U N I V E R S I D A D E D A C O R U Ñ A

FACULTAD DE INFORMÁTICA

Departamento de Tecnologías de la Información y las Comunicaciones

ASTROFÍSICA COMPUTACIONAL: APLICACIÓN DE TÉCNICAS DE INTELIGENCIA ARTIFICIAL EN LA CLASIFICACIÓN Y PARAMETRIZACIÓN DE ESPECTROS ESTELARES

DOCTORANDO: Alejandra M. Rodríguez Fernández

DIRECTORES: CARLOS DAFONTE VÁZQUEZ
MINIA MANTEIGA OUTEIRO

A Coruña, Abril de 2010

UNIVERSIDADE DA CORUÑA

FACULTAD DE INFORMÁTICA

DEPARTAMENTO DE TECNOLOGÍAS DE LA INFORMACIÓN Y LAS COMUNICACIONES

TESIS DOCTORAL

ASTROFÍSICA COMPUTACIONAL: APLICACIÓN DE TÉCNICAS DE INTELIGENCIA ARTIFICIAL EN LA CLASIFICACIÓN Y PARAMETRIZACIÓN DE ESPECTROS ESTELARES

DOCTORANDO: Alejandra M. Rodríguez Fernández

DIRECTORES: CARLOS DAFONTE VÁZQUEZ
MINIA MANTEIGA OUTEIRO

A Coruña, Abril de 2010

Dª. **MINIA MANTEIGA OUTEIRO**, Profesora Titular de Universidad en el Área de *Astronomía y Astrofísica* de la *Universidade da Coruña*, y D. **CARLOS DAFONTE VÁZQUEZ**, Profesor Contratado Doctor en el Área de *Ciencias de la Computación e Inteligencia Artificial* de la *Universidade da Coruña*, HACEN CONSTAR QUE:

La memoria "**Astrofísica Computacional: Aplicación de Técnicas de Inteligencia Artificial en la Clasificación y Parametrización de Espectros Estelares**" ha sido realizada por Dª. **ALEJANDRA M. RODRÍGUEZ FERNÁNDEZ**, bajo nuestra dirección, en el Departamento de *Tecnologías de la Información y las Comunicaciones* de la *Universidade da Coruña*, y constituye la Tesis que presenta para optar al Grado de Doctor por la *Universidade da Coruña*.

A Coruña, 29 de Abril de 2010

D. Carlos Dafonte Vázquez

Dª. Minia Manteiga Outeiro

AGRADECIMIENTOS

***

Al principio me propuse escribir unos agradecimientos no excesivamente largos ni engorrosos, pero como tengo tantísimo que agradecer, y a tantas personas, me temo que al final estarán en consonancia con la longitud del resto del documento.

Deseo expresar mi gratitud a los directores de mi tesis, Minia y Carlos, por sus acertados consejos, su gran ayuda práctica y el apoyo que me han brindado durante todos estos largos años, no solamente en el plano profesional sino también en el personal. A Minia especialmente por su paciencia y amabilidad aguantando mis constantes preguntas. Y a Carlos por todo, pero sobre todo por ser mi amigo y haber estado a mi lado en los momentos más difíciles, soportando estoicamente mis agobios e impertinencias. Aunque sé que suena a tópico, en este caso no es más que la verdad: sin vosotros este trabajo no se habría podido finalizar. Literalmente. Muchas gracias.

Me gustaría agradecer a todos mis compañeros del grupo de investigación (Ángel, Alfonso, Carmen, Diego F., Diego O…) y especialmente a Bernardino Arcay, director de mi departamento, su colaboración diligente y apoyo constante durante todo este desarrollo. Igualmente desearía agradecer a mis compañeros de la Escuela de Caminos, en especial a Manuel Casteleiro y a su equipo directivo, toda su cooperación, ayuda práctica, flexibilidad de horarios y resto de concesiones que me han otorgado en todo momento para poder llevar a cabo este trabajo. Asimismo, quisiera también expresar mi reconocimiento a los expertos en Astrofísica (Olga, Iciar…) que han colaborado activamente en las distintas fases de esta tesis, compartiendo generosamente conmigo sus conocimientos y experiencia.

A mi madre, mis hermanos (Lita y Pandi), mi sobri (Gor), mi abuela Rous, mi tía Tita, mis primos, mis tíos, en definitiva a mi familia, quiero agradecerles sobre todo el gran esfuerzo que han hecho para que yo llegue a estar aquí en este momento. Todos y cada uno de ellos han aportado su granito de arena con el apoyo y cariño que me han dado a lo largo de toda la vida. Solamente espero haber estado a la altura de la confianza que siempre habéis depositado en mí. Y seguir estándolo.

A todas las personas que he perdido durante estos años duros, en especial a mi amiga Pilar que siempre confió en mí y cuyas risas aún echo de menos, a mi abuela Mena, a mi tía Sila, a mi compañera Chus, pues también ellas son parte de este trabajo y sé que muchas veces, desde donde estén, me han enviado la fuerza necesaria para seguir.

A mis amigos y amigas (Ángeles, Carmen, Chusy, Jan, Jesús, Lidy, Mary, Miguel, Pilocha, Purina, Silvie, Sonia…) me gustaría darles las gracias por estar siempre cerca de mí, mostrándome su cariño y su comprensión. También quiero agradecer a mis compañeros de fatigas (Ana, Espe, Fernanda, Jose Antonio, Jose Luis, Julia, Fernando, María P., María R.,

Marisol, Mayca, Pili, Pilar, Silvia, Sonia…) sus constantes ánimos y su apoyo diario. Gracias a todos por haberme aguantado y animado a lo largo de este dilatado período, ¡lo cual ya por sí solo sería digno de ocupar varios capítulos!

Gracias también a todas aquellas personas que un día fueron importantes, que compartieron y sufrieron conmigo esta tesis aunque hoy ya no se encuentren en mi vida. Y a todas las que sí están, pero que, con mi dispersión habitual, he omitido.

Y por supuesto, al *No-Dream Team* (Hellen, Fran, Cris, Ro y Pili) que se han tomado esta tesis como si fuese propia y que en las últimas semanas, leyéndose *tochos* hasta horas intempestivas, han estado tan obsesionados con ella como yo misma:

Hellen, la persona más eficiente que he conocido y la mejor amiga que alguien pueda desear. Conocerte es una de esas cosas extraordinarias y providenciales que pasan muy de cuando en cuando en la vida; he tenido suerte, y la sigo teniendo, al poder contar contigo día a día, todos los días, para todo. Gracias.

Fran, mi otro yo en versión de *raza superior-modelo evolutivo* pero más concienzudo y puntilloso, si cabe. Aunque a veces no te lo creas y a pesar de todo lo vivido, me siento afortunada de que estemos donde estamos, de poder retomarlo casi en donde lo habíamos dejado. Gracias.

Cris, la mejor correctora de estilo y maga de las estrategias, que con su risa contagiosa siempre logra animarme. Al margen de que no te gusten este tipo de cosas empalagosas, *of course*, me siento afortunada de haberte tenido a mi lado en estos últimos tiempos, que tú mejor que nadie sabes que han sido realmente como una pesadilla. Gracias.

Ro, el rey de los detallitos y especialista en teorías brillantes aunque extrañas, quien me ha *cedido* algunas de las ideas más interesantes de esta tesis (¡si es que alguna se puede calificar de ese modo!). Me siento orgullosa de poder contar siempre con tu amistad y tus consejos, realmente es un privilegio del que espero seguir disfrutando toda la vida. Gracias.

Pili, mi amiga más fiel, que me ha acompañado en los mejores y peores momentos durante todos y cada uno de estos largos años. Seguir compartiendo risas y lágrimas contigo es una de esas cosas que hacen que la vida merezca la pena, amiga. Gracias.

La verdad es que he debido ser muy buena en otra vida para merecer contar en esta con gente tan maravillosa como todos vosotros. Muchas gracias de corazón.

***

Quisiera dedicar especialmente esta tesis doctoral a mi querido padre, causante de su inicio y motor para su finalización. Mi norte durante todos estos años. Estés donde estés espero que hoy te sientas orgulloso de mí.

A mi padre

Desde el alba de los tiempos, aproximadamente cien mil millones de seres humanos han transitado por el planeta Tierra. Y es en verdad un número interesante, pues por curiosa coincidencia hay aproximadamente cien mil millones de estrellas en nuestro universo local, la Vía Láctea. Así, por cada hombre que jamás ha vivido, luce una estrella en ese Universo

Arthur C. Clarke
2001: A Space Odyssey

1. INTRODUCCIÓN 1

1.1 Contexto histórico 1

1.2 La Inteligencia Artificial en la Astrofísica 10

1.3 Objetivos de esta tesis doctoral 16

2. CLASIFICACIÓN DE ESPECTROS ESTELARES EN EL SISTEMA MK 19

2.1 La espectroscopia astronómica como herramienta de clasificación y parametrización de estrellas 19

2.2 Fundamentos del sistema MK de clasificación de espectros estelares 29

2.3 La técnica de clasificación manual 45

2.4 Automatización del proceso de clasificación espectral 50

3. PREPROCESADO Y CARACTERIZACIÓN MORFOLÓGICA DE LOS ESPECTROS 55

3.1 Preprocesado 62

3.2 Análisis morfológico 68

4. CLASIFICACIÓN ESPECTRAL AUTOMÁTICA: ENFOQUE HÍBRIDO I 83

4.1 Catálogos públicos de espectros estelares 87

4.2 Criterios e índices de clasificación 92

4.3 Análisis de sensibilidad 97

4.4 Sistemas basados en el conocimiento y lógica difusa 108

4.5 Redes de neuronas artificiales 178

4.6 Algoritmos de *clustering* 245

4.7 Redes funcionales 288

4.8 Análisis de rendimiento. Discusión final de todas las técnicas 328

4.9 Enfoque híbrido 333

5. CLASIFICACIÓN ESPECTRAL AUTOMÁTICA: ENFOQUE HÍBRIDO II 343

5.1 Elaboración de un catálogo de espectros de estrellas estándares 346

5.2 Análisis de sensibilidad: elección de índices espectrales 357

5.3 Sistema híbrido 364

5.4 Análisis de resultados. Discusión 383

6. PARAMETRIZACIÓN DE ESPECTROS ESTELARES 391

6.1 Transporte de energía a través de una atmósfera estelar 393

6.2 Modelos de síntesis espectral en estrellas. El programa SPECTRUM 397

6.3 Parametrización en temperatura y gravedad efectivas mediante redes de neuronas artificiales 403

6.4 Análisis de resultados. Discusión 410

7. STARMIND: SISTEMA DE INFORMACIÓN DE ESPECTROS ESTELARES 417

7.1 Organización de la información: base de datos astronómica 419

7.2 Acceso a la información: aplicación web 421

7.3 Clasificación y parametrización: servicio web 428

8. CONCLUSIONES 431

9. TRABAJO FUTURO: EXPLOTACIÓN DE BASES DE DATOS ASTRONÓMICAS, TERRESTRES Y ESPACIALES. EL PROYECTO ESPACIAL GAIA 435

BIBLIOGRAFÍA 437

ANEXOS 459

1 INTRODUCCIÓN

En lo tocante a la ciencia, la autoridad de un millar no es superior al humilde razonamiento de una sola persona

Galileo Galilei

1.1 Contexto histórico

Desde el alba de los tiempos, el ser humano se ha sentido atraído por conocer y explorar el universo físico que le rodea. Entre los objetos susceptibles de observación, el cielo nocturno en particular ha despertado gran interés ya desde las primeras civilizaciones prehistóricas, como atestigua el hallazgo de representaciones de estrellas en algunos grabados rupestres.

