Universidad de Alcalá Escuela Politécnica Superior

Grado en Ingeniería Informática

Trabajo Fin de Grado

Estudio de técnicas de visión e inteligencia artificial aplicadas a un caso práctico

Autor: Pablo García García

Tutor: Adrián Domínguez Díaz

UNIVERSIDAD DE ALCALÁ ESCUELA POLITÉCNICA SUPERIOR

Grado en Ingeniería Informática

Trabajo Fin de grado

Estudio de técnicas de visión e inteligencia artificial aplicadas a un caso práctico

Autor: Pablo García García

Tutor: Adrián Domínguez Díaz

Tribunal:

Presidente:

Vocal 1° :

Vocal $2^{\underline{o}}$:

Fecha de depósito:



Resumen

Palabras clave:

Abstract

Keywords:

Índice general

Resumen	Resumen				
Abstract		9			
1.1. B 1.2. T	amentos de la Inteligencia Artificial y sus herramientas Breve historia de la Inteligencia Artificial	16			
2.1. P 2.2. F	ndizaje automático y profundo Perceptrón	26			
Bibliogra	afía	33			

Índice de figuras

1.1.	Detección de bordes aplicando los kernel Sobel
2.1.	Arquitectura de un perceptrón
2.2.	Puntos etiquetados en \mathbb{R}^2
2.3.	Puntos separados en \mathbb{R}^2
2.4.	Valores de $x \oplus y$ en \mathbb{R}^2
2.5.	Función lineal
2.6.	Función logística
2.7.	Tangente hiperbólica
2.8.	Función ReLU
2.9.	Arquitectura de una red neuronal multicapa
2.10	Red neuronal multicapa
2.11	Descenso por gradiente

Introducción

Capítulo 1

Fundamentos de la Inteligencia Artificial y sus herramientas

En este capítulo se abordará una breve introducción al campo de la Inteligencia Artificial, comenzando desde su historia a lo largo del tiempo para contextualizar, pasando por entender los fundamentos de lo que busca lograr, y comentando alguna herramienta matemática que será de utilidad y que en ciertos casos causa confusiones.

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, en la que se propone estudiar la Inteligencia Artificial como una ciencia más. En dicha época existían dos corrientes, la simbólica y la conexionista.

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 conexionista trataba de simular el comportamiento de las neuronas humanas de manera artificial, haciendo que estas neuronas artificiales pudiesen aprender. De aquí surgía 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, decae 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 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, \ldots, C_n , y para una serie de valores de entrada x_1, x_2, \ldots, 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 diferencia 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). Un ejemplo de un problema de regresión sería predecir las horas que dormirá una persona dada su edad, horas trabajadas en el día, horas de recreo 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 **clústering** 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 (y su variante k-medianas), clusterización jerárquica aglomerativa, modelos de mixtura gaussianos, y DBSCAN. 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. Convolución y correlación cruzada

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.

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

Partiendo de las primera definición mostrada, se pueden demostrar algunas propiedades útiles que cumple la convolución[3]:

- Conmutativa: f * g = g * f
- Asociativa: f * (g * h) = (f * g) * h
- Distributiva: f * (g + h) = (f * g) + (f * h)
- Derivada: $\frac{d}{dt}(f*g) = \frac{df}{dt}*g = \frac{dg}{dt}*f$
- Relación con las transformadas de Laplace y Fourier: $\mathcal{L}\{f*g\} = \mathcal{L}\{f\} \cdot \mathcal{L}\{g\}$, o lo que suele ser más útil, $f*g = \mathcal{L}^{-1}\{\mathcal{L}\{f\} \cdot \mathcal{L}\{g\}\}$, de forma que se puede calcular la convolución en tiempo $\mathcal{O}(n \log(n))$ con el algoritmo FFT[4].

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[5].

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

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. Se puede verificar que el cálculo realizado a mano concuerda con el resultado de aplicar la función convn(X, K, 'valid') en MATLAB.

