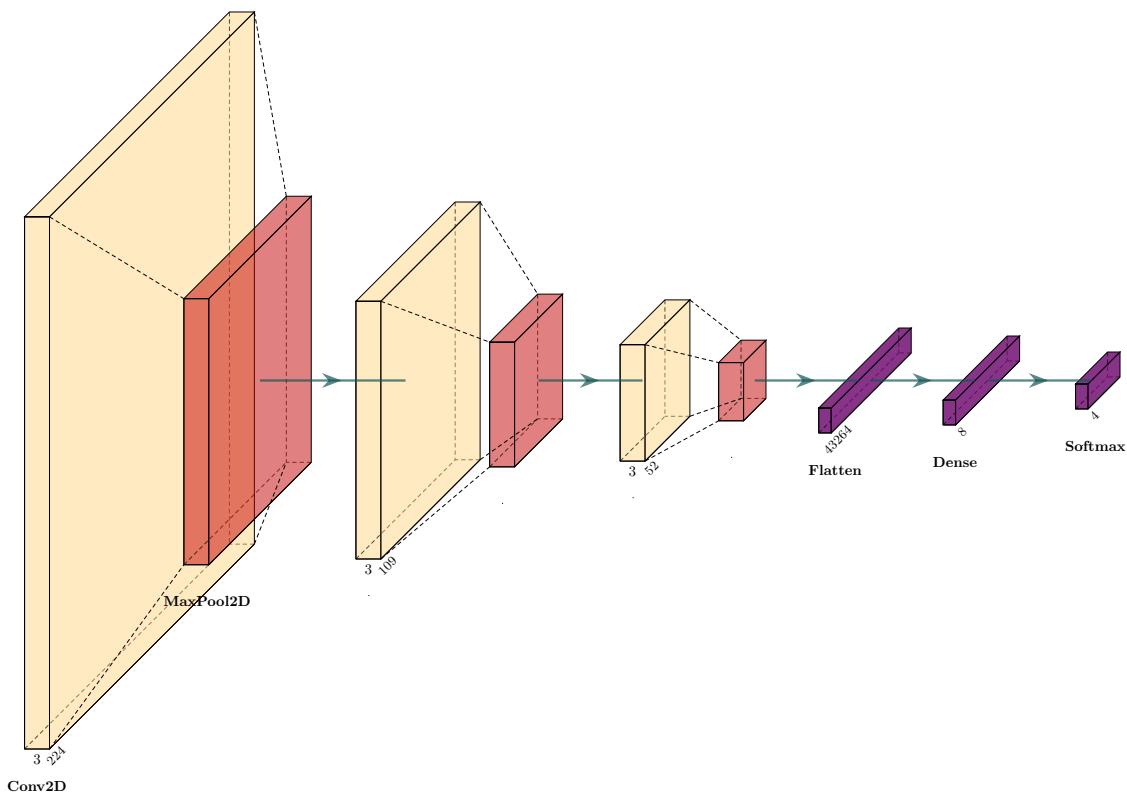


Figura 2.12: Arquitectura de la red convolucional

- No tiene formas curvas

y de ahí con ayuda de una red clásica, ser capaz de deducir que en la imagen aparece un cartel. En realidad, las capas de convolución no obtienen características tan claras, pero sí resultan con una matriz de detalles en la imagen que pueden conducir a la misma conclusión. Para ello se utiliza la capa **Flatten** que transforma dicha matriz en un vector que sirve de entrada a la siguiente y última capa de la red, una capa oculta con tantas neuronas como clases diferentes. Como función de activación se utiliza softmax para obtener una distribución de probabilidad en la que se observe cuál es claramente la clase a la que pertenece el objeto, y con qué confianza lo es. Finalmente, mediante la función **summary** se puede observar un resumen del modelo.

Layer (type)	Output Shape	Param #
conv2d (Conv2D)	(None, 222, 222, 32)	896
max_pooling2d (MaxPooling2 D)	(None, 111, 111, 32)	0
conv2d_1 (Conv2D)	(None, 109, 109, 64)	18496
max_pooling2d_1 (MaxPooling2D)	(None, 54, 54, 64)	0
conv2d_2 (Conv2D)	(None, 52, 52, 64)	36928

```

max_pooling2d_2 (MaxPooling2D)          (None, 26, 26, 64)      0
                                         (None, 43264)           0
dense_2 (Dense)                        (None, 8)                346120
dense_3 (Dense)                        (None, 4)                36
=====
Total params: 402476 (1.54 MB)
Trainable params: 402476 (1.54 MB)
Non-trainable params: 0 (0.00 Byte)
=====
```

Con la función `compile` se termina de crear el objeto que representa al modelo, pudiendo especificar un optimizador, la función de pérdida, y las métricas que se muestran durante el entrenamiento. Para este proyecto se utilizarán Adam, entropía cruzada, y precisión respectivamente. El modelo ya está en condiciones de ser entrenado, y esto se logra mediante la función `fit`, a la que se le proporcionan los datos de entrenamiento (`x_train`), los datos de validación (`x_val`), el número de épocas (en este caso se han elegido 25), y la ruta de los callbacks. Esta sirve para ir almacenando metadatos del entrenamiento, que mediante una utilidad con la que cuenta TensorFlow llamada TensorBoard, permite monitorizar de manera muy visual la calidad del entrenamiento, tal y como se muestra en la Figura 2.13.

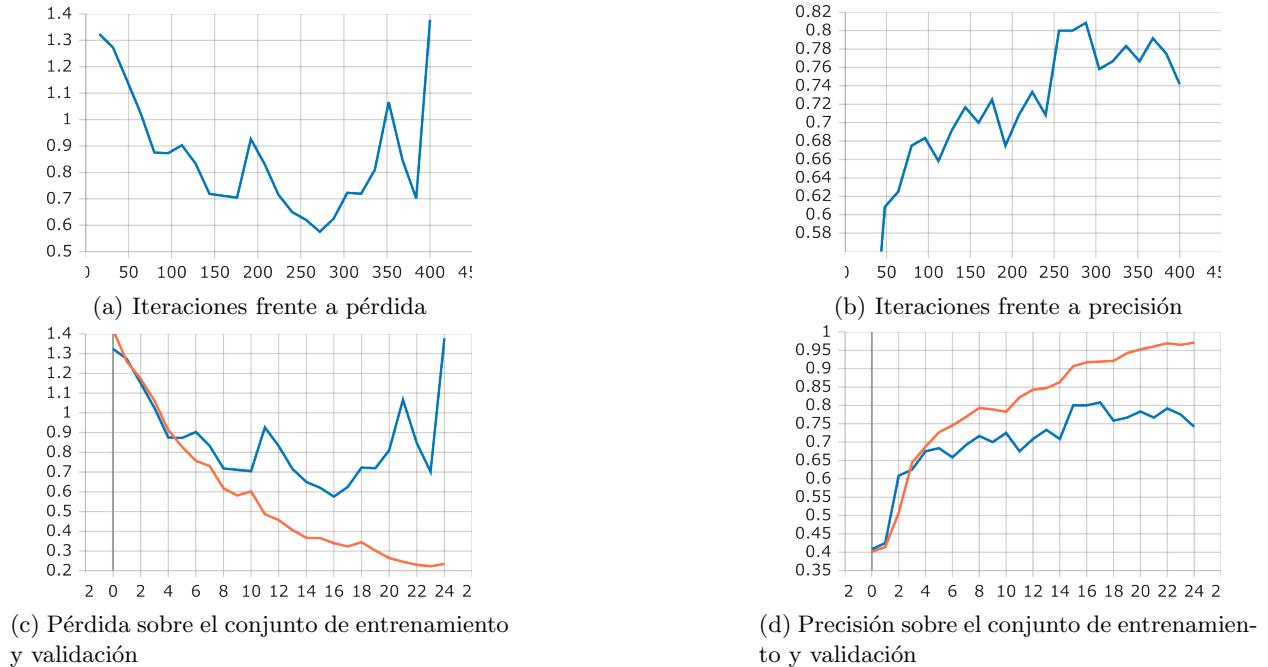


Figura 2.13: Pérdida y precisión durante el entrenamiento de la CNN

La situación que describen las gráficas, es negativa y sería la típica no deseada, pues se observa como con el paso de las iteraciones el error crece mientras que la precisión se estanca en valores no deseados. En concreto, en la Figura 2.13c se observa cómo el error sobre el conjunto de validación crece, mientras que sobre el conjunto de entrenamiento tiende a cero. Esta es una situación denominada como sobreaprendizaje o *overfitting* [34]. La red no tiene capacidad de aprender ni generalizar, y lo que está haciendo es memorizar

los datos de ejemplo que se le presentan, cometiendo entonces errores cuando recibe datos que no ha visto nunca.

2.2.3. Transfer learning en TensorFlow

Como se ha podido observar durante la sección anterior, el resultado del entrenamiento no ha sido adecuado, pues la red tenía que memorizar los datos que se le presentaban sin mostrar una buena capacidad de generalización. Esto puede deberse a múltiples factores, como por ejemplo, que al tener un conjunto de datos de entrenamiento tan reducido no sea capaz de extraer correctamente las características que determinan a los objetos de cada clase. Es decir, en vez de hacerle llegar a las capas densas hechos como “tiene un objeto rectangular”, “tiene dos patas”, etc; podría estar haciéndole llegar, “hay dos árboles en el fondo”. Observando la estructura del modelo, se está tratando de optimizar cerca un millón de parámetros con poco más de 500 observaciones, algo que es muy desproporcionado; la red no es capaz de encontrar relaciones con tan pocos datos.

En proyectos similares del mundo real, y en los que además se dispone de pocos datos (como es el caso), es muy poco frecuente crear y entrenar un modelo desde cero tal y como se ha realizado en la Sección 2.2.2. En vez de realizar esto, es muy común utilizar una técnica conocida como transfer learning. Tal y como se menciona en [35], es una técnica muy aplicada en casos en los que se dispone de pocos datos y los modelos de deep learning no son capaces de encontrar relaciones, y también en casos en los que se dispone de equipos con pocos recursos. Consiste en aplicar el conocimiento obtenido de otro dataset, no necesariamente relacionado, para facilitar el proceso de obtener el conocimiento deseado del dataset actual.

En el problema que se está tratando, se va a aplicar esta técnica de la siguiente manera. Como previamente se ha mencionado, las redes convolucionales, pueden verse como un conjunto de capas capaces de extraer características de las imágenes, junto con una red neuronal clásica que es capaz de clasificar en función de dichas características. Teniendo en cuenta que el principal problema del modelo anterior podría ser que no fuera capaz de obtener las características adecuadas que definen a cada clase, la idea es utilizar una serie de capas que sí sean capaces de obtener de manera correcta las características de una imagen, para después poder entrenar la red neuronal clásica con las características adecuadas.

En TensorFlow se pueden importar modelos ya entrenados. En este caso para aplicar la técnica de transfer learning, se ha decidido utilizar la red MobileNet de Google que se observa en la Figura 2.14. El modelo se puede importar como si de una capa se tratase al crear un modelo secuencial de Keras. Para lograr la técnica, será clave declarar que los parámetros de dicha capa no se deberán entrenar (pues al importar el modelo ya vienen con unos valores adecuados). A continuación se coloca una capa densa, encargada de clasificar las características que la red de Google extraiga, y que deberá ser entrenada. Esta vez, el número de parámetros a optimizar sí es más adecuado al número de observaciones disponibles.