Posteriormente, y debido en gran parte al advenimiento de la agricultura, la humanidad se interesó por el estudio del firmamento con el objetivo de medir el tiempo y establecer de ese modo los primeros rudimentos de calendario, instrumento que resultaba muy útil para predecir con antelación la llegada de las épocas más convenientes para las faenas agrícolas.

Los primeros conocimientos que pueden considerarse como astronómicos aparecieron en Babilonia, donde se sentaron las bases de una ciencia que más tarde se transmitiría a la India y a Egipto, y que posteriormente heredaron y engrandecieron los griegos. En la famosa biblioteca de Alejandría, capital del imperio de Alejandro Magno, se reunió un importante grupo de filósofos que prestaron especial atención a los astros. En este ambiente favorable para el desarrollo científico, Aristarco de Samos propuso ya un modelo heliocéntrico de concepción del Universo, aunque acabaría triunfando la vertiente geocéntrica defendida primeramente por Hiparco y posteriormente por Ptolomeo; este último recogió el saber astronómico de su tiempo en la obra *Hè megalè syntaxis* (*Gran síntesis matemática,* siglo II d. C.), también conocida como *Almagesto* [Ptolomeo 1515]. En ella se incluye una descripción detallada del sistema geocéntrico vigente en su época, previsiones sobre los eclip-

ses y el movimiento de los astros, y el catálogo estelar más completo de la antigüedad, abordado siglos antes por Hiparco de Nicea, que fue ampliamente explotado por árabes y europeos hasta la alta Edad Media.

Después de la decadencia del mundo antiguo, Europa se sumió en una época oscura no muy propicia para estudios científicos en general ni astronómicos en particular. Una clara excepción fue en el siglo XIII la corte de Alfonso X el Sabio, monarca que se rodeó de un nutrido grupo de estudiosos árabes, judíos y cristianos disponiendo que se recopilasen todos sus conocimientos en una enciclopedia denominada *El libro del saber*, donde se incluyeron las famosas *Tablas Alfonsíes*; estas efemérides contienen las posiciones exactas de los cuerpos celestes en Toledo desde el año de la coronación de dicho rey (1252) hasta aproximadamente 1270, y estuvieron vigentes para calcular la posición de los planetas durante más de tres siglos.

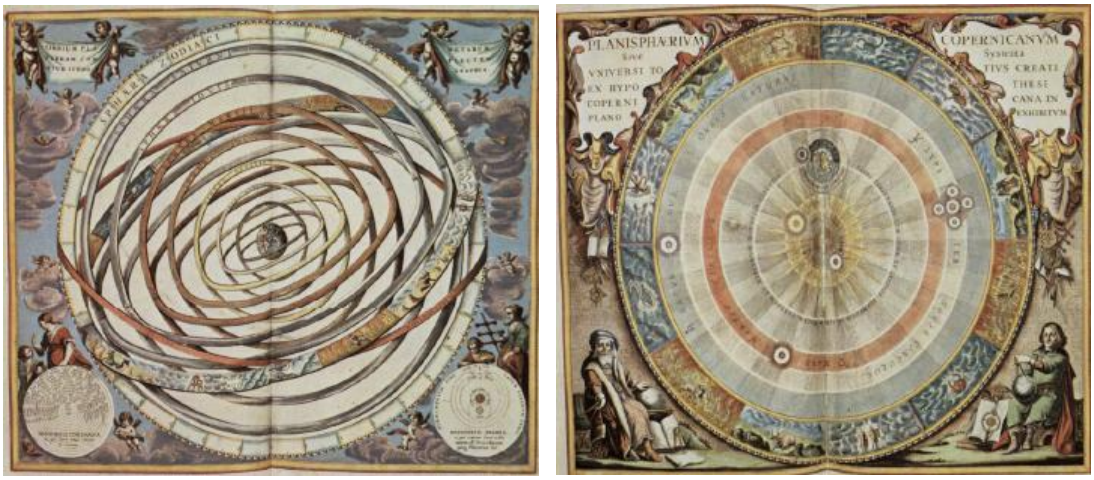


Figura 1. Grabados de 1660 en los que se representan los esquemas de concepción del mundo ptolomaico (geocéntrico) y copernicano (heliocéntrico)

Con el impulso renovador del Renacimiento comenzaron a surgir en Europa ideas científicas desligadas de los esquemas oscurantistas medievales. La primera verdadera revolución en la Astronomía llegaría en el siglo XVI de la mano de Nicolás Copérnico, quien advirtió que las tablas Alfonsíes presentaban problemas de concordancia con los movimientos reales de los astros y propuso de nuevo la teoría heliocéntrica en su libro *De revolutionibus orbium caelestium* (*Sobre las revoluciones de los cuerpos celestres*) [Copérnico 1543], situando al Sol como centro del sistema y a la Tierra girando a su alrededor como un planeta más. Johannes Kepler, ferviente convencido de las teorías copernicanas, formuló a principios del siglo XVII las tres leyes que llevan su nombre, publicadas en su obra *Astronomía nova* [Kepler 1609], mediante las que se explica el movimiento de los planetas alrededor del Sol en órbitas elípticas, desterrando de esta forma las teorías geocéntricas que habían estado vigentes durante siglos.

En el siglo XVII se produjo la transformación real de la concepción tradicional del mundo medieval en el pensamiento científico moderno, pudiendo considerarse esta como la época dorada de la Astronomía de posición.

Aunque suele atribuirse a Galileo Galilei la invención del telescopio, en realidad este físico y matemático italiano solamente lo perfeccionó, pero a él se debe la idea genial de utilizar dicho instrumento para estudiar el firmamento. En 1610 descubrió las manchas del Sol, el relieve de la Luna y midió la rotación solar; asimismo, observó las fases de Venus y los cuatro satélites principales de Júpiter (a los que denominó Calixto, Europa, Ganímedes e Io), que aún hoy se conocen como satélites galileanos; estos últimos descubrimientos le llevaron a intentar demostrar que las órbitas de cristal de Aristóteles no existían y que no todos los cuerpos celestes giraban alrededor de la Tierra. Por otra parte, corregiría también a algunos seguidores copernicanos que defendían que todos los cuerpos celestes orbitaban alrededor del Sol. Galileo divulgó los resultados de sus observaciones iniciales de la Luna, las estrellas y las lunas de Júpiter en el tratado *Sidereus nuncius (Mensajero sideral)* [Galilei 1610], siendo esta la primera obra científica basada en observaciones astronómicas realizadas con un telescopio; su publicación se considera el origen de la moderna Astronomía y, junto con las ya mencionadas leyes de su contemporáneo Johannes Kepler, provocó el colapso definitivo de la teoría geocéntrica.

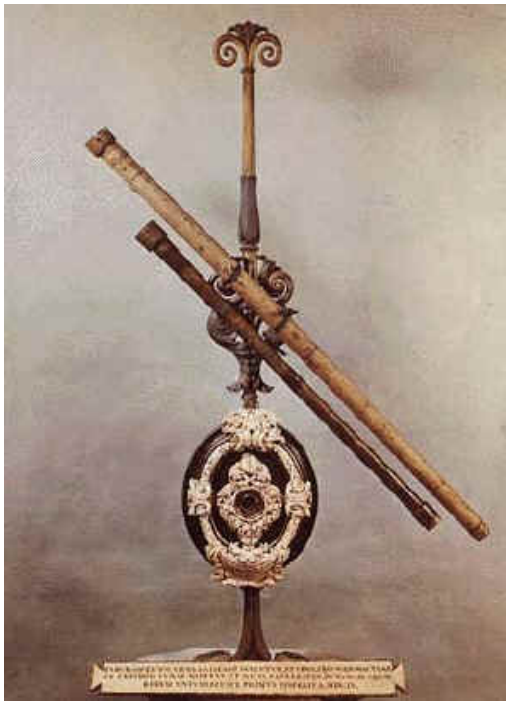


Figura 2. Telescopio de Galileo, conservado en el museo de Historia de la Ciencia de Florencia

Esta época de esplendor de la Astronomía culminó con los trabajos fundamentales de Sir Isaac Newton, artífice del telescopio reflector, cuyas teorías matemáticas permitieron explicar las leyes de Kepler para el movimiento de los planetas. Este científico inglés es autor de los *Philosophiae naturalis principia mathematica* [Newton 1687], conocidos universalmente como los *Principia*, en los que se describe su famosa ley de la Gravitación Universal. Newton fue el primero en demostrar que las leyes naturales que gobiernan el movimiento de los cuerpos celestes son las mismas que las que gobiernan el movimiento en la Tierra.

A partir de finales del siglo XVII todo fue diferente, pues dio comienzo la era de la tecnología. En esta época se empezaron a construir potentes telescopios, con sistema reflector basado primeramente en lentes y más tarde en espejos. De esos años datan los pri-

meros valores fiables para las distancias de los cuerpos celestes, obtenidos mediante procedimientos de triangulación. A mediados del siglo XVIII, Lacaille y Lalande midieron la distancia entre la Tierra y la Luna e incluso intentaron hacer lo mismo con el Sol observando el paso de Venus por delante de su disco desde diferentes puntos de la Tierra. En esta época se fundan también los grandes observatorios de la Marina, como los de Greenwich (1675) o Cádiz (1754), debido a que las grandes potencias de entonces basaban su hegemonía en el comercio marítimo y necesitaban, por tanto, de la observación de los astros, ya que era este el medio utilizado para guiar los barcos.

Figura. 3. *Astronomía nova*, trabajo más importante de Kepler en Astronomía; Portada de *Sidereus nuncius* de Galileo; *Tablas Alfonsíes*; Primera edición de los *Principia* de Newton que se conserva en la *Wren Library* del *Trinity College* en Cambridge

Ya en el siglo XIX otro avance tecnológico de gran relevancia marcaría el nacimiento de la Astrofísica: la invención del espectroscopio, instrumento que posibilita el análisis de la luz y la determinación de algunas propiedades físicas de las estrellas. Esta rama de la Astronomía moderna alcanza su culminación en el siglo XX, siendo ambos términos prácticamente sinónimos en la actualidad [de Toro 1999].