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

$$1 \cdot 1 + 2 \cdot 0 + 3 \cdot 0 + 5 \cdot 0 + 6 \cdot 1 + 7 \cdot 0 + 9 \cdot 0 + 8 \cdot 0 + 7 \cdot 1 = 14$$

$$2 \cdot 1 + 3 \cdot 0 + 4 \cdot 0 + 6 \cdot 0 + 7 \cdot 1 + 8 \cdot 0 + 8 \cdot 0 + 7 \cdot 0 + 6 \cdot 1 = 15$$

$$\vdots$$

$$7 \cdot 1 + 6 \cdot 0 + 5 \cdot 0 + 3 \cdot 0 + 2 \cdot 1 + 1 \cdot 0 + 3 \cdot 0 + 4 \cdot 0 + 5 \cdot 1 = 14$$

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[6].

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

A continuación se va a calcular la convolución de la matriz del ejemplo anterior con G_u . Para verificar los cálculos, de nuevo se aplica la función **convn** de MATLAB. Al realizar los cálculos a mano tal y como se ha mostrado en el ejemplo anterior, se obtiene como resultado la matriz A, mientras que MATLAB devuelve la matriz B, esta vez los resultados no concuerdan. ¿Qué acaba de suceder? ¿Está mal codificada la función de MATLAB? ¿Está mal realizado el ejemplo?

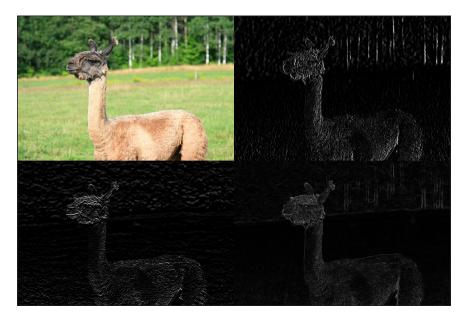


Figura 1.1: Detección de bordes aplicando los kernel Sobel

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, $X*Y = X*(R_{180} \cdot Y)$, 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 [5].

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

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[7]. Finalmente, como se verá en próximos capítulos, las famosas redes neuronales convolucionales, no aplican convoluciones sino correlaciones cruzadas.

Capítulo 2

Aprendizaje automático y profundo

2.1. 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 learing 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, \ldots, x_n y se tiene una serie de valores de salida y_1, y_2, \ldots, 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, \ldots, w_n y un sesgo o bias b; y sus hiperparámetros, entre los que se encuentra una función f de activación.

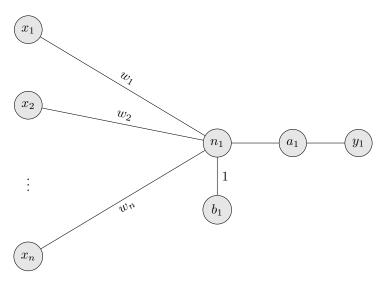


Figura 2.1: Arquitectura de un perceptrón

En la Figura 2.1 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.

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

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 $\mathcal{U}: \mathbb{R} \longrightarrow \{0,1\}$ y su expresión analítica es

$$\mathcal{U}(x) = \left\{ \begin{array}{ll} 0 & \text{si} & x < 0 \\ 1 & \text{si} & x \ge 0 \end{array} \right.$$

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

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

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 2.2.

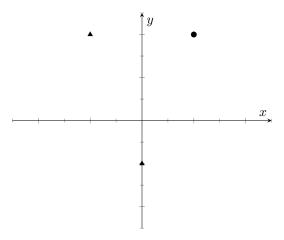


Figura 2.2: Puntos etiquetados en \mathbb{R}^2

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 2.3. 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 [8] 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 tal y como se muestra en la Tabla 2.1 y Figura 2.4, 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.