Layer (type)	Output Shape	Param #
mobilenetv2_1.00_224 (Functional)	(None, 7, 7, 1280)	2257984
global_average_pooling2d (GlobalAveragePooling2D)	(None, 1280)	0
dense_2 (Dense)	(None, 8)	10248
dense_3 (Dense)	(None, 4)	36
<hr/>		
Total params: 2268268 (8.65 MB)		

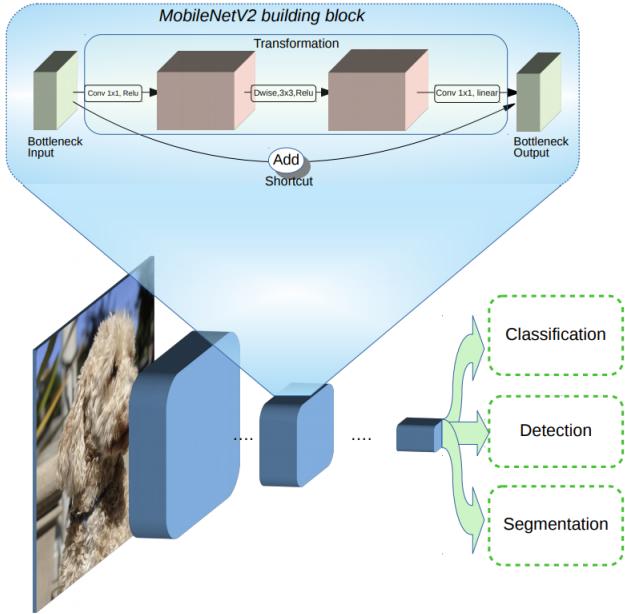


Figura 2.14: MobileNet [36]

Trainable params: 10284 (40.17 KB)
 Non-trainable params: 2257984 (8.61 MB)

La manera de lanzar el entrenamiento es la misma que en el anterior, sin embargo, esta vez los resultados obtenidos son totalmente distintos, tal y como muestran las gráficas de TensorBoard en la Figura 2.15.

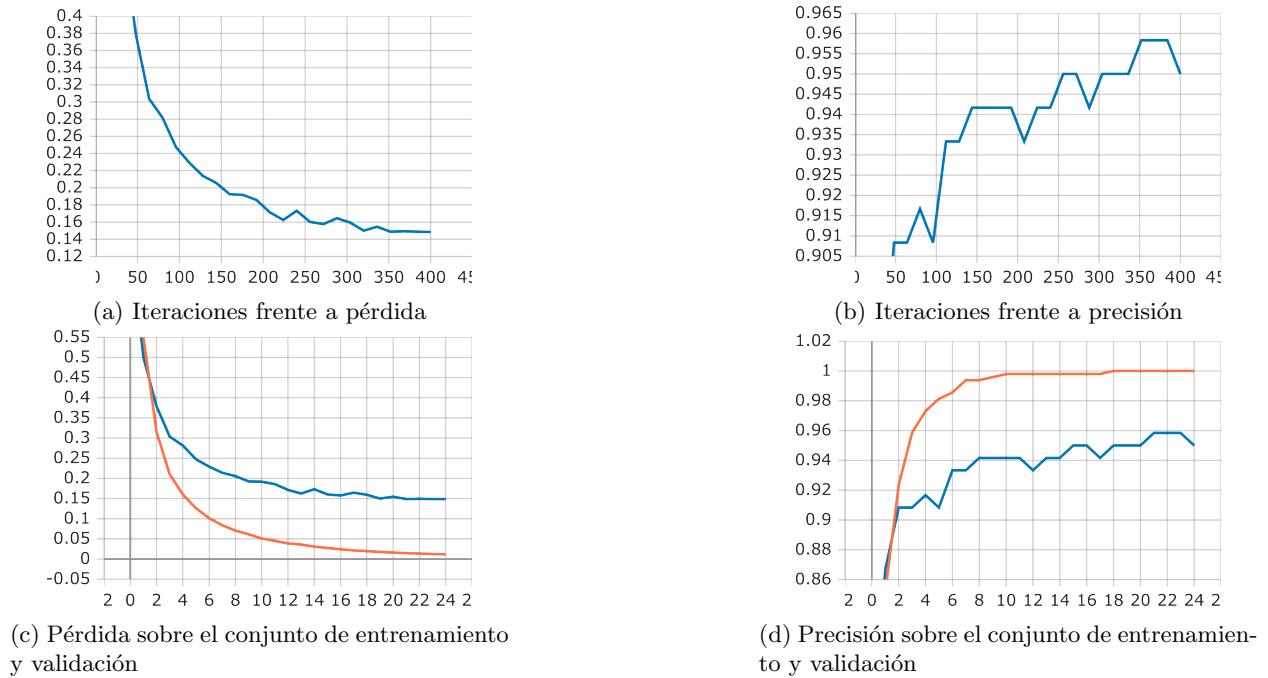


Figura 2.15: Pérdida y precisión durante el entrenamiento aplicando transfer learning

Estas gráficas representan una situación cercana a la ideal. En las Figuras 2.15a y 2.15b se observa cómo con el paso de las iteraciones, el error disminuye y la precisión aumenta hasta llegar a valores adecuados. Además, en las Figuras 2.15c y 2.15d se muestra claramente que tanto el error como la precisión se comportan de manera similar sobre los conjuntos de entrenamiento y validación respectivamente, tomando además valores adecuados.

2.2.4. Aumento de datos

Como se ha visto a lo largo de las secciones anteriores, uno de los problemas que se está teniendo en este caso práctico, es la falta de datos. Una técnica utilizada frecuentemente en estos casos es conocida como aumento de datos. Consiste en modificar las imágenes del dataset de entrenamiento para que el modelo disponga de más ejemplos diferentes [37]. Podría entenderse como una parte del proceso de transformación ETL.

Una vez más, es posible aplicar esta técnica mediante funciones de TensorFlow. Para ello se crea un objeto de la clase `ImageDataGenerator`. Mediante su constructor se pueden declarar los valores que toman los atributos que modificarán las imágenes, siendo algunos de los más destacables:

- `rotation_range`: gira la imagen.
- `width_shift_range` y `height_shift_range`: desplazamiento horizontal y vertical de la imagen.
- `shear_range`: estira la imagen.
- `zoom_range`: hace zoom a la imagen.
- `rescale`: indica el factor por el que se reescaliza la imagen, en este caso $1/255$ para facilitar el entrenamiento a la red, como en casos anteriores.
- `validation_split`: porcentaje de los datos reservados a validación.

Una vez se tiene declarado el generador, se utiliza su método `flow_from_directory` para que dada la ruta que contiene las imágenes, el tamaño deseado de imagen, y el tamaño de los lotes, se cree el objeto que representa al dataset. De manera similar a la anterior, se ha programado una función `sample_ds_ffd` que permite visualizar nueve elementos del dataset creado, tal y como muestra la Figura 2.16. Esta es una de la manera más común de crear datos nuevos, siendo alguna de las más novedosas las arquitecturas GAN. Están formadas por dos redes, una capaz de crear imágenes y otra capaz de distinguir entre imágenes reales y generadas, y transmitir dicho conocimiento a la primera red, de manera que una intente “engañar” a la otra [38].

Contando ahora con el dataset original y el modificado, la técnica del aumento de datos se puede aplicar de dos formas. La primera de ellas es crear un modelo y entrenar únicamente con el dataset modificado. Esto puede dar una mayor capacidad de generalización al modelo al mostrar imágenes más diferentes de objetos similares. La segunda de ellas consiste en entrenar el modelo con el dataset original, y después con el dataset modificado (sin cambiar qué imágenes pertenecen a los conjuntos de entrenamiento, validación, y test en cada dataset). Esta puede dar mejores resultados, pues tiene más observaciones y el modelo puede de ver el mismo objeto “de diferentes formas”. Sin embargo hay que tener cuidado con esta segunda opción, pues podría conducir a situaciones de sobreajuste.

2.2.5. Evaluación de los modelos

Si bien gracias a las gráficas que TensorBoard proporciona es posible hacerse una idea de la calidad que tendrán las predicciones de un modelo, no son suficientes. Será entonces el momento de presentar al modelo una serie de imágenes que nunca haya visto para poder evaluar la calidad de sus predicciones mediante una serie de métricas y valores estadísticos. Este conjunto de imágenes que el modelo no ha recibido hasta el momento, es el denominado conjunto de test.

Para calcular estas métricas en Python, se va a utilizar la librería Scikit-learn, ya que contiene un conjunto de métodos con los que calcular y visualizar la mayoría de métricas empleadas en machine learning.



Figura 2.16: Visualización de ejemplo de un dataset aplicando aumento de datos

Además, las predicciones sobre los conjuntos de test quedarán representadas mediante dos matrices, Y_{matrix} y Y_{score} . La primera de ellas es una matriz $n \times 3$ que contiene para cada observación su etiqueta real, la predicha, y con qué probabilidad se le asigna. La segunda, contiene las probabilidades de cada observación de pertenecer a cada clase, por tanto es de dimensiones $n \times c$.

$$Y_m = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0,75 \\ 2 & 2 & 0,7 \\ 3 & 1 & 0,97 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 1 & 0,87 \end{pmatrix} \quad Y_s = \begin{pmatrix} 0,75 & 0,07 & 0,01 & 0,17 \\ 0,15 & 0,01 & 0,7 & 0,14 \\ 0,02 & 0,97 & 0,01 & 0,01 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0,05 & 0,87 & 0,01 & 0,08 \end{pmatrix}$$

Dependiendo si el problema en cuestión es de regresión o clasificación, se deben utilizar unas métricas u otras. Debido a que se desea evaluar la calidad de una clasificación, se han elegido las siguientes.

Matriz de confusión

La matriz de confusión muestra en el caso de clasificación binaria, los verdaderos positivos, verdaderos negativos, falsos positivos, y falsos negativos, mientras que en el caso de clasificación no binaria, en general la relación entre las etiquetas reales de cada observación y las que el modelo le ha asignado [39]. De manera muy visual se puede observar la cantidad de ejemplos de cada clase (pudiendo ver si se encuentran desbalanceadas), cuántos han sido clasificados correctamente, cuántos no, y en general entre qué clases suele confundirse más el modelo.