El camino de esta disciplina arrancaba con el descubrimiento de las líneas del espectro solar por parte de Wollaston en 1802, quien al considerar un foco en forma de rendija obtuvo una imagen virtual del espectro solar en la que se apreciaban siete líneas oscuras, que serían estudiadas en 1814 por Fraunhofer. Este óptico alemán interpuso una lente entre el prisma y la pantalla receptora, transformando así las imágenes virtuales en reales; a él se debe también el descubrimiento de la coincidencia entre las líneas del espectro solar y las correspondientes a elementos terrestres, pues fue quien identificó la línea D con el sodio.

En 1838 Bessel logró determinar, nuevamente mediante el método de la triangulación, la distancia de la estrella 61 Cygni, poniendo de manifiesto por primera vez que las

estrellas estaban a enormes distancias, lo cual las convertía en soles como el nuestro pero situados mucho más lejos. En la segunda mitad del siglo XIX, Kirchhoff y Bunsen sentaron las bases del análisis espectral de las estrellas, demostrando que las líneas del espectro no están distribuidas al azar, sino que ocupan lugares concretos que responden a la presencia de determinados elementos químicos [Kirchhoff 1860]. Puede considerarse que este descubrimiento marca el inicio formal de la Astrofísica, al extender el dominio de la Astronomía tradicional con el concurso de la Física teórica y experimental.

El estudio espectral de las estrellas condujo a la formulación de los primeros sistemas de clasificación estelar basados en la observación de sus espectros, propuestas que culminarían en 1890 con los trabajos de Cannon y Pickering quienes obtuvieron y clasificaron los espectros de aproximadamente 225.000 estrellas, estableciendo de este modo los rudimentos del sistema que todavía se utiliza en la actualidad. Su trabajo se publicó en nueve volúmenes iniciales, conocidos como el *Henry Draper Catalogue*, que se fueron completando con la observación y clasificación de estrellas hasta abarcar unas 359.000 en su versión extendida final [Cannon 1949a]; aunque ha sufrido algunas modificaciones y correcciones posteriores, el sistema propuesto por Cannon y Pickering sigue aún vigente hoy en día, y todavía continúa siendo habitual entre los astrónomos la identificación de una estrella por su número en el catálogo *Henry Draper* o número HD.

El establecimiento de este sistema de clasificación inicial permitió que, de forma independiente y alrededor del año 1912, un astrónomo danés, E. Hertzsprung, y otro norteamericano, H. R. Russell, elaborasen, cada uno por separado, el célebre diagrama que posteriormente se conocería con las iniciales de sus nombres (diagrama H-R) [Russel 1914]. En él se agrupan las estrellas en función de su tipo espectral y su luminosidad, comprobando lo que ya habían descrito Kirchhoff y Bunsen: que estas se distribuyen en zonas muy concretas, abriéndose con ello las puertas al estudio de la evolución estelar.

En ese mismo año, 1912, Henrietta S. Leavitt descubrió la existencia de una relación directa entre el período de variación de la luminosidad de las estrellas variables cefeidas y su luminosidad absoluta, lo cual permitió calcular por primera vez la distancia a las galaxias cercanas, siempre que fuera posible identificar cefeidas en ellas. A finales de los años 20, Hubble y Humason descubrieron que las líneas espectrales de las galaxias estaban sistemáticamente desplazadas hacia el rojo, a causa del efecto Doppler, y que este desplazamiento era tanto mayor cuanto más lejana se encontrara la galaxia. Según la ley de Hubble, las galaxias se alejan entre sí con una velocidad que es mayor a mayores distancias; el efecto Doppler explica que se encuentre la huella de ese alejamiento en la luz de las galaxias, ya que por ser fuentes de ondas luminosas en movimiento, la luz que emiten se desplaza hacia bajas frecuencias, es decir, al rojo o hacia longitudes de onda mayores. Con este

hallazgo quedaba descubierta la expansión del Universo, hito que vendría a significar el comienzo de la Cosmología como ciencia.

Con la llegada de la Radioastronomía, la Astronomía por satélite y el gran desarrollo de la Física teórica, en la última mitad del siglo XX la Astronomía experimentó un progreso espectacular, de tal forma que los descubrimientos se sucedieron a un ritmo vertiginoso. En 1960 se descubre la primera fuente de rayos X; en 1967 se tiene conocimiento del primer púlsar; 1973 es el año de las primeras fotografías del Sol tomadas desde el espacio; en 1976 tiene lugar el primer aterrizaje de una sonda automática en Marte (Viking 1 y 2); en 1983, con el lanzamiento del satélite IRAS, da comienzo la Astronomía infrarroja desde el espacio; y en 1987 se detecta por primera vez la llegada a la Tierra de neutrinos procedentes del espacio (supernova 1987A). Para culminar esta cadena de acontecimientos, en 1995, el telescopio espacial Hubble comienza a enviar a la Tierra informaciones diez veces más precisas que las disponibles hasta el momento, impulsando con ello el conocimiento astronómico de forma extraordinaria.

El estudio del origen y evolución de las estrellas constituye una de las áreas más activas de la Astronomía actual. La teoría de la evolución estelar parte del hecho de que, a pesar de que la mayoría de las estrellas parecen astros inmutables en el cielo sin ningún rasgo aparente que denote cambios o evolución en el tiempo de sus propiedades, en realidad se trata de enormes centrales nucleares que consumen energía, por lo que dichos cambios han de ocurrir necesariamente y sin lugar a duda. El hecho de que no se observen evidencias directas de esa evolución se debe, en la mayoría de los casos, a las escalas de tiempo astronómicas en que se producen, del orden de cientos de millones de años. A pesar de ello, se pueden estudiar las transformaciones estructurales de las estrellas si se observan astros que teniendo la misma masa tienen edades diferentes; o bien considerando estrellas coetáneas que sin embargo muestren propiedades físicas muy diversas debido a que se trata de objetos de masas diferentes. Los estudios evolutivos son en la actualidad, por lo tanto, una parte esencial de la Astrofísica, pues permiten descubrir y analizar los cambios que con el tiempo se producen en las condiciones físicas y la composición química de las estrellas. Uno de los métodos más útiles para extraer información básica sobre las propiedades físicas y químicas en la atmósfera de una estrella es la obtención de la distribución espectral de la luz que emite, es decir, su espectro electromagnético (EEM).

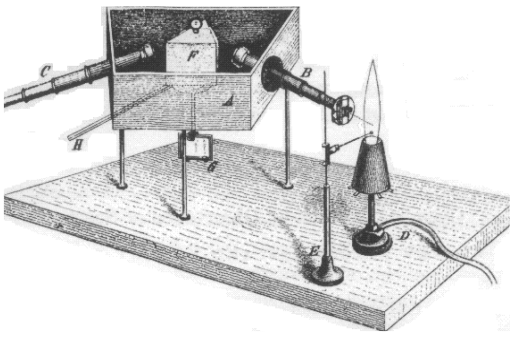


Figura 4. Instrumento utilizado por Kirchhoff y Bunsen para la observación de los espectros

La radiación electromagnética que se origina en el interior de una estrella experimenta cambios significativos cuando atraviesa su atmósfera, que es un medio material compuesto principalmente por hidrógeno y helio, además de cantidades relevantes de otros elementos, moléculas e iones. El espectro de radiación de una estrella (la distribución de la energía que emite como función de la longitud de onda) es una curva similar a la radiación de un cuerpo negro que muestra la temperatura del plasma estelar, mientras que la aparición de líneas y bandas espectrales en la distribución de luz es consecuencia de las transiciones de energía de aquellos elementos y moléculas que lo componen. La intensidad relativa de las características espectrales depende estrechamente de las condiciones físicas (temperatura, densidad, presión electrónica, etc.) y de las abundancias químicas de elementos [Zombeck 2007]. Por ello la espectroscopia estelar se ha convertido en una de las herramientas más importantes a la hora de estudiar estas propiedades de las estrellas.

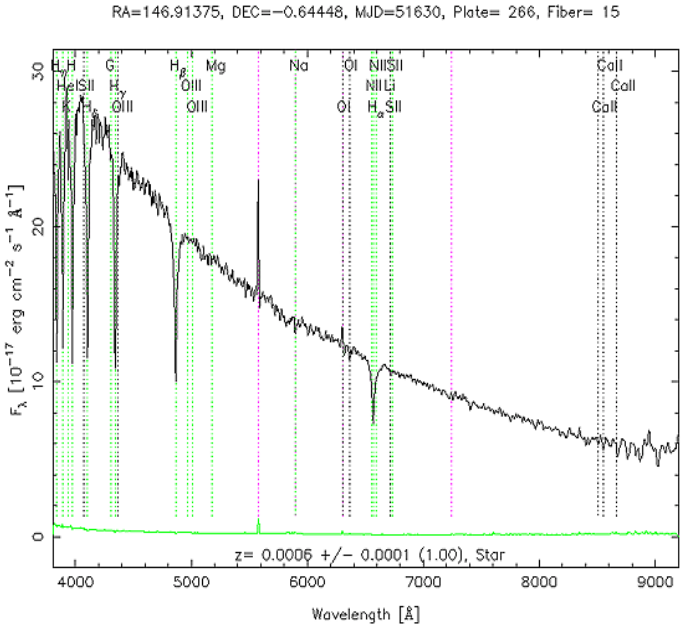


Figura 5. Espectro de una estrella de tipo B, en el que se aprecian líneas de absorción y de emisión

Los espectros estelares se recogen en los telescopios mediante espectrógrafos y detectores apropiados. Los observadores recogen la distribución de flujo energético de cada objeto y reducen estos datos con la ayuda de aplicaciones informáticas específicas, como por ejemplo IRAF [Valdes 1984], obteniendo un espectro unidimensional calibrado en flujo energético (erg^{-1} cm^{-2} s^{-1} $Å^{-1}$) y longitud de onda, expresada habitualmente en Ángstroms (Å) o en micras (μ). Hasta hace unas décadas, la región visible y la región de ondas de radio del espectro electromagnético eran las únicas accesibles al estudio con un telescopio desde Tierra. Actualmente, debido al desarrollo de los detectores infrarrojos, la región observable desde Tierra se ha extendido a la zona infrarroja del EEM. El desarrollo de la

Astronomía espacial ha ampliado considerablemente las posibilidades de experimentación al permitir la observación de la radiación más energética, es decir, desde la región ultravioleta a la de rayos X y Gamma.