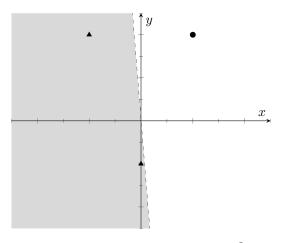


Figura 2.3: Puntos separados en \mathbb{R}^2

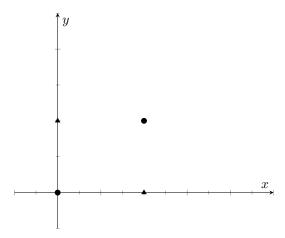


Figura 2.4: Valores de $x \oplus y$ en \mathbb{R}^2

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

Tabla 2.1: Función XOR

En cuanto a la pregunta de cómo hallar los parámetros, se consideran las siguientes ecuaciones[9], donde \mathbf{w} es el vector de pesos, t el valor esperado, y a la salida del perceptrón y se aplica el Algoritmo 2.1 para obtener los parámetros óptimos. En dicho algoritmo se supondrá que existe una matriz X de n filas que contiene los diferentes \mathbf{x} .

$$\mathbf{w}(k+1) = \mathbf{w}(k) + e(k)\mathbf{x}(k)$$

$$b(k+1) = b(k) + e(k)$$

$$e(k) = t(k) - a(k)$$

$$a(k) = \mathcal{U}(\mathbf{w}^{t}(k)\mathbf{x}(k))$$
(2.1)

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 no va a recibir casos que no sean linealmente separables, pero de lo contrario se puede añadir un contador

Algoritmo 2.1: Regla de aprendizaje del perceptrón

```
\begin{aligned} \mathbf{Datos:} \ X, \mathbf{t} \\ \mathbf{Resultado:} \ \mathbf{w}, b \\ b \leftarrow 0 \\ \mathbf{w} \leftarrow \mathbf{random} \\ k \leftarrow 0 \\ \mathbf{repetir} \\ & \mathbf{acabar} \leftarrow \mathbf{true} \\ & \mathbf{para} \ i \leftarrow k \ \mathbf{hasta} \ k + n - 1 \ \mathbf{hacer} \\ & | \ e(i) \leftarrow t(i) - a(i) \\ & | \ \mathbf{w}(i+1) \leftarrow \mathbf{w}(i) + e(i)\mathbf{x}(i \ (\text{m\'od } n)) \\ & | \ b(i+1) \leftarrow b(i) + e(i) \\ & | \ \mathbf{acabar} \leftarrow \mathbf{acabar} \land e(i) == 0 \\ & \mathbf{fin} \\ & k \leftarrow k + n - 1 \\ \mathbf{mientras} \ \neg \mathbf{acabar} \end{aligned}
```

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. A continuación se muestra cómo obtener una solución para el caso de la Figura 2.2 aplicando el Algoritmo 2.1.

$$X = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 2 & 2 & -1 \end{pmatrix}$$
 $\mathbf{t} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ $\mathbf{w}(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ $b(0) = 0$

$$\mathbf{0.} \quad \bullet \quad a(0) = \mathcal{U}(\mathbf{w}^t(0)\mathbf{x}(0)) = \mathcal{U}\left(\begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} + 0\right) = 1$$

$$e(0) = t(0) - a(0) = 1 - 1 = 0$$

•
$$\mathbf{w}(1) = \mathbf{w}(0)$$

$$b(1) = b(0)$$

1.
$$a(1) = \mathcal{U}(\mathbf{w}^t(1)\mathbf{x}(1)) = \mathcal{U}\left(\begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix} + 0\right) = 1$$

$$e(1) = t(1) - a(1) = 0 - 1 = -1$$

$$\bullet \mathbf{w}(2) = \mathbf{w}(1) + e(1)\mathbf{x}(1) = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$b(2) = b(1) + e(1) = -1$$