En la Figura 2.17 se observan las matrices de confusión de las cuatro situaciones descritas anteriormente. El elemento a_{ij} representa la cantidad de observaciones de la clase C_i que han sido clasificadas como C_j (a partir de ahora, \hat{C}_j). La situación ideal se da cuando en el caso de que $i \neq j$, entonces $a_{ij} = 0$, o lo que es lo mismo, que solo haya valores en la diagonal principal, pues a todos se les estaría asignando la clase correcta. Además, en esta representación gráfica sería deseable que todos los elementos de dicha diagonal tuviesen el mismo color, pues la situación actual describe un desbalanceo entre las clases. Se ve claramente que al aplicar transfer learning (Figuras 2.17b y 2.17d) se obtienen resultados mucho mejores que al entrenar el

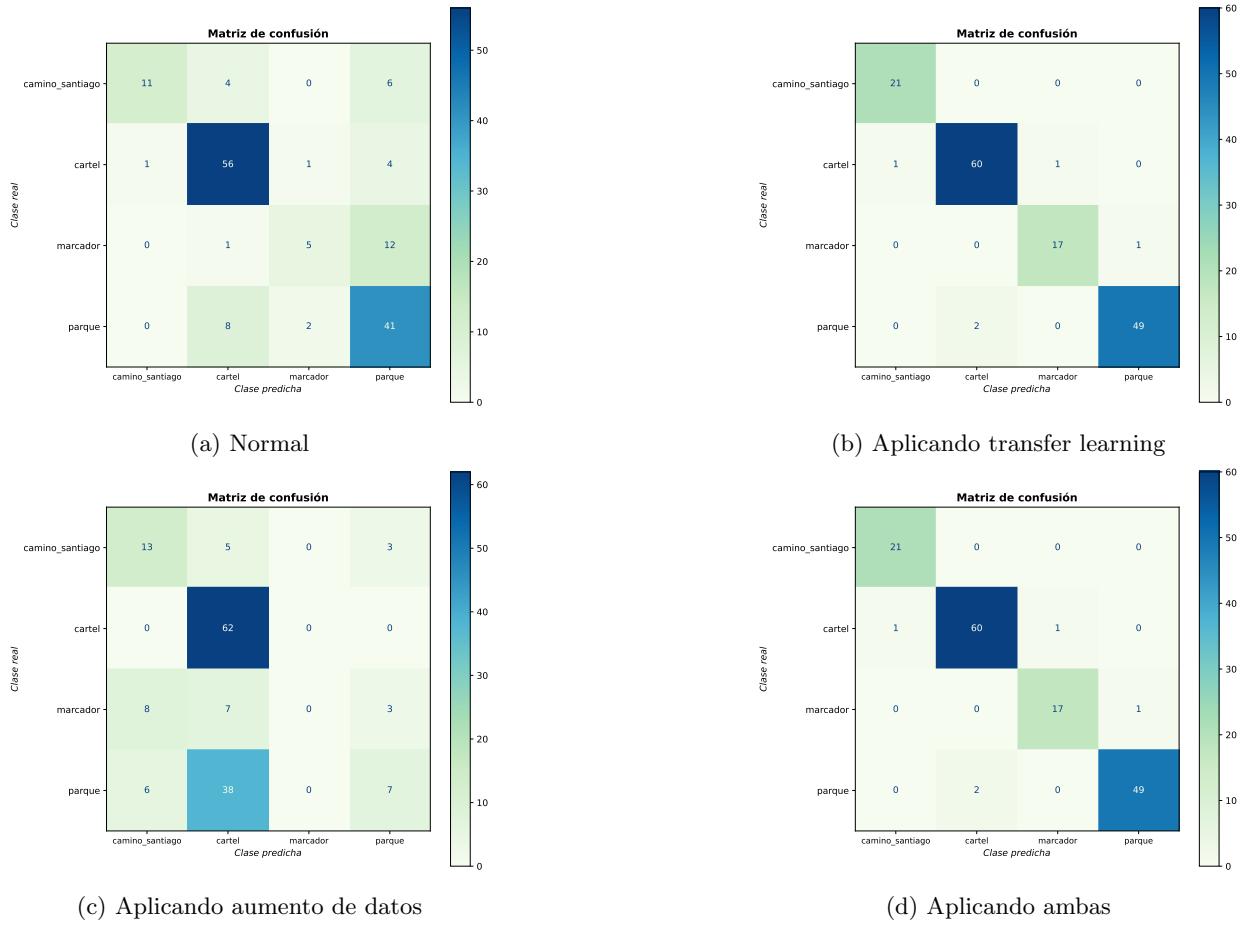


Figura 2.17: Matrices de confusión

modelo desde cero, tal y como las curvas de TensorBoard parecían indicar, pues la cantidad de malas clasificaciones es muy pequeña. La diferencia en dicho caso entre usar aumento de datos o no, no es muy significativa.

Para poder calcular la matriz de confusión, se ha utilizado la función `confusion_matrix` de Scikit-learn, que recibe como parámetros un vector con las clases reales de cada observación, y otro con las que el modelo les ha asignado. Mediante la función `ConfusionMatrixDisplay` se puede ver de manera gráfica la matriz (Figura 2.17). Con diferentes parámetros se pueden cambiar los colores e incrustar código L^AT_EX para modificar los textos. Se ha codificado la función `matriz_confusion` que recibe el dataset y Y_m , y muestra el gráfico con la configuración personalizada.

Precisión, sensibilidad, y F_1 -score

Si bien la matriz de confusión permite mostrar de manera visual la calidad de las clasificaciones, es conveniente calcular algunos valores [40] a partir de esta matriz que permitan visualizar de manera numérica dichas calidades. La primera de ellas conocida como **precisión** (\mathcal{P}), y puede entenderse como la probabilidad de que un elemento que etiquetado como C_i , realmente pertenezca a dicha clase.

$$\mathcal{P} = P(C_i | \hat{C}_i) = \frac{P(C_i \cap \hat{C}_i)}{P(\hat{C}_i)}$$

La siguiente se denomina **sensibilidad** (o recuerdo, \mathcal{R}) e indica la probabilidad de que un elemento de la clase C_i , se clasifique como tal.

$$\mathcal{R} = P(\hat{C}_i|C_i) = \frac{P(\hat{C}_i \cap C_i)}{P(C_i)}$$

En resumen y en términos de probabilidad condicionada, \mathcal{P} puede entenderse como una probabilidad a posteriori (cómo de bien ha clasificado el modelo), mientras que \mathcal{R} puede entenderse como una probabilidad a priori (cómo de bien clasificaría el modelo). Es frecuente calcular la media armónica de estos dos valores para obtener un único valor que evalúe la calidad de clasificación del modelo, comúnmente llamada F_1 .

$$F_1 = \frac{2}{\mathcal{P}^{-1} + \mathcal{R}^{-1}}$$

Para calcular estos valores, se ha hecho uso de la función `classification_report` de Scikit-learn, que muestra en una tabla estos valores para cada clase, junto con las medias de dichos valores. En situaciones de clases desbalanceadas como es esta, es conveniente mirar las medias ponderadas (`weighted avg`) para que malos resultados en clases con pocos elementos contribuyan de manera proporcional al resultado final.

$$\bar{\mathcal{P}} = \sum_{i=1}^n P(C_i)P(C_i|\hat{C}_i) \quad \bar{\mathcal{R}} = \sum_{i=1}^n P(C_i)P(\hat{C}_i|C_i)$$

	precision	recall	f1-score	support		precision	recall	f1-score	support
camino_santiago	0.917	0.524	0.667	21	camino_santiago	0.955	1.000	0.977	21
cartel	0.812	0.903	0.855	62	cartel	0.968	0.968	0.968	62
marcador	0.625	0.278	0.385	18	marcador	0.944	0.944	0.944	18
parque	0.651	0.804	0.719	51	parque	0.980	0.961	0.970	51
accuracy			0.743	152	accuracy			0.967	152
macro avg	0.751	0.627	0.656	152	macro avg	0.962	0.968	0.965	152
weighted avg	0.750	0.743	0.728	152	weighted avg	0.967	0.967	0.967	152

	(a) Normal					(b) Aplicando transfer learning			
	precision	recall	f1-score	support		precision	recall	f1-score	support
camino_santiago	0.481	0.619	0.542	21	camino_santiago	0.955	1.000	0.977	21
cartel	0.554	1.000	0.713	62	cartel	0.968	0.968	0.968	62
marcador	0.000	0.000	0.000	18	marcador	0.944	0.944	0.944	18
parque	0.538	0.137	0.219	51	parque	0.980	0.961	0.970	51
accuracy			0.539	152	accuracy			0.967	152
macro avg	0.393	0.439	0.368	152	macro avg	0.962	0.968	0.965	152
weighted avg	0.473	0.539	0.439	152	weighted avg	0.967	0.967	0.967	152

(c) Aplicando aumento de datos

(d) Aplicando ambas

Figura 2.18: Precisión, sensibilidad, y F_1

En las tablas obtenidas en la Figura 2.18, puede verse como los valores obtenidos corresponden con las situaciones que mostraban las matrices de confusión, siendo los mejores en aquellas que se aplica transfer learning al tener valores mayores, y que a pesar de tener clases desbalanceadas (se puede observar en la columna de `support`), los valores entre clases son similares (en dichos casos), obteniendo medias ponderadas similares a las calculadas sin ponderar. En los casos más negativos, se observan valores más bajos y comportamientos diferentes dependiendo de la clase.

Curvas ROC y AUC

Otra manera de evaluar la calidad de un clasificador binario es mediante las conocidas como curvas ROC (Receiver Operating Characteristic), que representan en el espacio $[0, 1] \times [0, 1]$ los falsos positivos frente a los verdaderos positivos [41]. Es más sencillo de entender y representar en términos de probabilidad condicionada, representando $P(\hat{C}_i|\neg C_i)$ frente a $P(\hat{C}_i|C_i)$. Para determinar entre dos curvas cuál describe

un mejor clasificador, lo que se hace es elegir aquella con un AUC (Area Under Curve) mayor. Si se toma la curva ROC como una función $r : [0, 1] \rightarrow [0, 1]$, entonces el AUC se puede entender como

$$\mathcal{A} = \int_0^1 r(x) dx,$$

siendo $\mathcal{A} = 1$ el mejor de los valores posibles. En general, cuanto mayores sean los valores del eje y para valores muy pequeños del eje x , mejor será el clasificador, mientras que cuando la curva ROC se aproxime a la función $f(x) = x$, más parecido será el modelo a hacer las clasificaciones al azar. En los casos que no son de clasificación binaria como este, no existe como tal una clase positiva y una negativa. Lo que se hace en su lugar es una de las siguientes aproximaciones [42].

- OVO (One Versus One): para cada clase C_i y C_j con $i \neq j$, se toma una de ellas como clase positiva y la otra como negativa, y se calcula la curva ROC y AUC asociado, disponiendo de un total de $\binom{n}{2}$ o $n(n - 1)$ curvas según el autor o la librería utilizada (depende de considerar o no cada elemento de la pareja como positiva y negativa, y viceversa, teniendo que $2\binom{n}{2} = n(n - 1)$).

$$\mathcal{A}_{\text{OVO}} = \frac{1}{n(n - 1)} \sum_{i=1}^n \sum_{j \neq i}^n P(C_i) \mathcal{A}(C_i, C_j)$$

- OVR (One Versus Rest): para cada clase C_i se toma como clase positiva, y el resto de las clases como una única clase negativa. Se calcula la correspondiente curva ROC y AUC asociado, obteniendo un total de n curvas.

$$\mathcal{A}_{\text{OVR}} = \sum_{i=1}^n P(C_i) \mathcal{A}(C_i, \neg C_i)$$

Es muy útil visualizar en una misma gráfica las diferentes curvas ROC de una de estas técnicas, sin embargo Scikit-learn no cuenta con ninguna función que haga esto directamente, sólo muestra el valor final. Por ello, se ha codificado una función `roc_auc_ovr` que recibe Y_m , Y_s , y el nombre de las clases, y devuelve un gráfico en el que se ven las curvas ROC OVR de cada clase, los AUC de cada una, y el global. Para ello se ha hecho uso de la función `roc_curve`, que calcula la curva, `auc`, que calcula el AUC, y `RocCurveDisplay` que muestra un gráfico de la curva ROC. En la Figura 2.19 se muestran los cuatro resultados para cada uno de los casos, teniendo de nuevo que para las variantes de las Figuras 2.19b y 2.19d se observan los mejores resultados sin haber casi diferencia entre ambos.

Como resumen de esta parte, se puede concluir que el entrenamiento de una red convolucional desde cero es un proceso complejo y que requiere de una cantidad enorme de datos, que en los casos en los que no se dispone de ellos, conduce a resultados negativos, siendo necesario aplicar la técnica de transfer learning. A pesar de haber visto su gran eficacia, se va a realizar una prueba más.

El dataset empleado, contenía imágenes de diferentes partes de España, por lo que el modelo estaba viendo variantes de cada tipo de objeto. Lo que se va a hacer ahora es separar dicho dataset de manera que contenga únicamente en el conjunto de test imágenes de la ciudad de Guadalajara. Al ser pocas, el experimento no será muy representativo, pero permitirá probar la eficacia de la red generalizando conceptos. Para ello se ha utilizado el mismo modelo que se ha utilizado en el caso de transfer learning (entrenando de nuevo los parámetros desde cero para evitar hacer predicciones de una imagen vista durante el entrenamiento).