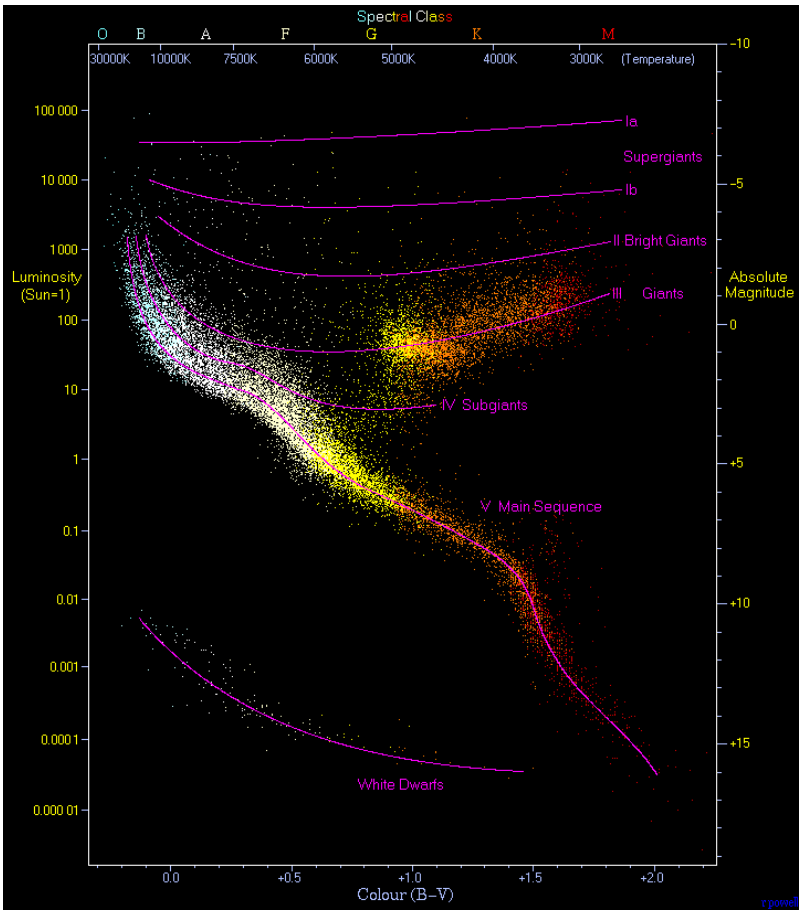


Figura 6. Diagrama H-R que muestra la relación entre la magnitud absoluta, la luminosidad y la temperatura efectiva de las estrellas

Los espectros permiten por una parte identificar los elementos constituyentes de la fotosfera de las estrellas y conocer sus abundancias y, por otra, inferir su condición física general, manifestada a través de propiedades tales como la temperatura, la densidad o la presión. La determinación de dichos parámetros se basa comúnmente en el uso de programas de síntesis espectral, los cuales utilizan un modelo matemático de la atmósfera de las estrellas y, por consiguiente, presentan ciertas limitaciones. Para obtener una información cuantitativa básica sobre el tipo de estrella de que se trata, lo habitual es recurrir a su clasificación en grupos empíricos previamente establecidos, los cuales evitan el paso por un modelo numérico y sus consiguientes simplificaciones.

La clasificación taxonómica de las estrellas, basada en el análisis de sus espectros en la región visible, se ha formalizado en un esquema bidimensional ampliamente conocido y

utilizado, el sistema Morgan-Keenan o MK [Morgan 1943], el cual ordena las estrellas en función de sus temperaturas efectivas y de sus niveles de luminosidad. De esta forma las estrellas se dividen en grupos, denominados tipos espectrales (designados según la secuencia de letras O-B-A-F-G-K-M), que se fundamentan principalmente en la intensidad de las líneas de hidrógeno y helio, y en la presencia o ausencia de bandas moleculares y de algunas líneas significativas de Ca, Fe, Mg, etc. Asimismo, el brillo intrínseco de las estrellas determina su pertenencia a una clase de luminosidad (etiquetadas desde la I hasta la V), y se refleja también en la anchura de algunas líneas específicas del espectro.

Desde que el sistema fue propuesto por sus creadores, la clasificación estelar MK ha sido una herramienta habitual entre los astrónomos estelares. Su éxito y difusión aún hoy en día, se deben fundamentalmente a que proporciona información cuantitativa básica y fácilmente contrastable sobre las estrellas. Se trata además de información totalmente empírica, que no descansa en ningún modelo matemático con sus aproximaciones e incertidumbre inherentes. De una estrella clasificada en el sistema MK se conoce, con bastante aproximación, su temperatura efectiva y, además, su pertenencia a una clase de luminosidad determinada permite inferir su estado evolutivo (secuencia principal o posterior).

El análisis de la distribución de tipos espectrales en una muestra homogénea de estrellas (por ejemplo un cúmulo estelar) permite inferir propiedades sobre el cambio temporal de sus condiciones físicas y, en definitiva, sobre su evolución. Una vez obtenidos los espectros mediante un telescopio y la instrumentación adecuada (un espectrógrafo y un detector tipo CCD), el estudio de sus tipos espectrales y el análisis de la información sobre las condiciones físicas y abundancias químicas de su fotosfera, deducible a partir de los espectros, permite entender los cambios temporales de las condiciones físicas en dichas estrellas y, por lo tanto, es tarea habitual entre los astrónomos estelares.

La instrumentación astronómica actual, tanto terrestre como espacial, permite efectuar de forma casi automática la observación programada de multitud de objetos en grandes zonas del cielo (*surveys* astronómicos). En el caso de observaciones de tipo espectroscópico, la clasificación de los espectros de las estrellas observadas es uno de los aspectos esenciales y, por tanto, se convierte en una fase que ha de llevarse a cabo de la forma más rigurosa, objetiva y eficiente posible.

Los avances en el área de la Inteligencia Artificial acontecidos en las últimas décadas están permitiendo dar un salto cualitativo en la dirección de la automatización de la clasificación estelar. En la siguiente sección se recoge una breve revisión de las principales aplicaciones que han tenido y tienen las técnicas de esta disciplina de las Ciencias de la Computación en el campo de la Astrofísica.

1.2 La Inteligencia Artificial en la Astrofísica

En las últimas dos décadas se han producido numerosos avances técnicos en la instrumentación astronómica. A modo de ejemplo, se puede mencionar: el desarrollo de detectores más sensibles, la construcción de telescopios con mayores áreas colectoras, espectrógrafos multiobjeto y multirrango espectral, la existencia de multitud de observatorios astronómicos en órbita, el telescopio espacial Hubble, etc. Este gran desarrollo tecnológico, unido a la automatización del proceso de observación astronómica, ha tenido como consecuencia que el número de datos astronómicos disponibles, así como su calidad, haya aumentado en varios órdenes de magnitud a lo largo de dicho período de tiempo. La Astrofísica estaría pues evolucionando hacia un uso más racional del costoso material observacional mediante la explotación inteligente de las extensas bases de datos astronómicas, tanto terrestres como espaciales, ya existentes y futuras.

Hoy en día, casi cualquier proyecto específico en instrumentación astronómica (p. ej. el Gran Telescopio de Canarias, de reciente puesta a punto, o cualquier observatorio espacial) incluye tanto la creación de un archivo de datos, como un proyecto sobre su explotación mediante técnicas de análisis automáticas o pseudo-automáticas. Este hecho está impulsando notablemente el desarrollo de aplicaciones astronómicas basadas en Inteligencia Artificial (IA).

La utilización de técnicas de Inteligencia Artificial en el análisis de datos astronómicos ha sido relativamente frecuente desde mediados de la década de los 90. Considerando las dos grandes ramas de la IA, es decir, los sistemas simbólicos-deductivos (donde se incluyen los sistemas basados en conocimiento o sistemas expertos) y las aproximaciones denominadas inductivas o subsimbólicas (cuyo arquetipo son las redes de neuronas artificiales o sistemas conexionistas), se observa que prácticamente la totalidad de los autores que han aplicado alguna de estas técnicas en el campo de la Astrofísica computacional, lo han hecho bajo el segundo paradigma, esto es, las redes de neuronas artificiales y concretamente utilizando en la mayoría de los casos su versión más sencilla, las redes multicapa (MLP).

Las técnicas de redes neuronales admiten diferentes clasificaciones, en función de la forma y métodos de entrenamiento: supervisado, no supervisado, redes competitivas, etc.; de los algoritmos y reglas de aprendizaje: regla delta generalizada, regla de diferencias de Hebb, aprendizaje de Kohonen, etc.; de la arquitectura de la red: alimentadas hacia delante, alimentadas hacia atrás, etc.; de las funciones de propagación y activación: funciones de base lineal, de base radial, activación sigmoidal, activación gaussiana, etc.; de las aproximaciones temporales que implementen: redes síncronas, redes asíncronas, etc.; de la forma en

la que se interconectan las distintas capas; del carácter determinista o estadístico del aprendizaje, etc.

En el caso de la Astrofísica computacional, la gran mayoría de los autores han utilizado modelos básicos de redes multicapa (MLP), con algoritmos de aprendizaje supervisados y basados en la retropropagación del error de entrenamiento (*backpropagation*).

La Inteligencia Artificial ha tenido y tiene campos de aplicación muy diversos en la disciplina científica de la Astrofísica. La identificación y clasificación de galaxias en imágenes de *surveys* fue uno de los primeros [Rappaport 1988]. Otros temas pioneros han sido la clasificación de espectros del satélite IUE en el rango ultravioleta mediante el diseño de un sistema experto [Rampazzo 1988]; la clasificación mediante métodos bayesianos de los objetos almacenados en la base de datos del satélite IRAS [Goebel 1989]; el análisis de curvas de luz de estrellas variables Mira [Mennessier 1990]; o la predicción de manchas solares mediante redes de neuronas artificiales [Villareal 1989].

Algunos ejemplos más recientes serían la clasificación morfológica de galaxias [Naim 1995] [Goderya 2002], la discriminación automática entre estrellas y galaxias [Odewahn 1994] [Andreon 2000], la clasificación espectral de galaxias [Sodré 1994] [Ball 2004], la colisión entre galaxias [Edirisinghe 2002], la predicción de la actividad solar [Calvo 1995], el análisis de estrellas variables [Andronov 1999], la deducción de abundancias en galaxias [Taylor 2007] o la resolución automática de curvas de luz [Sarro 2006] [Guinan 2007].

Desde la primera mitad de la década de los noventa, una de las aplicaciones más frecuentes ha sido la clasificación y parametrización de espectros estelares, área donde la experimentación con sistemas automáticos basados en Inteligencia Artificial ha dado buenos resultados y en la cual se enmarcaría el estudio realizado en esta tesis doctoral.

Entre los primeros trabajos en este campo específico de aplicación, se puede mencionar el proyecto de clasificación automática iniciado por von Hippel et ál. en 1994. Con el objetivo de clasificar automáticamente, y solamente en temperatura, los espectros estelares de alta dispersión de un *survey* astronómico, los autores proponen una red *backpropagation* simple con 382 neuronas de entrada correspondientes a los valores del flujo energético del espectro, una capa oculta con 3 neuronas y una única neurona a la salida, pues consideran la clasificación en temperatura como una función continua que va desde 0 para las estrellas más calientes de su muestra, estrellas de tipo espectral O3 en el sistema MK, hasta 1 para las más frías que serían de tipo M9. Para el entrenamiento y validación de la red se utilizaron 575 estrellas digitalizadas de 6 placas fotográficas (espectros con 2 Å de resolución en el rango espectral 3843-5150 Å); en las sucesivas fases de experimentación se utilizaron 5 placas para entrenar la red y 1 para probarla, variando la composición aleatoriamente. Con estas características, la red propuesta fue capaz de determinar la clasificación en temperatu-

ra para estrellas B3 a M4 con una precisión (desviación típica) de 2.8 subtipos basándose en la información del continuo espectral únicamente, 2.2 subtipos basándose sólo en la información aportada por las líneas espectrales y, finalmente, 1.7 subtipos considerando el espectro completo [Hippel 1994].