2.
$$a(2) = \mathcal{U}(\mathbf{w}^t(2)\mathbf{x}(2)) = \mathcal{U}\left(\begin{pmatrix} 2 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} - 1\right) = 1$$

$$e(2) = t(2) - a(2) = 0 - 1 = -1$$

$$\mathbf{w}(3) = \mathbf{w}(2) + e(2)\mathbf{x}(2) = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$b(3) = b(2) + e(2) = -2$$

lacktriangle acabar = true \land false \land false = false

3.
$$\mathbf{a}(3) = \mathcal{U}(\mathbf{w}^t(3)\mathbf{x}(3 \pmod{3})) = \mathcal{U}\left(\begin{pmatrix} 2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} - 2\right) = 1$$

$$e(3) = t(3) - a(3) = 1 - 1 = 0$$

•
$$\mathbf{w}(4) = \mathbf{w}(3)$$

$$b(4) = b(3)$$

4. •
$$a(4) = \mathcal{U}(\mathbf{w}^t(4)\mathbf{x}(4 \pmod{3})) = \mathcal{U}\left(\begin{pmatrix} 2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix} - 2\right) = 0$$

- e(4) = t(4) a(4) = 0 0 = 0
- $\mathbf{w}(5) = \mathbf{w}(4)$
- b(5) = b(4)

5.
$$\mathbf{a}(5) = \mathcal{U}(\mathbf{w}^t(5)\mathbf{x}(5 \pmod{3})) = \mathcal{U}\left(\begin{pmatrix} 2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} - 2\right) = 0$$

- e(5) = t(5) a(5) = 0 0 = 0
- $\mathbf{w}(6) = \mathbf{w}(5)$
- b(6) = b(5)
- \blacksquare acabar = true \land true \land true = true

La ejecución del algoritmo 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 $\mathbf{x}(1) \in r$, 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 2.1 terminará su ejecución y con el \mathbf{w} óptimo, tal y como se enunciaba en el **Teorema de Convergencia del Perceptrón**. A continuación se realiza su demostración basándose en la que se encuentra en [9] pero de forma más clara y simple. Para comenzar con la demostración será necesario definir una serie de elementos, comenzando por $\Omega(k)$ y $\mathbf{z}(k)$. Se entiende que se están concatenando vectores, no definiendo "vectores dentro de vectores".

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

Con estos elementos y el cálculo de a(k) en la Ecuación (2.1) es fácil ver que $n(k) = \Omega^t(k)\mathbf{z}(k)$. Recordando 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 (2.1). De esta forma $\Omega(k+1) = \Omega(k) + e(k)\mathbf{z}(k)$. Ahora se considerará un vector Ω^* de forma que

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

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 $\|\mathbf{z}(k)\| \le 1$. El último elemento a considerar será δ , que será definido como

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

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.

$$\Omega^t(k+1)\Omega^* > \Omega^t(k)\Omega^* + \delta \tag{2.2}$$

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

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

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

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

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

$$\Omega^t(k+1)\Omega(k+1) \le \Omega^t(k)\Omega(k) + 1 \tag{2.3}$$

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 (2.2) y (2.3) 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.

$$\boxed{\delta m} \leq \Omega^t(m)\Omega^* = \|\Omega^t(m)\Omega^*\|
\leq \|\Omega^t(m)\|\|\Omega^*\| = \|\Omega^t(m)\| = \sqrt{\Omega^t(m)\Omega(m)}
\leq \boxed{\sqrt{m}}$$

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

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.

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

2.2. 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. Además, como se mostrará en modelos de machine y deep learing en secciones sucesivas, será importante que dicha función sea derivable en todo su dominio, cosa que no cumple $\mathcal{U}(x)$, pues no es continua en x=0. Por estos motivos, se presentan las funciones de activación más conocidas e importantes[10].