Como se observa en la Figura 2.20, tras haber entrenado el modelo sin usar imágenes de objetos de Guadalajara, y enseñarle uno como por ejemplo este hito del Camino de Santiago, la red está casi segura que de uno de ellos se trata, a pesar de que sea completamente distinto a los que ha visto durante el entrenamiento con el aspecto típico de Galicia.

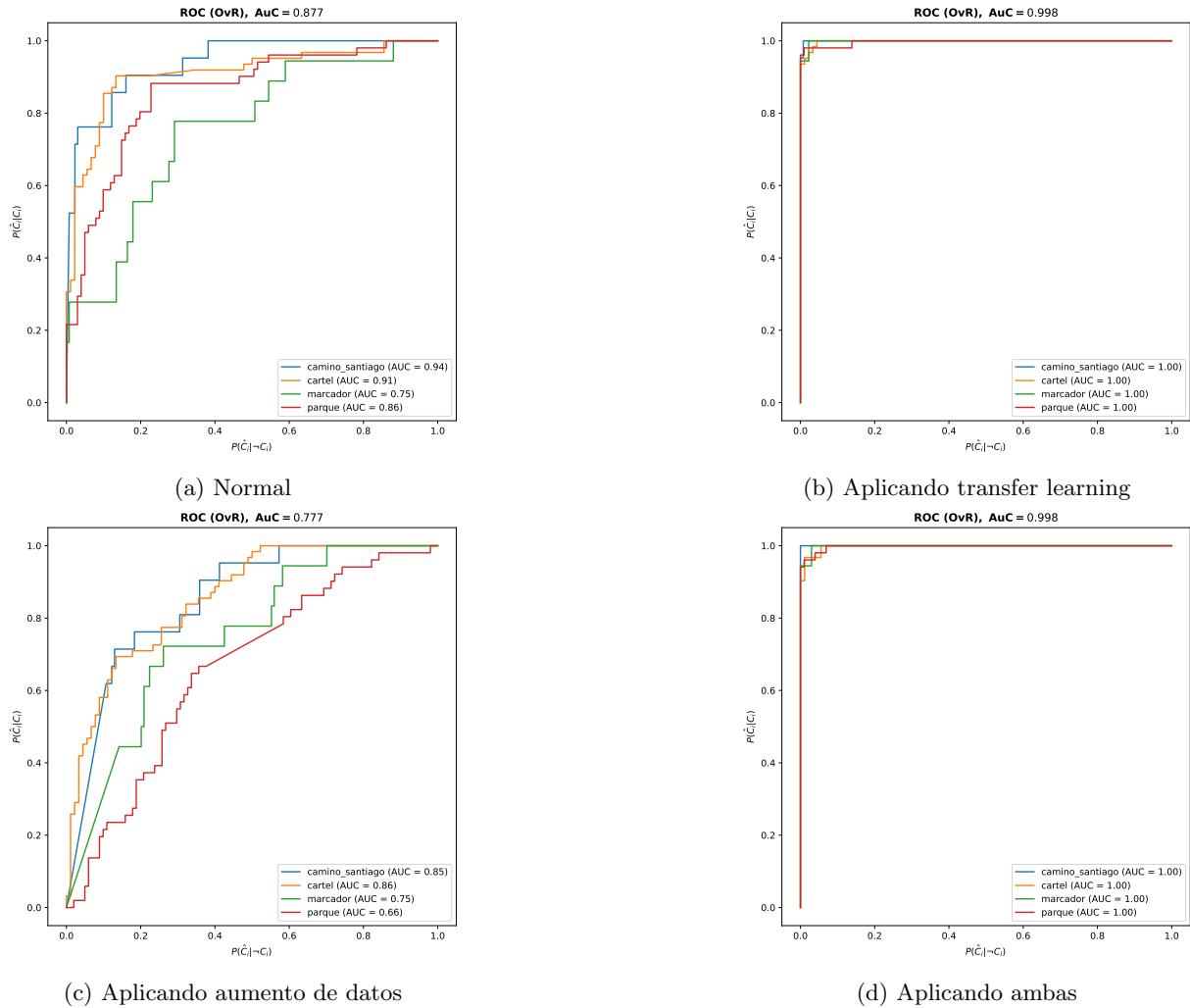


Figura 2.19: Curvas ROC



Figura 2.20: Capacidad de generalización de la red, predicción en Galicia y Guadalajara

2.2.6. Detección de clases desconocidas

Si bien hasta el momento se habían supuesto las condiciones ideales de que los modelos sólo recibían imágenes que contenían uno de los cuatro elementos seleccionados, en el problema que se trata de resolver aun habiendo entrenado un modelo para un número grande de clases, una persona podría enviar un punto de interés que no perteneciese a ninguna de las clases supuestas. En dicho caso, se necesitaría detectar que la imagen no debería pertenecer a ninguna de las clases que el modelo conoce, y descartar para ser evaluada de otra manera.

Este problema es ampliamente conocido como *open set recognition*, y existen diversas formas de abordarlo. En esta sección se va a demostrar la eficacia de dos de las más populares. En ambos casos se necesitan recopilar datos de imágenes que no pertenezcan a ninguna de las clases. Para esto, también se han tomado imágenes que superaron el proceso de valoración pero que difieren de las clases seleccionadas para este proyecto, como por ejemplo, grafitis, iglesias, fuentes, pistas deportivas, etc.

La primera de las aproximaciones consiste en tratar el resto de clases desconocidas como una única clase desconocida. Al dataset utilizado en los casos anteriores se ha añadido una clase **resto** que contiene diversas imágenes mezcladas. Utilizando el mejor de los modelos anteriores (aplicando transfer learning), y teniendo en cuenta que no todas las imágenes de la misma clase guardan relación entre sí, se han obtenido resultados realmente positivos, puesto que el valor del F_1 es de 0,956, casi no hay clasificaciones incorrectas en la matriz de confusión (Figura 2.21b), y las curvas ROC son casi perfectas (Figura 2.21c).

	precision	recall	f1-score	support
camino_santiago	0.875	1.000	0.933	21
cartel	0.983	0.952	0.967	62
marcador	1.000	0.944	0.971	18
parque	0.961	0.961	0.961	51
resto	0.931	0.931	0.931	29
accuracy			0.956	181
macro avg	0.950	0.958	0.953	181
weighted avg	0.958	0.956	0.956	181

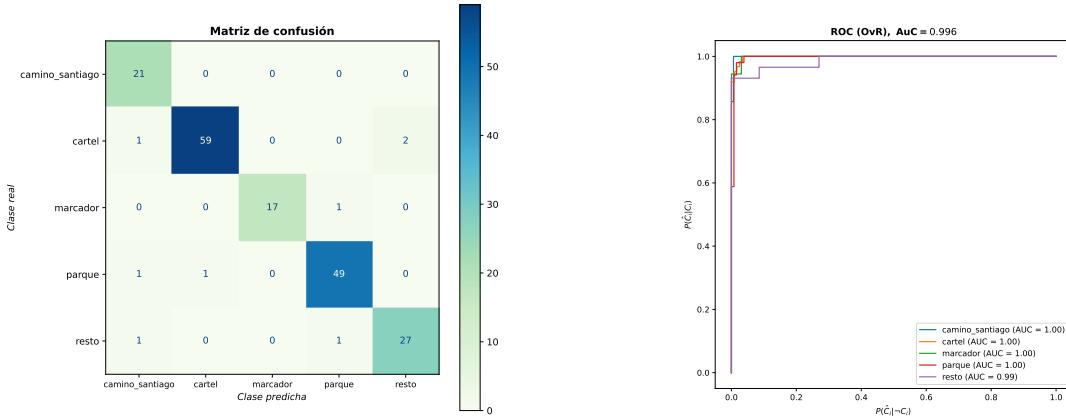
(a) Precisión, sensibilidad, y F_1 

Figura 2.21: Métricas en clasificación con clase desconocida

La segunda consiste en utilizar un primer modelo que permita distinguir entre imágenes de las clases

conocidas y las que no. Para ello se utiliza un clasificador binario con las clases `resto` y `no_resto`, y un modelo que sea capaz de distinguir entre las clases originales. Para realizar esto, ambos modelos siguen la arquitectura del mejor modelo de los anteriores, adaptando el número de clases. Se puede visualizar un resumen de esta situación en la Figura 2.22.

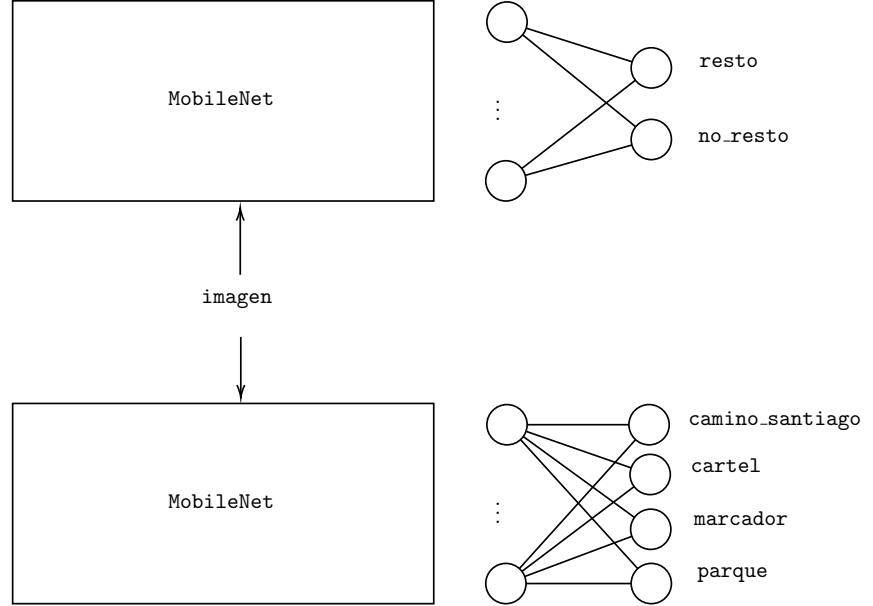


Figura 2.22: Arquitectura de clasificación con clases desconocidas

En una primera aproximación podría parecer innecesario evaluar cada imagen en ambos modelos, pudiendo evaluar todas las imágenes en el clasificador binario, y aquellas que sean etiquetadas como `no_resto`, ser evaluadas por el segundo clasificador. Sin embargo, esto es incorrecto, pues para medir la calidad de la arquitectura en general se necesita hacer uso de una matriz Y_s (en este caso de dimensiones $n \times 5$) que contenga las probabilidades de pertenecer a cada clase, siendo dichas clases las C_i y R . Si hay una imagen que se etiqueta como R , se tienen $P(R)$ y $P(\neg R)$, pero no $P(C_i)$. Para obtener dichas probabilidades, se necesita hacer uso del segundo clasificador, teniendo en cuenta que las probabilidades que devuelve este son $P(C_i|\neg R)$, tal y como se describe en la Figura 2.23.