En ese mismo año, 1994, Gulati et ál. propusieron una primera aproximación a la clasificación bidimensional de espectros de baja resolución (11 Å) procedentes de librerías digitalizadas. Considerando 67 regiones espectrales de interés, diseñaron una red *backpropagation* con 161 valores de flujo en la capa de entrada, una única capa oculta de 64 neuronas y un vector de salida de 55 neuronas que codificaba tanto temperatura como luminosidad; lograron así obtener una resolución de 2 subtipos espectrales en temperatura, aunque en luminosidad la red, debido principalmente a las peculiaridades de su codificación, no sería capaz de discriminar [Gulati 1994].

En el año 1995, Weaver y Torres-Dodgen presentaron un trabajo sobre la clasificación automática de espectros NIR (infrarrojo cercano) pertenecientes a un atlas de estrellas de tipo A, para clases de luminosidad de I a V. El sistema de clasificación se basaba de nuevo en una red *backpropagation* de 3 capas con 512 valores de flujo como entrada y un vector tridimensional de salida compuesto por la clasificación en temperatura, una probabilidad asociada y el valor del enrojecimiento. Esta red fue entrenada y probada con un conjunto de 159 espectros NIR, sin manipulación previa ni corrección del enrojecimiento, obteniendo una precisión de 0.6 subtipos espectrales y 0.35 clases de luminosidad para las estrellas de tipo A [Weaver 1995].

Faúndez-Abans et ál. presentan la aplicación tanto de técnicas jerárquicas de análisis *cluster* como de redes de neuronas artificiales a la clasificación de nebulosas planetarias (un tipo de estrellas evolucionadas), en base a su composición química. Se diseñan nuevamente redes *backpropagation* entrenadas con el algoritmo de aprendizaje de Ripley [Ripley 1994]. En una primera aproximación, estas redes utilizan 5 neuronas de entrada para las abundancias químicas de los elementos principales (He, O, N, S y Ar), y 5 neuronas de salida correspondientes a las clases de nebulosas consideradas; en la implementación final se redujeron las neuronas de entrada eliminando las abundancias de Ar y S. La red propuesta fue validada sobre una muestra de 192 nebulosas conocidas, consiguiendo un 74.1% de coincidencia con la clasificación previa y un 13.2% de indecisiones que incluían la clasificación previa como una de las dos alternativas. Los autores combinan finalmente ambos métodos (técnicas de *clustering* y redes neuronales) para aportar la clasificación de 41 objetos nuevos no clasificados previamente [Faúndez-Abans 1996].

A esta primera generación de trabajos pioneros en la aplicación de técnicas computacionales para abordar aspectos concretos de la clasificación espectral, le sucedió otra en la

que se llevaron a cabo estudios más detallados para tratar de solventar el problema global de la clasificación automática de las estrellas, tanto en el sistema de referencia MK como mediante la parametrización de su espectro.

En el marco de la clasificación MK, retomando su estudio para estrellas de tipo A, Weaver y Torres-Dodgen desarrollan un sistema basado en una jerarquía de redes de neuronas *backpropagation* que obtienen el tipo espectral y la luminosidad a partir de espectros NIR con una precisión comparable a la de los expertos humanos [Weaver 1997]. En estudios posteriores este método se perfeccionó para aplicarlo a la clasificación de ambos componentes de las estrellas binarias [Weaver 2000].

En esta misma dirección, Singh, Gulati y Gupta abordan la clasificación MK en temperatura de una colección de 158 espectros ópticos de estrellas de tipos O a M mediante el desarrollo de un método que emplea la técnica de análisis de componentes principales (PCA) para reducir la dimensionalidad de los datos que van a ser presentados a una red de neuronas *backpropagation* (de 659 valores de flujo iniciales a 20 componentes), que será la que finalmente lleve a cabo la clasificación, obteniendo una respuesta en forma de vector de probabilidad de pertenencia a cada uno de los 55 subtipos espectrales considerados por los autores en la clasificación manual del catálogo de referencia [Singh 1998].

La técnica de análisis de componentes principales combinada con redes de neuronas artificiales se utilizó de nuevo en un estudio similar al anterior que iniciaron también en 1998 Bailer-Jones, Irwin y von Hippel. En este caso, la solución adoptada consiste en un modelo de clasificación bidimensional basado en un comité de 10 redes *backpropagation* para los tipos espectrales considerados (B2-M7) y una única red probabilística para las clases de luminosidad contempladas (III, IV y V); el método PCA permitió a los autores comprimir de forma óptima los espectros reduciendo las entradas de las redes a 50 componentes principales [Bailer-Jones 1998]. Los resultados obtenidos sobre una muestra de 5000 espectros ópticos procedentes de las placas del *Michigan survey* [Houk 1994] son de una precisión de 1.09 subtipos en temperatura y la asignación de la clase de luminosidad correcta para el 95% de las estrellas enanas y gigantes.

También en 1998, pero en el rango ultravioleta, Vieira y Ponz estudian la aplicabilidad de dos métodos automáticos de clasificación espectral en temperatura: clasificación supervisada utilizando redes *backpropagation* y clasificación no supervisada utilizando mapas auto-organizativos (SOM). Ambas técnicas se implementaron para clasificar una muestra de 229 estrellas (tipos O3-K0), procedentes del atlas de referencia IUE de baja dispersión de estrellas normales [Heck 1984], previamente clasificadas manualmente en el sistema MK siguiendo el método morfológico tradicional y utilizando únicamente criterios aplicables al rango ultravioleta. En el enfoque supervisado, los autores diseñaron una red *backpropagation*

estándar con 744 valores de flujo a la entrada (1150-3200 Å) y 51 neuronas de salida, una por cada subtipo considerado, obteniendo una resolución de 1.1 subtipos espectrales. Mediante la técnica de aprendizaje no supervisado, diseñaron un mapa de 8x8 y 744 entradas con el que obtuvieron una resolución de 1.62 subtipos [Vieira 1998].

En cuanto a la otra vertiente de esta segunda generación de aplicaciones, es decir, la obtención de parámetros físicos de las estrellas, cabe destacar como trabajo pionero el del equipo formado por Bailer-Jones, Irwin, Gilmore y von Hippel [Bailer-Jones 1997]; los autores utilizan redes *backpropagation* estándar con la peculiaridad de que su entrenamiento no efectúa con estrellas reales, sino con 155 espectros sintéticos generados mediante el software SPECTRUM [Gray 1994a]. Estas redes se utilizaron para estimar la temperatura efectiva, T_{eff}, de los 5000 espectros del *Michigan survey* que abarcan los tipos espectrales de B2 a M7 [Houk 1994].

En esta misma línea de investigación, Snider et ál. diseñan redes *backpropagation* para la estimación de parámetros atmosféricos (T_{eff}, log g, [Fe/H]) de 279 estrellas pertenecientes a los tipos espectrales F y G, obteniendo una precisión de 135-150 K para la temperatura, 0.25-0.30 dex para la gravedad y 0.15-0.20 dex para la metalicidad. Además, los autores realizan un estudio adicional de la influencia de la señal a ruido de los espectros en la medición de los parámetros físicos [Snider 2001].

En los trabajos más recientes de los equipos de investigación activos en el área se observa que la experimentación en este campo ha evolucionado hacia la aplicación de métodos ya contrastados en décadas anteriores a problemas específicos de clasificación y parametrización espectral.

De este modo, Gupta et ál. presentan un esquema de redes *backpropagation* capaz de clasificar apropiadamente, dentro de 17 subclases definidas previamente por los propios autores [Gupta 2004], el 80% de los 2000 espectros (8-23 μm) procedentes de la base de datos *Calgary* del satélite IRAS [Olnon 1986].

Willemsen et ál. utilizan redes *backpropagation*, entrenadas con espectros sintéticos, para determinar la metalicidad, T_{eff} y log g de 1000 estrellas de los *clusters* M 55 y ω centauri, obteniendo una precisión del orden de 140-190 K en temperatura, 0.3-0.4 dex en gravedad y 0.15-0.20 dex para la metalicidad [Willemsen 2005].

Giridhar et ál. aplican el sistema propuesto por Snider y sus colaboradores para parametrizar una muestra de 90 estrellas no clasificadas procedentes de sus propias observaciones directas, obteniendo una precisión de 200 K en temperatura, 0.4 en gravedad y 0.3 dex en metalicidad [Giridhar 2006].

Bazarghan y Gupta diseñan redes de neuronas artificiales probabilísticas (PNN) para clasificar automáticamente aproximadamente 5000 espectros SDSS (*Sloan Digital Sky Survey*) [York 2000] en 158 subtipos, desde el O hasta el M, con una tasa de acierto del 88% [Bazarghan 2008].

Bailer-Jones et ál. proponen el desarrollo de métodos automáticos de detección y discriminación para la futura base de datos de objetos astronómicos de la misión espacial GAIA de la Agencia Espacial Europea [Bailer-Jones 2008].

Como ponen de manifiesto la mayoría de los trabajos mencionados, la tendencia actual en el análisis de datos astronómicos basado en técnicas de Inteligencia Artificial se orienta hacia las redes de neuronas artificiales.

En el problema específico de la clasificación automática de espectros estelares en el sistema MK, donde los tipos espectrales se determinan, como se detallará en el siguiente capítulo, mediante la comparación directa con los espectros de un conjunto seleccionado de estándares, la experiencia y el conocimiento del astrónomo en la tarea de clasificación resultan completamente fundamentales e imprescindibles. Es por ello que, en este campo de la clasificación no supervisada de espectros estelares en el sistema MK, consideramos que la naturaleza del problema se ajusta perfectamente a los objetivos de un sistema experto específico. Más aún, pensamos que dicho sistema podría tener una aplicación complementaria en la ayuda y asistencia en el entrenamiento de expertos espectroscopistas.

En el problema de la extracción de parámetros físicos tales como temperatura, gravedad o abundancia de metales, las redes de neuronas artificiales parecen una aproximación adecuada, pues han demostrado su efectividad en el tratamiento de problemas donde los parámetros dependen de varias variables y dicha dependencia es fuertemente no lineal.

En relación con las redes de neuronas artificiales, si bien los resultados obtenidos en los trabajos previos revisados ampliamente en esta sección son, en general, buenos, consideramos que la utilización de distintas técnicas de forma conjunta, en lo que se ha dado en llamar *sistemas híbridos*, puede aportar nuevos enfoques a la hora de abordar el problema de la clasificación en el sistema MK y la parametrización de espectros estelares. Se puede entender este carácter híbrido de una aplicación computacional en un sentido amplio, esto es, integrar técnicas de razonamiento basadas en modelos de reglas de conocimiento; integrar distintos modelos de redes de neuronas artificiales (en función del objetivo del análisis); e incluir técnicas clásicas de análisis estadístico, como componentes principales (PCA), y todo ello fusionado a través de una base de datos relacional.