• Función lineal

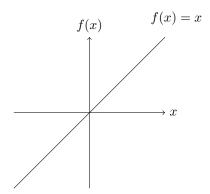


Figura 2.5: Función lineal

Con motivo de emplear una función que no produzca valores binarios, se pueden tomar funciones lineales $f: \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ de la forma f(x) = ax. Como se verá al emplear redes neuronales, no es muy útil al trabajar con tareas complejas, solo es capaz de cumplir con su tarea en problemas sencillos. Como se estudiará en sucesivas secciones, 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

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

y en el caso en el que se tome a = 1, se tiene que

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

• Función logística

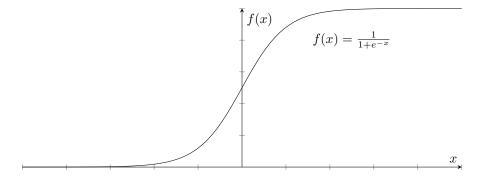


Figura 2.6: Función logística

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

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

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

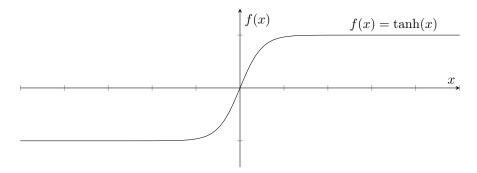


Figura 2.7: Tangente hiperbólica

De nuevo, se presenta una función que 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 la logística, y también hace que al usarla en redes neuronales su entrenamiento converja más rápido. Además $f: \mathbb{R} \longrightarrow (-1, 1)$ y su expresión es

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

verificando una segunda propiedad muy útil,

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

■ Función ReLU

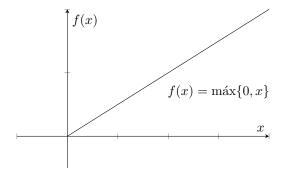


Figura 2.8: Función ReLU

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 es muy próxima a cero, relentiza enormemente el proceso de aprendizaje, pues si un determinado peso se actualiza de acuerdo a

$$w_{ij}^{(m)}(k+1) = w_{ij}^{(m)}(k) - \alpha \frac{\partial e(k)}{\partial w_{ij}^{(m)}},$$

el segundo término será muy pequeño y se necesitarán muchas iteraciones para cambiar el valor del peso. Como se observa a continuación, la función ReLU soluciona este problema. Además, la derivada es mucho más sencilla de calcular.

$$\lim_{x\to\infty}\frac{d}{dx}\frac{1}{1+e^{-x}}=0 \qquad \qquad \lim_{x\to\infty}\frac{d}{dx}\tanh(x)=0 \qquad \qquad \lim_{x\to\infty}\frac{d}{dx}\mathrm{ReLU}(x)=1$$

2.3. 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 retroprogragación.

En 1989, George Cybenko enunció y consiguió demostrar el **Teorema de Aproximación Universal**[11]. 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 decaimiento por el interés en la IA.

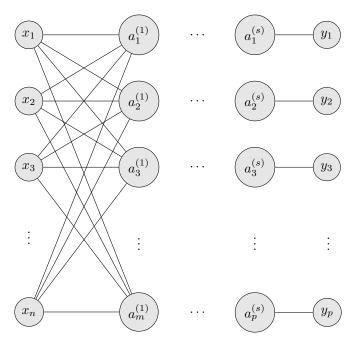


Figura 2.9: Arquitectura de una red neuronal multicapa

En la Figura 2.9 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 2.10 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.

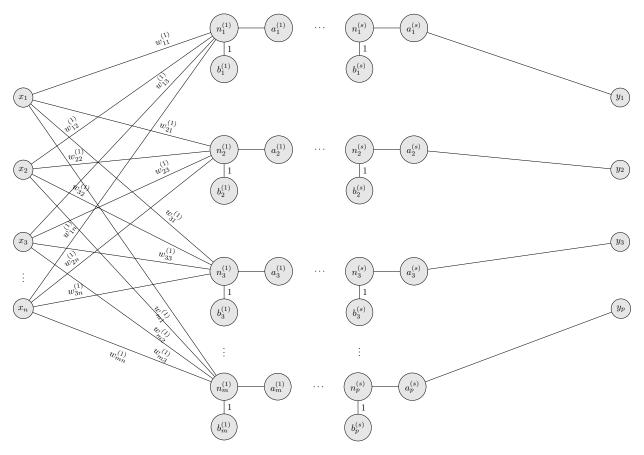


Figura 2.10: Red neuronal multicapa

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 activación la neuona 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 (2.4), 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.