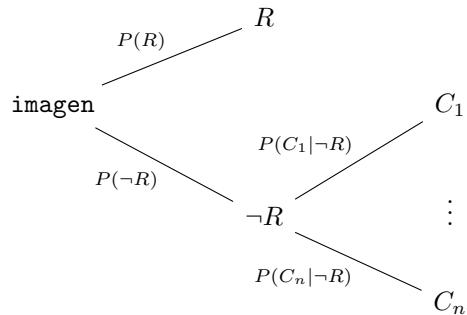


Figura 2.23: Diagrama de probabilidades

Una vez se dispone de $P(R)$, $P(\neg R)$, y $P(C_i|\neg R)$, basta aplicar el Teorema de la probabilidad total para calcular los $P(C_i)$, obteniendo que $P(C_i) = P(C_i|\neg R)P(\neg R)$. Para calcular entonces la matriz Y_s necesaria, basta con tomar las matrices $Y_s^{(1)}$ y $Y_s^{(2)}$ (siendo cada una la obtenida por cada uno de los clasificadores), y

corregir las probabilidades de la segunda matriz con la segunda columna de la primera matriz y concatenarla con la primera columna de la primera matriz, pudiéndose traducir esto a $Y_s = \left(\text{diag} \left(Y_{s_{i1}}^{(1)} \right) Y_{s_{i2}}^{(2)} \middle| Y_{s_{i2}}^{(1)} \right)$, es decir,

$$Y_s^{(3)} = \begin{pmatrix} P_1(\neg R) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & P_2(\neg R) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & P_n(\neg R) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_1(C_1) & P_1(C_2) & \cdots & P_1(C_4) \\ P_2(C_1) & P_2(C_2) & \cdots & P_2(C_4) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ P_n(C_1) & P_n(C_2) & \cdots & P_n(C_4) \end{pmatrix}$$

$$Y_s = \left(Y_s^{(3)} \middle| Y_{s_{i2}}^{(1)} \right).$$

Por otro lado, ha de tenerse en cuenta que el primer clasificador da las etiquetas 0 y 1, y el segundo del 0 al 3, por lo que también se crea una matriz Y_m en función de las matrices $Y_m^{(1)}$ y $Y_m^{(2)}$ para tener etiquetas del 0 al 4. Con ambas matrices construidas se pueden evaluar los resultados en la Figura 2.24, pudiendo observar que también son muy positivos e incluso similares a los obtenidos por la arquitectura anterior. Finalmente añadir, que es importante que ambos modelos se entrenen con las mismas imágenes de manera que el rendimiento entre ambos sea similar, pues si por ejemplo el primer clasificador es malo distinguiendo entre R y $\neg R$, entonces dará igual cómo de bueno sea el segundo clasificador separando entre las otras cuatro clases, y viceversa. Como conclusión, podría elegirse cualquiera de las dos, aunque a efectos prácticos la primera es más interesante al ser más simple y necesitar un único entrenamiento.

	precision	recall	f1-score	support
camino_santiago	0.913	1.000	0.955	21
cartel	0.967	0.952	0.959	62
marcador	0.941	0.889	0.914	18
parque	0.942	0.961	0.951	51
resto	0.929	0.897	0.912	29
accuracy			0.945	181
macro avg	0.938	0.940	0.938	181
weighted avg	0.945	0.945	0.945	181

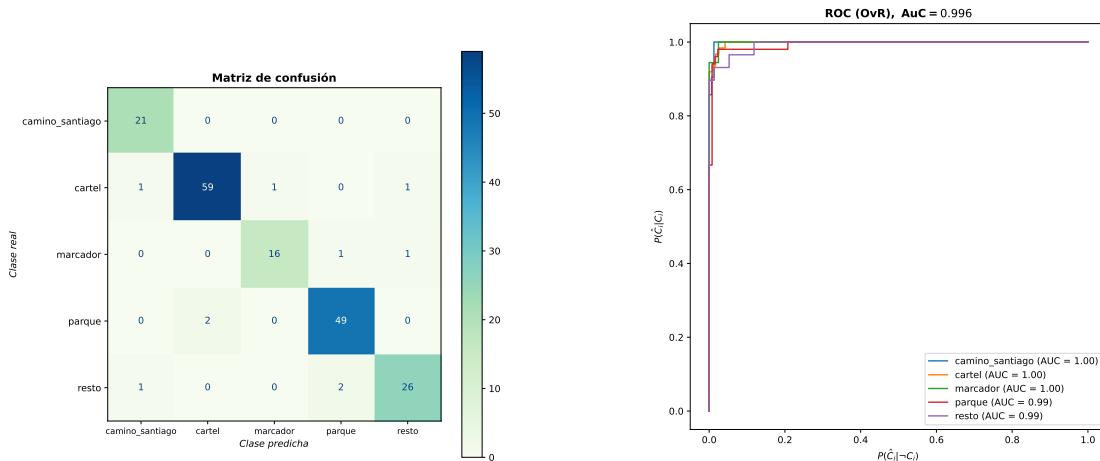
(a) Precisión, sensibilidad, y F_1 

Figura 2.24: Métricas en clasificación con clase desconocida (doble modelo)

2.3. Clasificación de imágenes mediante transformers multimodales

El objetivo de esta sección será abordar de nuevo el problema resuelto anteriormente, ofreciendo una mejor solución al dejar abierta la posibilidad de trabajar con textos asociados a las imágenes, y no necesitar conocer el número de clases del dataset, tal y como se mostró en el marco teórico. En cuanto a los datos, se reutilizarán aquellos obtenidos del proceso ETL anterior, volcando todas las imágenes en un mismo directorio.

De manera resumida, la solución está compuesta en primer lugar por un transformer multimodal, capaz de extraer conceptos o ideas representadas en diferentes modalidades, como textos, imágenes, o vídeos, y representarlos en un espacio común, para posteriormente hacer uso de un algoritmo de clasificación no supervisada que permita encontrar el número de clases óptimas, y clasificar los embeddings generados por el transformer. En la Figura 2.25 se muestra un diagrama de cómo deberían ser los embeddings que genera un modelo de este tipo. Si \mathbf{u} es el embedding de *rey*, \mathbf{v} el de *mujer*, y \mathbf{w} el de *reina*, entonces se espera que $\mathbf{u} + \mathbf{v} \approx \mathbf{w}$. De la misma manera sucedería para una imagen o vídeo que represente los mismos conceptos.

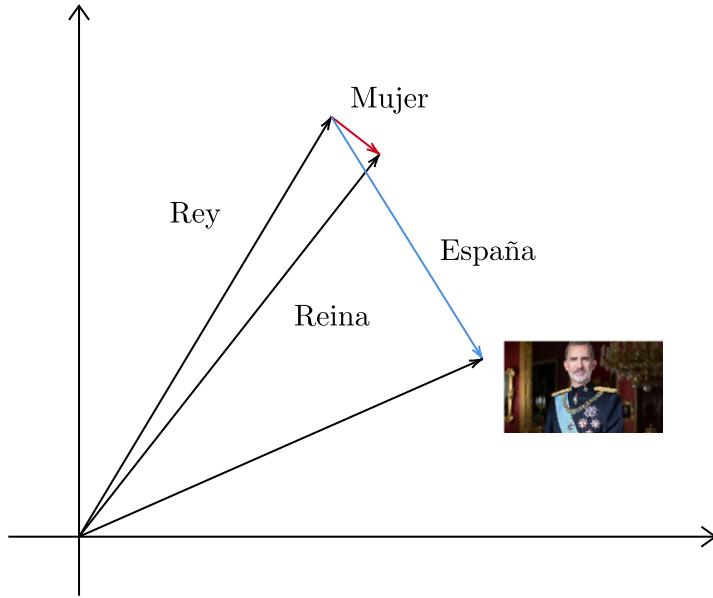


Figura 2.25: Embeddings de un transformer multimodal

2.3.1. Generación de embeddings con Vertex AI

Para abordar esta solución, la primera de las tareas es disponer del modelo capaz de extraer las ideas de las diferentes modalidades de información. Siendo una de las desventajas de los transformers el enorme volumen de datos de entrenamiento que necesitan para lograr un buen rendimiento, y los pocos datos que se poseen en este caso, no es razonable construir y entrenar un transformer desde cero. Por ello, se ha optado por utilizar un modelo previamente entrenado con grandes volúmenes de datos y que tiene un excelente rendimiento en tareas de esta índole. Dentro de los servicios que ofrece Google Cloud, su plataforma Vertex AI contiene una gran variedad de modelos, cada uno orientado a ciertos tipos de tareas. En concreto, se ofrece un modelo llamado `multimodalembedding` recomendado para tareas de clasificación y búsquedas semánticas de textos, imágenes, y vídeos [22]. Dicho modelo sigue la arquitectura de un transformer multimodal codificador, es decir, recibe textos, imágenes, y vídeos, y es capaz de entregar un vector llamado embedding capaz de representar las ideas que aparecen en las entradas dadas.

La manera de comunicarse con el modelo es vía API. En la documentación se especifica que para el caso de las imágenes deben tener una resolución (máxima) de 512×512 píxeles y que deben enviarse codificadas en Base64 o el URI (Uniform Resource Identifier) de la imagen en caso de tenerla almacenada en un bucket de Google Cloud Storage. Para el caso de vídeo no se entrará en detalle pues no se utilizará en este proyecto, pero se puede generar un embedding por cada x segundos de vídeo ignorando el contenido del audio. Además, debe estar almacenado en un bucket. En este caso se tienen almacenadas las imágenes en local, y para realizar esta tarea en Python se hace uso de la biblioteca Pillow para redimensionar las imágenes, `base64` para codificar la imagen redimensionada a Base64, y `requests` para realizar la llamada. Según indica la documentación, el cuerpo de la llamada HTTP (Hypertext Transfer Protocol) POST, debe contener un fichero JSON (JavaScript Object Notation) que sigue esta estructura,

```
{
  "instances": [
    {
      "image": {
        "bytesBase64Encoded": "/9j/4AAQSkZJRgABAQAA...."
      },
      "text": "Un parque infantil con columpios...."
    }
  ]
}
```

para recibir como respuesta otro fichero JSON que tiene el siguiente aspecto.

```
{
  "predictions": [
    {
      "textEmbedding": [
        0.010477379,
        [...]
        -0.0169572588,
        -0.00472954148
      ],
      "imageEmbedding": [
        0.00262696808,
        [...]
        0.011650892,
        -0.00452344026
      ]
    }
  ]
}
```

En el JSON que se incluye en el cuerpo de la llamada, se puede elegir el número de dimensiones del embedding. Si no se indica nada, los embeddings tienen 1408 dimensiones. Además, en la cabecera de la llamada se debe indicar el token, que se obtiene en cada llamada mediante el CLI con ayuda del comando `gcloud auth print-access-token`, ya que por seguridad cambia periódicamente. Si la llamada ha sido exitosa, se recibe el código HTTP 200 en la respuesta, y en caso contrario ha sucedido algún error. Además, se especifica que la cantidad máxima de llamadas por minuto y proyecto es de 120, que al realizar el siguiente cálculo se obtiene que no deben superarse las dos llamadas por segundo.

$$\left\lfloor \frac{120 \text{ llamadas}}{60 \text{ segundos}} \right\rfloor = 2 \text{ llamadas/segundo}$$

El tiempo que transcurre desde que se realiza una llamada hasta que se obtiene la respuesta oscila entre 0,5 y 1 segundos, por lo que el pausando el proceso 0,5 segundos tras cada llamada se evita superar el límite fijado. Al superar el límite, se recibe el código HTTP 429. Finalmente, se almacenan todos los ficheros JSON

de las respuestas en disco, evitando así consumir créditos y ahorrar tiempo en futuras ejecuciones con el mismo dataset. Una vez se han calculado el embedding correspondiente a cada imagen del dataset, es de utilidad crear un dataframe de Pandas que ayude a estructurar toda la información relativa a cada imagen obtenida hasta el momento para trabajar de manera más cómoda. En la Tabla 2.1 se muestra un extracto de este dataframe.

	imagen	embedding	clase.original
447	marcador_4.jpeg	[0.01137386 0.04624871 -0.0066354 ... -0.01498985 0.02460321 -0.01014824]	2
825	resto_43.jpeg	[-0.02611475 0.03930366 -0.04287809 ... -0.00899699 -0.02281859 0.03565532]	4
466	marcador_57.jpeg	[-0.01203791 0.03773741 0.01814894 ... 0.00186137 -0.01156622 -0.02614616]	2
611	parque_200.jpeg	[0.01670864 0.01111185 0.0110638 ... 0.01473893 0.02344143 -0.01979814]	3
54	camino_santiago_53.jpeg	[-0.01857939 0.04579853 0.01004092 ... -0.00423306 0.02744901 -0.0137055]	0

Tabla 2.1: Ejemplo de dataframe

Para reescalar las imágenes se ha codificado la función `reescalar_img`; para generar los archivos JSON con las imágenes en Base64, la función `img_json`; y para realizar las peticiones al modelo, la función `get_embedding`.