1.3 Objetivos de esta tesis doctoral

El presente trabajo de tesis doctoral se enmarca dentro de un proyecto multidisciplinar que ha permitido trabajar juntos a investigadores del Área de Ciencias de la Computación e Inteligencia Artificial de la Universidade da Coruña, entre los cuales se encuentra la autora, y a investigadores del Área de Astrofísica de la misma Universidad.

El propósito fundamental de la investigación es el análisis, diseño y desarrollo de un sistema de información para la clasificación automática de espectros estelares, provenientes de observaciones astronómicas, aplicando técnicas de Inteligencia Artificial.

Este objetivo principal se puede desglosar en varios objetivos concretos que a continuación se enumeran:

- Adquisición, modelización y representación del conocimiento heurístico del experto. El sistema ha de permitir integrar el conocimiento del astrónomo experto en tareas de clasificación en una base de reglas, donde el conocimiento se debe reflejar de manera objetiva mediante relaciones jerarquizadas entre diferentes indicadores espectrales fácilmente mesurables en los espectros. Para ello la colaboración con astrónomos profesionales es fundamental.

- Análisis de sensibilidad exhaustivo de los distintos criterios que se utilizan en la clasificación espectral, evaluando el grado de adecuación y discriminación de cada uno de ellos dentro los diferentes tipos de espectros en el sistema MK. Para ello se ha considerado la información heurística de los astrónomos, la información bibliográfica disponible sobre criterios de clasificación MK, y el uso de algoritmos que minimicen y optimicen el número de índices necesarios para la clasificación. Se espera lograr que las fases de validación y verificación del sistema final aporten nuevos criterios que podrían mejorar significativamente los resultados del proceso de clasificación espectral.

- Análisis diferencial de distintos métodos computacionales, estadísticos (PCA, *K-means*, etc.) y basados en Inteligencia Artificial (redes neuronales, sistemas expertos, redes funcionales, etc.), para resolver problemas tanto de clasificación de espectros estelares en el sistema MK como de extracción de parámetros físicos de los mismos.

- Estudio de diferentes configuraciones de redes neuronales (tipo de red, arquitectura, algoritmo de aprendizaje, tipo de entrenamiento, etc.), dedicadas a la clasificación y parametrización de espectros. Este análisis pretende identificar el tipo de red óptima para cada problema específico.

- Desarrollo de una interfaz ergonómica (en red) para el usuario-astrónomo, la cual facilite la visualización de los espectros, la realización de medidas morfológicas en los mismos, y las operaciones básicas de preprocesado que le permitan tratar los espectros previamente al proceso de clasificación.

- Diseño e implementación de un módulo explicativo, integrado en la interfaz desarrollada, que permita conocer el proceso de razonamiento seguido por el sistema para alcanzar una conclusión, resultando así de gran utilidad en la formación de nuevo personal en el campo de la clasificación espectral. Esta funcionalidad podría asimismo permitir la confirmación, exclusión e incluso obtención de nuevas reglas de clasificación.

- Integración y estructuración de toda la información en una base de datos que contenga un conjunto uniforme de espectros de estrellas estándares de clasificación. Esta base de datos de observaciones astronómicas será dinámica y, por lo tanto, se irá enriqueciendo con los resultados de las clasificaciones que se vayan obteniendo en su fase de explotación, disponiendo asimismo de una interfaz web para su acceso público.

Y finalmente,

- Formalización de un sistema híbrido que integre técnicas de procesado de señales, sistemas basados en el conocimiento que implementan lógica difusa, técnicas de *clustering*, redes de neuronas artificiales y redes funcionales, estructuradas e integradas a través de una base de de datos relacional con una interfaz web cómoda y sencilla. Tal sistema híbrido debería ser capaz de determinar y aplicar el método de clasificación más adecuado para cada tipo concreto de espectro. Cabe esperar que un sistema que combine diferentes técnicas sea mucho más versátil que aquel que se base en una única técnica, puesto que presentará una capacidad mayor de adaptación al problema de la clasificación estelar. En cuanto a los objetivos de diseño del mismo, se tenderá hacia un esquema modular. De esta forma, el sistema será muy flexible y permitirá incorporar con facilidad nuevas técnicas de procesamiento astronómico que puedan surgir en un futuro, o bien acoplar otros tipos de análisis basados en técnicas de computación distintas que puedan resultar adecuadas para resolver el problema de clasificación/parametrización espectral.

Esta tesis doctoral se estructura en 9 capítulos. Tras un primer capítulo introductorio, en el capítulo 2 se describe con detalle el sistema de clasificación de referencia y las técnicas utilizadas comúnmente para determinar la temperatura y luminosidad de las estrellas. Los capítulos 3, 4 y 5 suponen la aportación de esta tesis a la clasificación estelar, pre-

sentándose en ellos el sistema desarrollado así como sus resultados contrastados. En el capítulo 6 se expone la aplicación de la solución propuesta en la extracción de parámetros físicos de los espectros. El capítulo 7 describe la base de datos y la interfaz web desarrolladas. Finalmente, en los capítulos 8 y 9, se abordan las conclusiones principales de esta tesis doctoral y se proponen algunas líneas de trabajo que pueden seguirse en el futuro en el campo de la clasificación espectral automática.

2 CLASIFICACIÓN DE ESPECTROS ESTELARES EN EL SISTEMA MK

Lo admirable no es que existan las estrellas sino que el hombre haya podido dar cuenta de su existencia

Jacques Anatole France

2.1 La espectroscopia astronómica como herramienta de clasificación y parametrización de estrellas

La predisposición primigenia del hombre por explorar y conocer el mundo que le rodea, junto con la fascinación ejercida por los astros ya sobre las primeras civilizaciones, condujo a un interés creciente en la observación directa de los fenómenos celestes, lo cual dio lugar al nacimiento y desarrollo de la Astronomía.

Si bien algunas culturas primitivas desarrollaron instrumentos más o menos rudimentarios para realizar cálculos astronómicos y observar los astros (el *gnomon* de los chinos, el *polos* mesopotámico, la *esfera armilar*, el *astrolabio*), durante las primeras épocas de la Astronomía el ojo era el único detector posible, con todas sus limitaciones que eran y son obviamente importantes.

Durante la Edad Media los astrónomos hispano-árabes, auspiciados por el Rey Sabio, perfeccionaron los instrumentos y métodos de observación ya existentes, dejando constancia de sus trabajos en *Los libros Alfonsíes de los Instrumentos* (libro del astrolabio redondo, libro del ataçir, libro de la alcora, etc.). Asimismo, estos estudiosos llevaron a cabo numerosas observaciones que les permitirían confeccionar unas tablas (conocidas como *Tablas Alfonsíes*) que fueron utilizadas durante años en toda Europa hasta que en el siglo XVII Kepler completó y publicó las *Tablas Rudolfinas* (1627), elaboradas a partir de las observaciones iniciales de Tycho Brahe quien, por otra parte, construyó instrumentos de observación más precisos que los existentes hasta entonces (cuadrante, sextante, etcétera).

En el transcurso de ese mismo siglo, XVII, se inicia una profunda renovación del pensamiento científico de la que fueron sin duda artífices Kepler, Galileo y Newton, entre

otros. La gran preocupación de los astrónomos de esta época fue la medida de la posición de las estrellas y los astros del Sistema Solar, igualmente comprendieron que cualquier nuevo progreso dependía notablemente del perfeccionamiento de los instrumentos. Se inició por tanto la época dorada de la Astronomía de posición, surgiendo simultáneamente la Astrometría: Galileo aplica en 1609 el telescopio a las observaciones astronómicas, enfocándolo por primera vez al firmamento y descubriendo los cráteres de la Luna; Huygens descubre en 1655 Titán (satélite de Saturno) con objetivos y lentes de su propia invención; Newton construye su telescopio reflector en 1688; Herschel dedica gran parte de su vida a la construcción de telescopios cada vez más potentes, con los que descubre el planeta Urano en 1781.

La inclinación hacia el perfeccionamiento de los instrumentos de observación se mantuvo también en el siglo XIX, época en la que progresó notablemente la óptica instrumental (diseño de los primeros objetivos acromáticos, nuevas técnicas de plateado químico de los espejos, etcétera) y se construyeron grandes telescopios. La Astronomía de entonces se caracterizó así por la incorporación de la fotografía, la construcción de reflectores de gran diámetro y el nacimiento de la Astrofísica con la invención del espectroscopio.

A partir de la Segunda Guerra Mundial, los avances tecnológicos y los descubrimientos en todos los ámbitos de la ciencia se han ido encadenando rápidamente, de forma que la Astronomía ha experimentado también un progreso sin precedentes. Los astrónomos contemporáneos han superado muchas de las limitaciones de sus homólogos de épocas pasadas, gracias principalmente a la combinación de telescopios cada vez más potentes con instrumentación astronómica adicional (detectores, fotómetros y/o espectrógrafos) que permite aumentar las imágenes obtenidas y descomponerlas en sus diferentes colores. Mediante estos instrumentos la señal procedente de los objetos observables puede asimismo quedar almacenada de forma permanente en placas fotográficas o en soporte digital (a partir de mediados del siglo XX), de modo que la experimentación se pueda repetir y comparar, principio en el cual se fundamenta la investigación científica.

Figura 7. Esfera *armilar*, instrumento atribuido a Eratóstenes (255 a. C.)

La espectroscopia constituye hoy en día uno de los pilares básicos de la Astrofísica. La radiación emitida por las estrellas y demás objetos celestes es una valiosa fuente de conocimiento, puesto que en las líneas espectrales de cualquier cuerpo astronómico se encuentra codificada casi toda la información disponible acerca de su composición química y de sus propiedades físicas más relevantes (temperatura, presión, densidad, etcétera). Uno de

los instrumentos más idóneos para realizar el análisis de dicha luz irradiada por los objetos astronómicos es el espectrógrafo, que permite observar los espectros y registrarlos fotográficamente. La luz recogida y focalizada por el telescopio atraviesa una estrecha rendija y una lente colimadora que obliga a los rayos a incidir paralelamente sobre un prisma o elemento dispersor. El detector recoge entonces la luz descompuesta por este, después de atravesar una lente llamada de cámara. Las redes de difracción, excepto en programas de investigación muy específicos, son reflectoras y están constituidas por un espejo grabado con finas estrías o trazos cuyo número por milímetro define su resolución intrínseca, la cual es prácticamente constante. Lo que se observa son una serie de imágenes de la rendija, conocidas como líneas espectrales, cada una con un color diferente, ya que el prisma separa la luz en los distintos colores que la componen.