$$\mathbf{a}^{(m)}(k) = F^{(m)} \left(W^{(m)}(k) \mathbf{x}^{(m)}(k) + \mathbf{b}^{(m)}(k) \right)$$

$$\begin{pmatrix} a_1^{(m)}(k) \\ a_2^{(m)}(k) \\ \vdots \\ a_i^{(m)}(k) \end{pmatrix} = F^{(m)} \begin{pmatrix} w_{11}^{(m)}(k) & w_{12}^{(m)}(k) & \cdots & w_{1i}^{(m)}(k) \\ w_{21}^{(m)}(k) & w_{22}^{(m)}(k) & \cdots & w_{2i}^{(m)}(k) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{i1}^{(m)}(k) & w_{i2}^{(m)}(k) & \cdots & w_{ii}^{(m)}(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1^{(m)}(k) \\ x_2^{(m)}(k) \\ \vdots \\ x_i^{(m)}(k) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_1^{(m)}(k) \\ b_2^{(m)}(k) \\ \vdots \\ b_i^{(m)}(k) \end{pmatrix}$$

$$(2.4)$$

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

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

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[12].

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 variables y con expresiones complejas, no son muy eficientes.

Esto se soluciona con ayuda de un algoritmo conocido como descenso por gradiente [13]. 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 2.2: Descenso por gradiente

```
\begin{aligned} &\textbf{Datos:} \ f, \alpha, k \\ &\textbf{Resultado:} \ \mathbf{x}(k) \\ &\mathbf{x}(0) \leftarrow \texttt{random} \\ &\textbf{para} \ i \leftarrow 1 \ \textbf{hasta} \ k \ \textbf{hacer} \\ &| \ \mathbf{x}(i+1) = \mathbf{x}(i) - \alpha \nabla f(\mathbf{x}(i)) \end{aligned}
```

Como se observa en el Algoritmo 2.2, 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 2.11. Si se hubiese fijado un valor máximo de k=25, en los casos de las Figuras 2.11b y 2.11c, no se hubiese llegado a una buena aproximación del mínimo por haber elegido un α inadecuado.

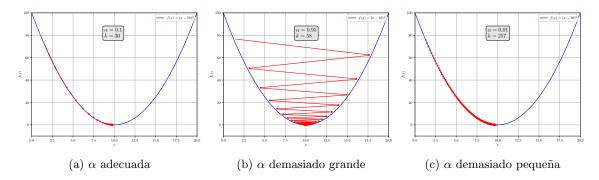


Figura 2.11: Descenso por gradiente

Con esta idea de la función de error y el descenso por gradiente, aparece el famoso algoritmo de la retropropagación o *backpropagation*. Consiste en, dada una observación de un dataset, calcular la salida de la red con ayuda de la Ecuación (2.4),

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] López y H. I, "Método alternativo para calcular la convolución de señales en tiempo continuo," 2009.
- [4] A. Lucía, "FFT: Transformada Rápida de Fourier,"
- [5] I. Goodfellow, Y. Bengio y A. Courville, *Deep Learning*. MIT Press, 2016, págs. 326-330. dirección: http://www.deeplearningbook.org.
- [6] 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.
- [7] OpenCV: Image Filtering. dirección: https://docs.opencv.org/4.x/d4/d86/group__imgproc__ _filter.html.
- [8] 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.
- [9] H. Demuth y B. D. Jesús, Neural Network Design 2nd Edition. dirección: https://hagan.okstate.edu/NNDesign.pdf.
- [10] 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.
- [11] 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.
- [12] 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.
- [13] S. Ruder, "An overview of gradient descent optimization algorithms,"

Universidad de Alcalá Escuela Politécnica Superior



ESCUELA POLITECNICA SUPERIOR