2.3.2. Clasificación no supervisada de embeddings

Con motivo de ilustrar la salida del transformer, lo ideal es mostrar los embeddings en el espacio, pues si ha sido capaz de detectar diferencias y similitudes entre las imágenes, estas deberán verse reflejadas también en los embeddings. Visualizar vectores de 1408 componentes en el plano o espacio no es posible “directamente”, pero gracias a algoritmos como PCA (Principal Component Analysis) o t-SNE (t-distributed Stochastic Neighbor Embedding), esto se hace posible. De manera intuitiva, estos algoritmos se comportan como una aplicación $\mathbb{R}^{1408} \rightarrow \mathbb{R}^2$, intentando perder la mínima cantidad de información al realizar este cambio de dimensiones. No se entrará en detalle del funcionamiento de los algoritmos, pues no influyen en el resultado, simplemente permiten visualizar la situación. En la Figura 2.26 se observa el resultado obtenido por ambos algoritmos, distinguiendo claras nubes de puntos.

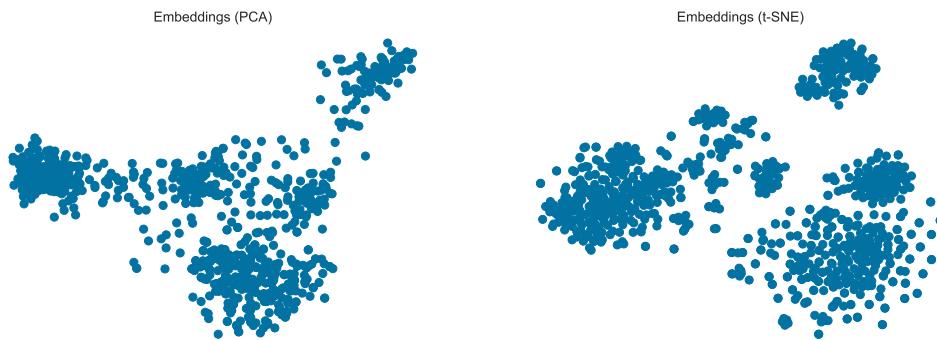


Figura 2.26: Embeddings en \mathbb{R}^2 mediante PCA y t-SNE

Es en este momento cuando se puede lanzar un algoritmo de clasificación no supervisada como k -medias o el de clustering jerárquico aglomerativo para clasificar los embeddings en k clases sin necesidad de tener otro dataset de entrenamiento. En este caso mediante el conocimiento del dataset se sabe que k debe ser igual a 5. Por el contrario, si se dispone de millones de imágenes, no es viable revisar una a una para determinar el valor de k . Para resolver este problema, se puede utilizar el método del codo, explicado en el marco teórico. Tal y como se observa en la Figura 2.27, se obtiene $k = 5$, de manera idéntica a lo que se conocía mediante la experiencia en el dataset.

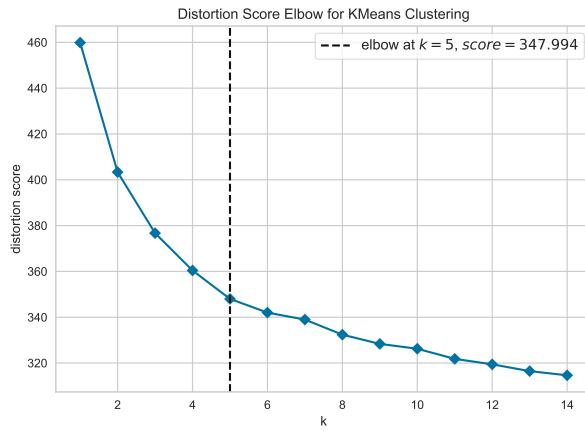


Figura 2.27: Cálculo del k óptimo mediante el método del codo

Tras utilizar este valor de k calculado, se pueden lanzar los algoritmos k -means y CJA con este valor, y colorear los embeddings de la Figura 2.26 para visualizar los clusters detectados por ambos algoritmos. En las Figuras 2.28 y 2.29 se observa cómo aparentemente ambos algoritmos han sido capaces de separar las nubes de puntos. Podría parecer que algunas imágenes están más cerca del centro de un cluster que del que tienen asignado, pero es importante recordar que el proceso de clustering se ha realizado en un espacio de 1408 dimensiones, mientras que estas figuras describen una situación similar en \mathbb{R}^2 . En el hipotético caso de poder visualizar \mathbb{R}^{1408} , sería más evidente la asignación.

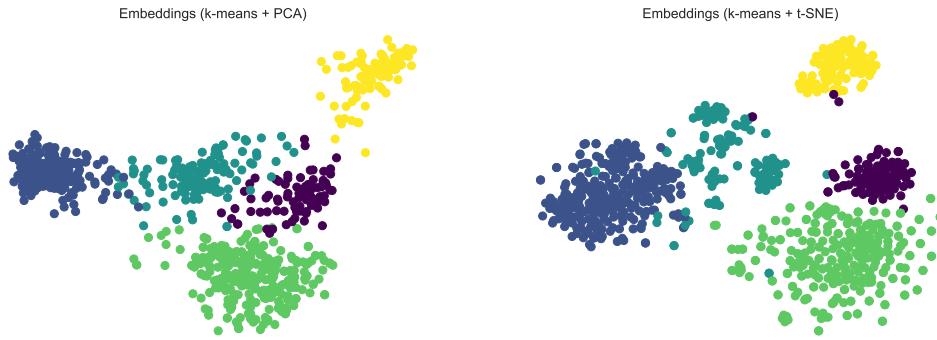


Figura 2.28: Clusters calculados con k -means

Con motivo de poder ilustrar de manera conjunta el resultado del cálculo de embeddings y la clasificación de estos, se muestran en la Figura 2.30 los embeddings representados con ayuda de t-SNE y los clusters calculados por k -means, con la diferencia que esta vez los embeddings se sustituyen por sus imágenes correspondientes, y aparecen enmarcadas con el color de su cluster. Con motivo de facilitar la visualización de los clusters, se ha dibujado un círculo de radio el percentil 90 de las distancias al centroide (para evitar que outliers ensucien el dibujo), y centrado en este.

En esta situación es mucho más fácil visualizar el resultado obtenido. Se puede observar cómo el transformer ha colocado próximas entre sí las imágenes de cada una de las cuatro clases originales. También ha sido capaz de colocar próximas entre sí a las imágenes que pertenecen a la clase resto, viendo cómo aparecen juntos cada uno de los tipos de objetos que conforman dicha clase, murales, piscinas y fuentes, monumentos, recintos deportivos, esculturas religiosas, etc. Además, hay casos en los que ha ubicado alguna imagen entre

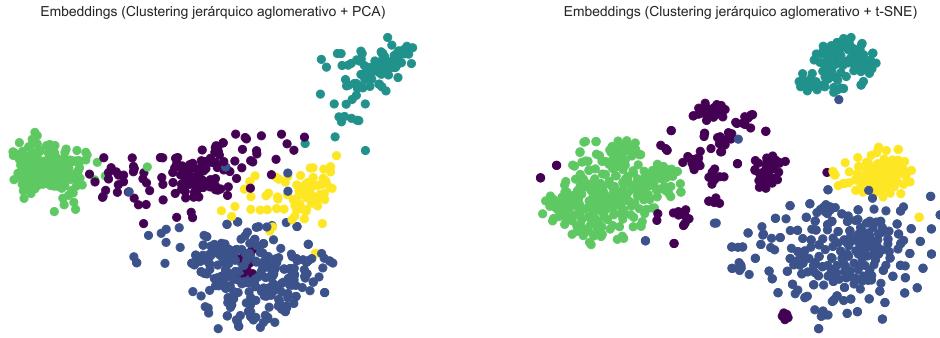


Figura 2.29: Clusters calculados con CJA

varios clusters bien diferenciados, como es el caso de un cartel que aparece entre el cluster de los carteles, el de los parques, y el de otros, en concreto cerca de los elementos deportivos. Pero esto no resulta ser desafortunado, pues al hacer zoom sobre dicha imagen se observa un cartel indicando las normas de un parque con máquinas deportivas. Finalmente, se observa que mediante los colores de los bordes, el algoritmo de clasificación no supervisada ha sido capaz de juntar en el mismo cluster imágenes similares.

2.3.3. Evaluación de la clasificación

Una vez calculadas las clases o clusters de cada imagen con los dos algoritmos propuestos, se añaden como columnas al dataframe con motivo de agilizar el trabajo de evaluar la calidad de las clasificaciones de embeddings. La Tabla 2.2 muestra un extracto. A la hora de realizar la evaluación de la clasificación de los embeddings pueden darse dos situaciones, conocer o no las clases reales. En este caso aprovechando que se conocen las reales, se han abordado ambas situaciones.

	imagen	embedding	clase_original	cluster_kmeans	cluster_ac
703	parque_60.jpeg	[-0.00671883 0.03548804 -0.00194949 ... 0.00585831 0.00977391 -0.03528883]	3	1	3
211	cartel_195.jpeg	[0.02073547 0.03421853 0.00191044 ... 0.01309193 0.00961536 0.01201134]	1	3	1
119	cartel_110.jpg	[-0.0244309 0.06386871 -0.03788822 ... 0.02500289 0.00204547 0.0219892]	1	3	1
673	parque_32.jpg	[-4.00937744e-04 5.35500422e-02 5.34671033e-03 ... 3.50007977e-05 1.66630223e-02 -5.72501449e-03]	3	1	3
669	parque_29.jpg	[0.00597429 0.03874445 -0.00310474 ... 0.01533214 0.037529 0.01157141]	3	1	3

Tabla 2.2: Dataframe con clusters calculados

Índice rand ajustado

En el caso en el que se conocen las clases reales, una de las métricas más populares es el ARI (Adjusted Rand Index) [43]. Se supone que se dispone de dos particiones del dataset original, $\mathcal{C} = \{C_1, C_2, \dots, C_r\}$ y $\mathcal{D} = \{D_1, D_2, \dots, D_s\}$, donde una de ellas es la generada por el algoritmo, y la otra es la original. Con ayuda de cada uno de estos conjuntos se construye la llamada matriz de contingencia, donde la entrada n_{ij} representa el valor de $|C_i \cap D_j|$. En la Figura 2.31 se observan las matrices de contingencia para los clusters generados por los dos algoritmos elegidos.

Estas matrices ayudan a dar una idea de la correspondencia entre los clusters originales y los calculados, observando los elementos que destacan por filas o columnas. Son el primer paso para calcular el ARI, pues sería erróneo pensar que se trata de una clasificación incorrecta el asignar una imagen al cluster i , cuando originalmente tenía asignado el cluster j , pues puede que sean clusters similares o incluso el mismo, pero que el algoritmo los haya nombrado de diferente manera. Para solucionar este problema, lo que se hace es trabajar con todas las posibles parejas del dataset, y comprobar si pertenecen a las mismas parejas de clusters en ambas particiones, dando lugar a los siguientes cuatro casos.