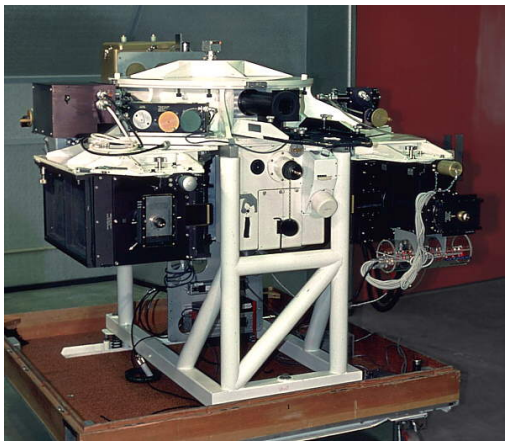


Figura 8. Espectrógrafo Echelle, que utiliza redes con menos surcos por milímetro que las de los espectrógrafos de rejilla habituales

El primer antecedente de la técnica espectroscópica se debe a Sir Isaac Newton, quien a mediados del siglo XVII descubrió que la luz blanca al pasar por un prisma de vidrio se descompone en luz con los colores del arco iris (la secuencia va del violeta al azul, verde, amarillo, anaranjado y rojo). Se demostró entonces que la luz proveniente del Sol está compuesta de todos estos colores, aunque con predominio de la luz amarilla (el color que el ojo humano detecta con mayor eficiencia), denominándose *espectro solar* a esta franja de luz que se obtiene al separar la luz del Sol en sus distintos colores.

No obstante, sería Wollaston en 1802 el que obtendría una primera imagen virtual del espectro solar al considerar un foco en forma de rendija; en este primer y rudimentario espectro se apreciaban siete líneas oscuras que serían estudiadas posteriormente por Fraunhofer en 1814, quien observó que la luz se descomponía efectivamente en colores al hacerla atravesar un prisma, si bien en ciertos colores aparecían dichas líneas oscuras. A estas líneas se las denominó *líneas espectrales* y al fondo de colores sobre el que se superponen, el *espectro continuo*. Por otro lado, se había observado ya experimentalmente en el laboratorio que la luz de algunos tipos de llamas daba lugar a líneas brillantes, por ejemplo la llama procedente de las lámparas de vapor de sodio que produce un tipo de luz amarilla cuyo espectro está formado no por una sucesión de colores, sino por dos líneas delgadas que se encuentran en la región correspondiente al color amarillo. Fraunhofer se percató de que las líneas oscuras del espectro del Sol coincidían con las líneas brillantes de los espectros de algunos tipos de lámparas, como por ejemplo las ya mencionadas de sodio.

En 1859 Gustav Kirchhoff advirtió que las líneas espectrales pueden explicarse como la absorción o emisión de energía, en una determinada longitud de onda, producida por los átomos de un elemento químico que se encuentra en estado gaseoso. Este químico alemán observó que así como el gas caliente da lugar a líneas brillantes en el espectro, el gas frío enfrente de una fuente de luz produce líneas oscuras. De esta forma, a las líneas oscuras presentes en el espectro de la mayoría de las estrellas se las denominó *líneas de absorción*, pues representan una disminución de la radiación electromagnética en unas longitudes de onda particulares. Las líneas brillantes, que aparecen en ciertas longitudes de onda donde se produce más radiación que en las longitudes de onda próximas, recibieron el nombre de *líneas de emisión*. Kirchhoff colaboró con el también físico y químico alemán R. Bunsen en el desarrollo del análisis espectroscópico, inventando un instrumento de análisis químico, el espectroscopio Bunsen-Kirchhoff, que les permitió identificar dos nuevos elementos, el Cesio y el Rubidio, a partir de la observación de sus espectros característicos.

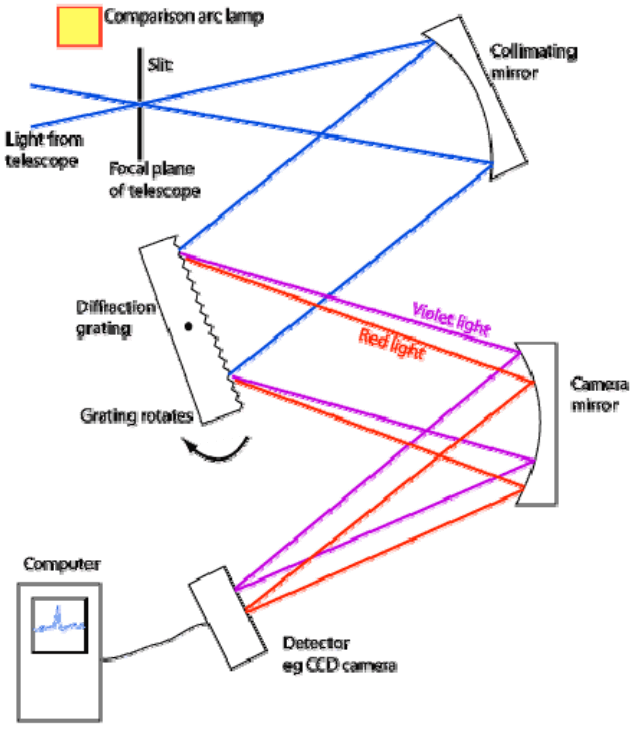


Figura 9. Esquema de funcionamiento de un espectrógrafo de rendija [Kaler 1989]

En 1868, durante el eclipse solar de octubre, Sir Norman Lockyer observó fuertes líneas amarillas en el espectro solar que no se habían detectado antes en el laboratorio, deduciendo que debía tratarse de un elemento desconocido al que denominó helio, del griego *helios* (sol) [Lockyer 1874]. Sin embargo, el helio no se detectaría de forma concluyente en la Tierra hasta 25 años después.

Una primera conclusión de los hallazgos de esta época fue la presencia de sodio en el Sol (detectada por Fraunhofer al identificar la línea D del espectro solar con el sodio), pero lo más notable era que daban pie a la identificación de todos los demás elementos presentes en él. Sorprendentemente, las líneas oscuras del espectro solar permitían lo que hasta entonces parecía imposible: conocer la composición química de los astros.

Una vez que se obtuvo y analizó apropiadamente el espectro solar, los esfuerzos de los investigadores de aquellos tiempos se concentraron en tratar de conseguir los espectros de otras estrellas, lo cual resultó una tarea algo más compleja. En 1863, Huggins intentó sin éxito fotografiar el espectro de Sirio; nueve años después, Henry Draper obtuvo el primer espectro estelar, el de la estrella Vega, caracterizado por cuatro líneas brillantes [Barker 1887]. Huggins, que no había cejado en su esfuerzo, logró desarrollar en 1875 una nueva técnica fotográfica que rápidamente le permitió adquirir espectros de buena calidad, los cuales incluían líneas de luz ultravioleta, tipo de luz a la cual el ojo humano no es sensible pero igualmente valiosa que la luz visible desde el punto de vista científico. Esta técnica puso de manifiesto la presencia de hidrógeno en un gran número de estrellas (formando la serie de líneas espectrales de Balmer en el espectro visible), mostrando los primeros indicios de la gran importancia de este elemento en el Universo, puesto que se encuentra presente en la atmósfera de casi cualquier estrella conocida.

Figura 10. Espectroscopio del laboratorio de Bunsen, según el *Queen Catalogue* de Instrumentos para la Óptica Física de 1888

Los mencionados descubrimientos de Kirchhoff y Bunsen a finales del siglo XIX establecieron los cimientos del análisis espectral de las estrellas tal y como hoy se conoce, demostrando que las líneas espectrales no tienen una distribución aleatoria sino que se disponen en zonas determinadas que se deben a la presencia de elementos químicos concretos [Kirchhoff 1860]. Cuando se calienta un gas, sus átomos se encuentran en estados de energía superiores al estado más bajo de energía posible (llamado estado fundamental), se dice pues que están excitados; pero los átomos solamente pueden permanecer en estados excitados un cierto tiempo, denominado vida media, al final del cual espontáneamente pasan de nuevo al estado fundamental, emitiendo fotones. Estos fotones representan energía a ciertas longitudes de onda que corresponde en el espectro a longitudes de onda brillantes, es decir, líneas de emisión. Cuando la radiación continua (energía emitida a todas las longitudes de onda o frecuencias) de un cuerpo a una temperatura alta pasa a través de un gas frío,

sus átomos constituyentes atrapan energía de la radiación continua y se excitan a estados superiores. En el espectro se observará entonces menos energía a ciertas longitudes de onda, la sustraída por los átomos del gas: son las líneas de absorción, que en el rango visible aparecen como líneas oscuras; al contrario que las de emisión, estas líneas de absorción no pueden formarse sin que exista una fuente que emita una radiación continua (continuo).

El espectro de la mayoría de las estrellas muestra efectivamente un continuo y superpuestas líneas de absorción que corresponden a los mismos elementos que se observan en el laboratorio; por lo tanto serán estos los constituyentes de las capas exteriores de la estrella, ya que absorben la radiación continua generada en el interior de la misma y propician la formación de las líneas de absorción. La anchura teórica de estas líneas es muy pequeña, pero diversos fenómenos como el movimiento de rotación de la estrella, los movimientos de pulsación, de turbulencia, etc., pueden ensancharlas. Además, la presencia de fuertes campos magnéticos puede asimismo producir el desdoblamiento de las líneas.

El espectro de absorción de una estrella sirve entonces para identificar los elementos químicos constituyentes de su atmósfera, ya que cada elemento químico es responsable de un conjunto diferente de líneas de absorción, presentes en longitudes de onda que se pueden medir de forma extremadamente fiable mediante experimentos reproducibles. En laboratorios terrestres se verifica que cada átomo y/o molécula define un conjunto bien determinado de líneas (denominado serie de líneas espectrales) que aparece superpuesto en el espectro de una fuente, en función del estado electrónico en que se encuentra. Estas series se caracterizan por ubicarse para cada elemento en posiciones fijas y diferentes en cuanto a la longitud de onda; en el caso del hidrógeno, el elemento más abundante en las estrellas, constituyen la serie de Balmer, la serie de Paschen, la serie de Lyman, etcétera [Kaler 1989].

Así, una vez obtenido su espectro, los componentes químicos de un objeto celeste se pueden identificar inequívocamente mediante la inspección de la posición de las líneas presentes en comparación con la posición que se obtuvo en un laboratorio terrestre. Entonces, si un elemento químico está presente en gran cantidad, sus líneas espectrales características serán muy intensas. Sin embargo, la observación del espectro indica únicamente los elementos presentes pero no sus abundancias relativas, ya que la intensidad de las líneas depende no solamente de la abundancia sino también de la temperatura a la que se encuentra el elemento que produce la absorción.

Al contrario de lo que cabría suponer, las diferencias más relevantes entre los espectros estelares son debidas principalmente a discrepancias de temperatura y no de composición química, ya que la mayoría de las estrellas están constituidas por los mismos elementos y en aproximadamente la misma proporción. Es más, la composición química obtenida del

análisis espectral indica que la mayor parte de las estrellas están constituidas principalmente por hidrógeno, alrededor del 90%, con un 10% (± 5%) de helio en número de átomos. Los elementos más abundantes después serían el carbono, nitrógeno, oxígeno y neón, que constituyen los cuatro un 1% del número total de partículas. Los siguientes elementos (silicio, magnesio, hierro y aluminio) son menos abundantes que los cuatro anteriores en un factor de 10 aproximadamente.