Figura 2.30: Imágenes y clusters

- $(u \in C_p \wedge v \in C_p) \wedge (u \in D_q \wedge v \in D_q)$
- $(u \in C_p \wedge v \in C_p) \wedge (u \in D_q \wedge v \notin D_q)$
- $(u \in C_p \wedge v \notin C_p) \wedge (u \in D_q \wedge v \in D_q)$
- $(u \in C_p \wedge v \notin C_p) \wedge (u \in D_q \wedge v \notin D_q)$

A partir de estos casos obtenidos de las matrices de contingencia, se construyen las matrices de confusión que se observan en la Figura 2.32, y que representan la misma idea que en la Sección 2.2.5. Se desea que el valor en los elementos de la diagonal principal sea máximo, pues representa el número A de acuerdos; y que sean mínimos el resto, pues representan el valor de desacuerdos D .

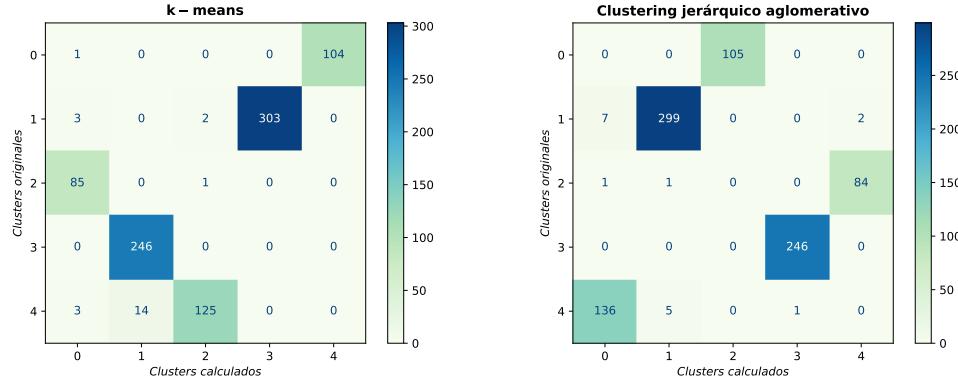


Figura 2.31: Matrices de contingencia

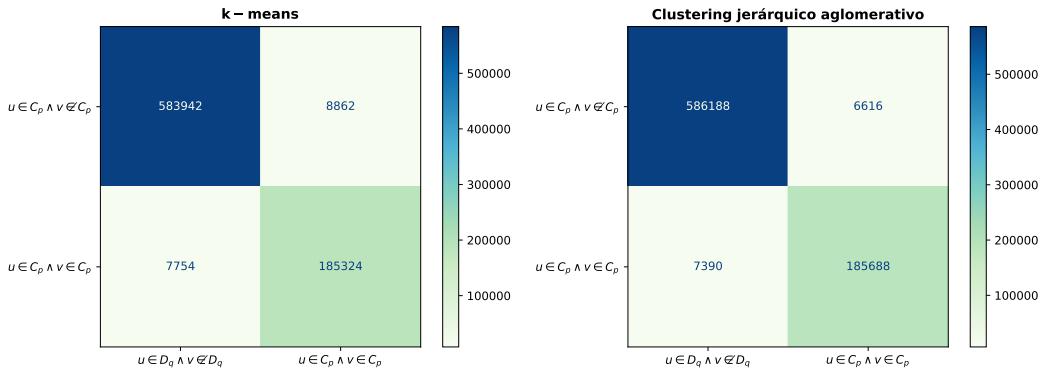


Figura 2.32: Matrices de confusión

En este punto se puede calcular el índice rand \mathcal{R}_I , que sería el equivalente a la precisión \mathcal{P} presentada en la Sección 2.2.5, pues se calcula como la tasa de acuerdos. En la siguiente ecuación se muestra su cálculo en base a la matriz de contingencia, donde $n_{i\cdot}$ representa la suma de las columnas de la fila i , y $n_{\cdot j}$ la suma de las filas de la columna j .

$$\mathcal{R}_I = \frac{A}{A + D} = \frac{\binom{n}{2} + 2 \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^s \binom{n_{ij}}{2} - \sum_{i=1}^r \binom{n_{i\cdot}}{2} - \sum_{j=1}^s \binom{n_{\cdot j}}{2}}{\binom{n}{2}}$$

Una vez conocido el valor del índice rand, es inmediato calcular su versión ajustada. Su misión es evitar un valor adecuado por particiones al azar, pues un valor alto de \mathcal{R}_I no necesariamente implica una buena calidad de clustering. Se podría por ejemplo, de manera aleatoria separar el dataset en dos clusters dos veces. Si el número de elementos del dataset es elevado, no sería raro observar que bastantes elementos aparecen en los mismos clusters en ambas particiones, lo que según el \mathcal{R}_I indicaría un buen clustering cuando probablemente no sea así. Se calcula de la siguiente manera.

$$\mathcal{R}_{A_I} = \frac{\mathcal{R}_I - E[\mathcal{R}_I]}{\max\{\mathcal{R}_I\} - E[\mathcal{R}_I]} = \frac{\sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^s \binom{n_{ij}}{2} - \binom{n}{2}^{-1} \sum_{i=1}^r \binom{n_{i\cdot}}{2} \sum_{j=1}^s \binom{n_{\cdot j}}{2}}{\frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^r \binom{n_{i\cdot}}{2} + \sum_{j=1}^s \binom{n_{\cdot j}}{2} \right) - \binom{n}{2}^{-1} \sum_{i=1}^r \binom{n_{i\cdot}}{2} \sum_{j=1}^s \binom{n_{\cdot j}}{2}}$$

Valores próximos a 1 indican un buen clustering, cercanos a 0 similar a hacerlo de manera aleatoria, y cercanos a -1 (en general menor que cero) peor que de manera aleatoria. Para la clasificación realizada con k -means se obtiene un ARI de 0,943, y con CJA 0,952. Ambos resultados son muy adecuados.

Homogeneidad, completitud, y V -measure

De manera similar que la F_1 -score relacionaba la precisión y la sensibilidad en el contexto de modelos de clasificación, en el caso de algoritmos de clustering en los que se conocen las clases reales es popular utilizar la V -measure, que indica cómo de bueno es el clustering realizado en función de la homogeneidad y completitud de los clusters. Dichos cálculos se basan en la entropía, entropía condicionada y entropía conjunta.

$$H(\mathcal{C}) = \sum_{i=1}^{|\mathcal{C}|} P(\mathcal{C}_i) \log_2(P(\mathcal{C}_i))$$

$$H(\mathcal{C}|\mathcal{D}) = - \sum_{i=1}^{|\mathcal{C}|} \sum_{j=1}^{|\mathcal{D}|} P(\mathcal{C}_i \cap \mathcal{D}_j) \log_2(P(\mathcal{C}_i|\mathcal{D}_j)) \quad H(\mathcal{C}, \mathcal{D}) = - \sum_{i=1}^{|\mathcal{C}|} \sum_{j=1}^{|\mathcal{D}|} P(\mathcal{C}_i \cap \mathcal{D}_j) \log_2(P(\mathcal{C}_i \cap \mathcal{D}_j))$$

En las ecuaciones anteriores [44], los términos \mathcal{C} y \mathcal{D} son variables aleatorias discretas que representan los clusters de las particiones \mathcal{C} y \mathcal{D} a los que pertenece un determinando elemento, y abreviando, $P(\mathcal{C}_i) = P(\mathcal{C} = C_i)$. El concepto de homogeneidad h hace referencia a que cada cluster contenga únicamente elementos de una misma clase; mientras que el de completitud c , que todos los miembros de una clase se asignen al mismo cluster [45].

$$h = \begin{cases} 1 & \text{si } H(\mathcal{C}, \mathcal{D}) = 0 \\ 1 - \frac{H(\mathcal{C}|\mathcal{D})}{H(\mathcal{C})} & \text{si } H(\mathcal{C}, \mathcal{D}) \neq 0 \end{cases} \quad c = \begin{cases} 1 & \text{si } H(\mathcal{D}, \mathcal{C}) = 0 \\ 1 - \frac{H(\mathcal{D}|\mathcal{C})}{H(\mathcal{D})} & \text{si } H(\mathcal{D}, \mathcal{C}) \neq 0 \end{cases}$$

Para los algoritmos de clustering presentados, se obtienen unos valores (h, c, V) adecuados. En el caso de k -means se obtiene $(0,923, 0,924, 0,924)$, y para CJA $(0,938, 0,937, 0,937)$. La V -measure se calcula de la siguiente manera.

$$V = \frac{2hc}{h+c}$$

No es recomendable utilizar esta métrica de manera exclusiva en casos con pocas observaciones (menos de 1000) o un número elevado de clusters (más de 10). En dichos casos es recomendable respaldarla con otras como el ARI. En este caso, se ve como ambas indican un buen clustering.

Coeficiente de la silueta

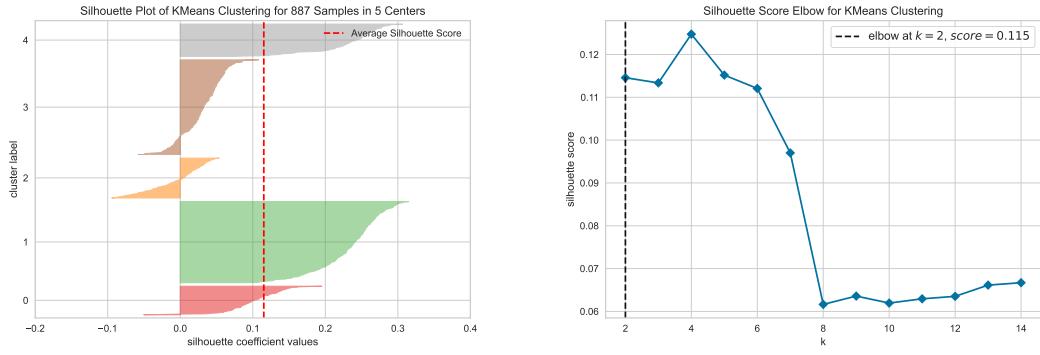
Otra métrica popular para medir la calidad de un clustering es el coeficiente de la silueta [46]. Esta no necesita conocer las clases reales, pues mide cómo de parecido es un elemento x_i a los de su cluster, es decir, cómo de compactos son los clusters; y además mide la diferenciación entre clusters, es decir, cómo de separados están.

$$a_i = \frac{1}{|C_l| - 1} \sum_{\substack{\mathbf{x}_j \in C_l \\ i \neq j}} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|$$

$$b_i = \min_{m \neq l} \left\{ \frac{1}{|C_m|} \sum_{\mathbf{x}_j \in C_m} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| \right\}$$

$$\mathcal{S} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{b_i - a_i}{\max\{a_i, b_i\}}$$

El cómo de compactos son los clusters lo miden los a_i , mientras que la separación entre clusters lo miden los b_i . El valor de \mathcal{S} varía entre -1 y 1 , indicando los valores cercanos a 1 un clustering perfecto (puntos parecidos entre sí en un mismo cluster, y clusters separados), valores cercanos a -1 un mal clustering (parecería más razonable asignar algunos puntos a otros clusters), y valores cercanos a cero indican que no estaría claro a qué cluster deberían asignarse algunos puntos al no estar bien separados los clusters [47].

(a) Coeficiente de la silueta para k -means

(b) Método del codo con el coeficiente de la silueta

Figura 2.33: Coeficiente de la silueta

En la Figura 2.33a se muestra el cálculo del coeficiente de la silueta para el clustering realizado con k -means. Se obtiene un valor próximo a cero ($0,11$), indicando que el clustering no es bueno en cuanto a separación de los clusters. De aquí no se deduce que el clustering sea malo, simplemente se deduce que los clusters no están lo suficientemente separados para que esta métrica lo considere un buen clustering. Al aplicar el método del codo con el coeficiente de silueta como métrica, tal y como muestra la Figura 2.33b sugiere reducir el número de clusters a dos para evitar esta penalización por clusters muy juntos, pero se sigue obteniendo una puntuación baja al no tener ahora elementos tan similares dentro de cada cluster.

Bibliografía

- [1] A. Abeliuk y C. Gutiérrez, *Historia y evolución de la inteligencia artificial*.
- [2] R. Szeliski, *Computer Vision: Algorithms and Applications*, 2nd ed. Springer International Publishing, 2022, ISBN: 978-3-030-34371-2. DOI: 10.1007/978-3-030-34372-9. dirección: <https://szeliski.org/Book/>.
- [3] M. Minsky y S. A. Papert, *Perceptrons: An Introduction to Computational Geometry*. The MIT Press, ene. de 2017, ISBN: 9780262343930. DOI: 10.7551/MITPRESS/11301.001.0001.
- [4] H. Demuth y B. D. Jesús, *Neural Network Design 2nd Edition*. dirección: <https://hagan.okstate.edu/NNDesign.pdf>.
- [5] G. Cybenko, “Approximation by superpositions of a sigmoidal function,” *Mathematics of Control, Signals, and Systems*, vol. 2, págs. 303-314, 4 dic. de 1989, ISSN: 09324194. DOI: 10.1007/BF02551274/METRICS. dirección: <https://link.springer.com/article/10.1007/BF02551274>.
- [6] Q. Wang, Y. Ma, K. Zhao e Y. Tian, “A Comprehensive Survey of Loss Functions in Machine Learning,” *Annals of Data Science*, vol. 9, págs. 187-212, 2 abr. de 2022, ISSN: 21985812. DOI: 10.1007/S40745-020-00253-5/TABLES/8. dirección: <https://link.springer.com/article/10.1007/s40745-020-00253-5>.
- [7] S. Ruder, “An overview of gradient descent optimization algorithms,”
- [8] B. Ding, H. Qian y J. Zhou, “Activation functions and their characteristics in deep neural networks,” *Proceedings of the 30th Chinese Control and Decision Conference, CCDC 2018*, págs. 1836-1841, jul. de 2018. DOI: 10.1109/CCDC.2018.8407425.
- [9] T. Kurbiel, *Derivative of the Softmax Function and the Categorical Cross-Entropy Loss*. dirección: <https://towardsdatascience.com/derivative-of-the-softmax-function-and-the-categorical-cross-entropy-loss-ffceefc081d1>.
- [10] C. Kevin, *Feature Maps*. dirección: https://medium.com/@chriskevin_80184/feature-maps-ee8e11a71f9e.
- [11] I. Goodfellow, Y. Bengio y A. Courville, *Deep Learning*. MIT Press, 2016, págs. 326-330. dirección: <http://www.deeplearningbook.org>.
- [12] W. Gao, L. Yang, X. Zhang y H. Liu, “An improved Sobel edge detection,” *Proceedings - 2010 3rd IEEE International Conference on Computer Science and Information Technology, ICCSIT 2010*, vol. 5, págs. 67-71, 2010. DOI: 10.1109/ICCSIT.2010.5563693.
- [13] *OpenCV: Image Filtering*. dirección: https://docs.opencv.org/4.x/d4/d86/group__imgproc__filter.html.
- [14] K. O’shea y R. Nash, “An Introduction to Convolutional Neural Networks,”
- [15] J. Wu, “Introduction to Convolutional Neural Networks,” 2017.
- [16] D. Katsaros, E. Frakou y D. Papakostas, “Backpropagation for Convolutional Neural Networks,”
- [17] A. Vaswani, G. Brain, N. Shazeer et al., “Attention Is All You Need,” 2017.
- [18] J. L. Ba, J. R. Kiros y G. E. Hinton, “Layer Normalization,” jul. de 2016. dirección: <https://arxiv.org/abs/1607.06450v1>.

- [19] A. Dosovitskiy, L. Beyer, A. Kolesnikov et al., “An Image is Worth 16x16 Words: Transformers for Image Recognition at Scale,” *ICLR 2021 - 9th International Conference on Learning Representations*, oct. de 2020. dirección: <https://arxiv.org/abs/2010.11929v2>.
- [20] J. Ngiam, A. Khosla, M. Kim, J. Nam, H. Lee y A. Y. Ng, “Multimodal Deep Learning,” 2011.
- [21] P. Xu, X. Zhu y D. A. Clifton, “Multimodal Learning With Transformers: A Survey,” *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, vol. 45, págs. 12 113-12 132, 10 oct. de 2023, ISSN: 19393539. DOI: 10.1109/TPAMI.2023.3275156.
- [22] *Obtén incorporaciones multimodales — IA generativa en Vertex AI — Google Cloud.* dirección: <https://cloud.google.com/vertex-ai/generative-ai/docs/embeddings/get-multimodal-embeddings?hl=es-419>.
- [23] T. Kitasuka, M. Aritsugi y F. Rahutomo, “Semantic Cosine Similarity,” 2012. dirección: <https://www.researchgate.net/publication/262525676>.
- [24] A. Radford, J. W. Kim, C. Hallacy et al., “Learning Transferable Visual Models From Natural Language Supervision,” *Proceedings of Machine Learning Research*, vol. 139, págs. 8748-8763, feb. de 2021, ISSN: 26403498. dirección: <https://arxiv.org/abs/2103.00020v1>.
- [25] B. Chong, “K-means clustering algorithm: a brief review,” vol. 4, págs. 37-40, DOI: 10.25236/AJCIS.2021.040506.
- [26] I. Davidson y S. S. Ravi, “Agglomerative Hierarchical Clustering with Constraints: Theoretical and Empirical Results,” *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)*, vol. 3721 LNAI, págs. 59-70, 2005, ISSN: 1611-3349. DOI: 10.1007/11564126_11. dirección: https://link.springer.com/chapter/10.1007/11564126_11.
- [27] D. Müllner, “Modern hierarchical, agglomerative clustering algorithms,” sep. de 2011. dirección: <https://arxiv.org/abs/1109.2378v1>.
- [28] M. Cui, “Introduction to the K-Means Clustering Algorithm Based on the Elbow Method,” DOI: 10.23977/accaf.2020.010102.
- [29] V. Satopää, J. Albrecht, D. Irwin y B. Raghavan, “Finding a ”needle in a haystack: Detecting knee points in system behavior,” *Proceedings - International Conference on Distributed Computing Systems*, págs. 166-171, 2011. DOI: 10.1109/ICDCSW.2011.20.
- [30] NVIDIA, ¿Qué es CUDA? Dirección: <https://support.nvidia.eu/hc/es/articles/4850516229266--Qu%C3%A9-es-CUDA>.
- [31] J. Ghorpade, J. Parande, M. Kulkarni y A. Bawaskar, “GPGPU PROCESSING IN CUDA ARCHITECTURE,” *Advanced Computing: An International Journal (ACIJ)*, vol. 3, 1 2012. DOI: 10.5121/acij.2012.3109.
- [32] Q. Kemao y T. Wang, “GPU Acceleration for Optical Measurement,” *GPU Acceleration for Optical Measurement*, dic. de 2017. DOI: 10.1117/3.2314949.
- [33] *Cloud Computing Services — Google Cloud.* dirección: <https://cloud.google.com/?hl=en>.
- [34] M. Decuyper, M. Stockhoff, S. Vandenberghe, al - y X. Ying, “An Overview of Overfitting and its Solutions,” *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 1168, pág. 022 022, 2 feb. de 2019, ISSN: 1742-6596. DOI: 10.1088/1742-6596/1168/2/022022. dirección: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/1168/2/022022%20https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/1168/2/022022/meta>.
- [35] M. Iman, H. R. Arabnia y K. Rasheed, “A Review of Deep Transfer Learning and Recent Advancements,” *Technologies 2023, Vol. 11, Page 40*, vol. 11, pág. 40, 2 mar. de 2023, ISSN: 2227-7080. DOI: 10.3390/TECHNOLOGIES11020040. dirección: <https://www.mdpi.com/2227-7080/11/2/40/htm%20https://www.mdpi.com/2227-7080/11/2/40>.
- [36] *MobileNetV2: The Next Generation of On-Device Computer Vision Networks.* dirección: <https://research.google/blog/mobilenetv2-the-next-generation-of-on-device-computer-vision-networks/>.

- [37] A. Mikołajczyk y M. Grochowski, “Data augmentation for improving deep learning in image classification problem,” *2018 International Interdisciplinary PhD Workshop, IIPHDW 2018*, págs. 117-122, jun. de 2018. DOI: 10.1109/IIPHDW.2018.8388338.
- [38] A. Bissoto, E. Valle y S. Avila, “GAN-Based Data Augmentation and Anonymization for Skin-Lesion Analysis: A Critical Review,” págs. 1847-1856, 2021.
- [39] M. Heydarian, T. E. Doyle y R. Samavi, “MLCM: Multi-Label Confusion Matrix,” *IEEE Access*, vol. 10, págs. 19 083-19 095, 2022, ISSN: 21693536. DOI: 10.1109/ACCESS.2022.3151048.
- [40] C. Goutte y E. Gaussier, “A Probabilistic Interpretation of Precision, Recall and F-Score, with Implication for Evaluation,” *Lecture Notes in Computer Science*, vol. 3408, págs. 345-359, 2005, ISSN: 03029743. DOI: 10.1007/978-3-540-31865-1_25/COVER. dirección: https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-540-31865-1_25.
- [41] T. Fawcett, “An introduction to ROC analysis,” *Pattern Recognition Letters*, vol. 27, págs. 861-874, 8 jun. de 2006, ISSN: 0167-8655. DOI: 10.1016/J.PATREC.2005.10.010.
- [42] C. Ferri, J. Hernández-Orallo y R. Modroiu, “An experimental comparison of performance measures for classification,” *Pattern Recognition Letters*, vol. 30, págs. 27-38, 2008. DOI: 10.1016/j.patrec.2008.08.010.
- [43] L. Hubert y P. Arabie, “Comparing partitions,” *Journal of Classification*, vol. 2, págs. 193-218, 1 dic. de 1985, ISSN: 01764268. DOI: 10.1007/BF01908075/METRICS. dirección: <https://link.springer.com/article/10.1007/BF01908075>.
- [44] S. T. Palmerín, “Teoría de la Información: Portafolios, Redes y Axiomatización de Entropías,”
- [45] A. Rosenberg y J. Hirschberg, “V-Measure: A conditional entropy-based external cluster evaluation measure,” págs. 410-420, 2007.
- [46] A. Naghizadeh y D. N. Metaxas, “Condensed Silhouette: An Optimized Filtering Process for Cluster Selection in K-Means,” *Procedia Computer Science*, vol. 176, págs. 205-214, ene. de 2020, ISSN: 1877-0509. DOI: 10.1016/J.PROCS.2020.08.022.
- [47] P. J. Rousseeuw, “Silhouettes: A graphical aid to the interpretation and validation of cluster analysis,” *Journal of Computational and Applied Mathematics*, vol. 20, págs. 53-65, C nov. de 1987, ISSN: 0377-0427. DOI: 10.1016/0377-0427(87)90125-7.

Universidad de Alcalá
Escuela Politécnica Superior



ESCUELA POLITECNICA
SUPERIOR