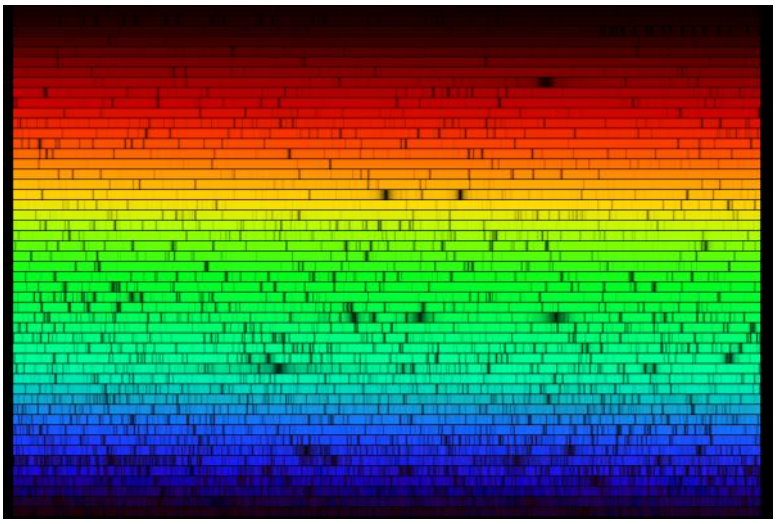


Figura 11. Espectro solar creado en el Observatorio *McMath-Pierce*. Las zonas oscuras muestran la absorción en la superficie de determinados gases y son conocidas como líneas espectrales

Además de posibilitar la determinación de los elementos químicos presentes en los cuerpos observados, el análisis y estudio de los espectros estelares puede suministrar información relevante sobre la temperatura y otras condiciones físicas de las atmósferas estelares, como pueden ser la velocidad radial, la luminosidad o la densidad de las mismas. Observando a simple vista las estrellas es posible apreciar que presentan colores diferentes: el color del Sol es amarillo mientras que Sirio, que es la estrella más brillante de nuestro hemisferio, es blanca; la mayoría de las estrellas tienen un color más rojizo que el Sol. Esta diferencia de color puede informar sobre la naturaleza de las estrellas y se explica principalmente por la diferencia en sus temperaturas superficiales. Sería interesante comparar los colores de las estrellas con los de una fuente ideal de luz, cuyas propiedades dependan únicamente de un parámetro; tal fuente podría ser el cuerpo negro, cuya radiación depende únicamente de la temperatura.

En Física se denomina cuerpo negro a un objeto teórico que se encuentra en equilibrio termodinámico, tiene temperatura constante y la radiación que emite es siempre la misma si no varía la temperatura, es decir, la radiación emitida dependerá de la temperatura

(para altas temperaturas se emite más radiación y aparece más azul). Si se mide la radiación de un cuerpo negro se observa que la energía radiactiva total, E, emitida por m^2 y por segundo en todas las direcciones por un cuerpo negro de temperatura T, aumenta con la cuarta potencia de la temperatura siguiendo la ley de Stefan-Boltzmann, i. e. σT^4. La cantidad de energía que emite un cuerpo negro por m^2 cada segundo en todas las direcciones y a todas las longitudes de onda se denomina flujo, πF, esto es:

$$E = \sigma T^4 = \pi F,$$

donde F es el flujo en W m^{-2} y σ es la constante de Stefan-Boltzmann ($\sigma = 2p^5 k^4/15c^2 h^3 = 5.67x10^{-5}$ erg cm^{-2} s^{-1} $K^{-4} = 5.67x10^{-8}$ W m^{-2} K^{-4}). La ley de Stefan-Boltzmann también puede expresarse como:

$$\pi B(T) = \sigma T^4,$$

donde B(T) es la función de Planck integrada para todas las frecuencias o longitudes de onda. Se puede medir la cantidad de radiación por intervalo de longitud de onda por unidad de superficie y dentro de un ángulo sólido, unidad emitida por un cuerpo negro; entonces esta energía se conoce como la función de Planck y proporciona la distribución de energía de un cuerpo negro (distribución de Planck), la cual solamente depende de la temperatura y de la longitud de onda. Esto es:

$$B_\lambda = 2hc^2 / \lambda^5 [1/(e^{hc/\lambda kT} - 1)]$$
$$B_\nu = 2h\nu^3 / c^2 [1/(e^{h\nu/kT} - 1)],$$

donde c es la velocidad de la luz ($3x10^8$ m s^{-1}), k la constante de Boltzmann ($1.38x10^{-23}$ J K^{-1}) y h la constante de Planck ($6.63x10^{-34}$ J s). Si se representa $B_\lambda(T)$ frente a λ, se obtiene una curva que alcanza un máximo y cae a cero para longitudes de onda muy grandes y muy pequeñas; lo mismo ocurre para $B_\nu(T)$. La altura de la curva y la longitud de onda del máximo son funciones de la temperatura; este máximo se obtiene igualando la derivada de la función de Planck a cero. La longitud de onda para la que la función B_λ es máxima será $\lambda_{max}(T) = 0.29$ cm K = $2.9x10^{-3}$ m K.

Se puede adoptar entonces la suposición de que las estrellas se comportan como cuerpos negros. Esta hipótesis implica que la temperatura y la cantidad de luz o flujo (energía por m^2 y segundo) que emiten son constantes. Así, si las estrellas radiasen como cuerpos negros se podría deducir su temperatura. Sabiendo que la cantidad total de energía emitida por un cuerpo negro sólo depende de la temperatura, se puede comparar la cantidad de energía emitida por las estrellas por m^2 y por segundo (el denominado flujo superficial πF_{surf}) con la del cuerpo negro. Para determinar este flujo se mide la cantidad de energía que

llega a la Tierra (corregida obviamente de la atmósfera terrestre) por m^2 y por segundo, lo que se ha denominado brillo, b. La energía emitida por segundo o luminosidad de una estrella situada a una distancia d será entonces:

$$L = 4\pi d^2 b$$

Por otro lado, la luminosidad en función del flujo superficial emitido por la estrella será equivalente también al área de la misma multiplicada por el flujo emitido por su superficie, es decir:

$$L = 4\pi R^2 \pi F_{surf},$$

igualando las dos expresiones anteriores de la luminosidad de una estrella se obtiene la siguiente relación entre el brillo medido en la Tierra y la cantidad de luz emitida por la superficie de misma:

$$\pi F_{surf} = b(d/R^2) = b \cdot 1/\theta^2,$$

donde $\theta = R/d$ es el semidiámetro angular de la estrella, que debe ser un valor conocido para obtener el flujo superficial. Por otro parte, como ya se ha mencionado, la ley de Stefan-Boltzmann define la temperatura efectiva de una estrella en la forma:

$$\sigma T^4 = \pi B T = \pi F_{surf} = \sigma T_{eff}^4,$$

que sería entonces la temperatura de un cuerpo negro que radia la misma cantidad de energía total que la estrella, es decir, se define la temperatura efectiva de una estrella como la temperatura de un cuerpo negro que emite el mismo flujo total que la propia estrella; la energía perdida por la estrella por m^2 y por segundo es la misma que la de un cuerpo negro que estuviese a temperatura T_{eff}. Se considera que la temperatura efectiva es la de las capas superficiales (atmósfera, fotosfera) que son las que contribuyen a la radiación observada.

Los espectros en los que aparecen líneas brillantes sugieren que la estrella presenta una atmósfera caliente y extensa, semejante a la cromosfera solar. La existencia de esas envolturas gaseosas alrededor de algunas estrellas es bastante frecuente, particularmente en estrellas de muy alta temperatura, tratándose de un fenómeno que parece deberse a la expulsión de materia por parte del astro.

El análisis de los espectros estelares, además de información sobre la temperatura superficial, posibilita la determinación de la velocidad radial de las estrellas, es decir, la velocidad con que se mueven en dirección a nuestra línea de visión (velocidad de alejamiento o de acercamiento). Para medir la posición de las líneas se toman con el mismo detector

espectros de comparación de elementos conocidos, antes y después de observar la estrella problema. Después de identificar las diferentes líneas espectrales, si se comparan con los espectros del laboratorio (que son conocidos), se puede medir la posición en que se observan las líneas, λ_{obs}, que será distinta de la longitud de onda en reposo o de laboratorio, λ_0; la diferencia permitirá obtener, por el efecto Doppler [Eden 1992], la velocidad radial de la estrella, v_r. Evidentemente para disponer de los valores respecto del Sol, que es como aparecen estas medidas en la mayor parte de los catálogos de espectros estelares, es preciso corregirlos del movimiento de la Tierra.

Conjuntamente con la Física atómica y los modelos de evolución, la espectroscopia se emplea actualmente para determinar una multitud de propiedades de las estrellas: la distancia, edad, temperatura efectiva, luminosidad y tasa de pérdida de masa se pueden estimar mediante diversos estudios espectrales; al mismo tiempo, los estudios sobre el efecto Doppler pueden ayudar a descubrir la presencia de compañeros ocultos tales como agujeros negros y exoplanetas.

En las últimas décadas del siglo XIX, gracias tanto al desarrollo de la técnica fotográfica como al instrumento de baja absorción construido por Huggins, se fotografiaron miles de espectros de estrellas, lo que permitiría a E. C. Pickering comenzar a elaborar en 1885 el primer catálogo general de espectros estelares [Pickering 1890]. Al recoger y organizar tal cantidad de espectros se constató que existían muchas diferencias entre ellos, comenzándose a hacer patente ya la necesidad de una clasificación de los diferentes tipos encontrados. Annie Jump Cannon, astrónoma de la Universidad de Harvard, clasificó alrededor de 400.000 espectros estelares, recopilándolos en el catálogo *Henry Draper*, así denominado en honor del benefactor que hizo posible esta investigación. Este catálogo espectral se publicó en 9 volúmenes entre los años 1918 y 1924, y aún hoy la mayoría de las estrellas se conocen por su número de identificación en él, el denominado número HD [Cannon 1918].

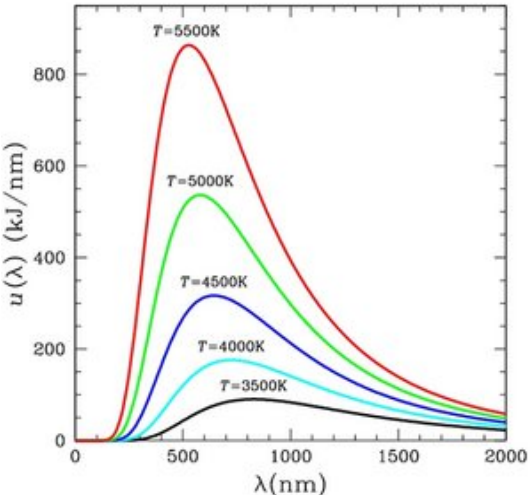


Figura 12. Espectro de un cuerpo negro

A continuación se abordan los aspectos fundamentales de este sistema de clasificación de las estrellas basado principalmente en la observación de las particularidades de su espectro en la región visible.

2.2 Fundamentos del sistema MK de clasificación de espectros estelares

La clasificación estelar es una etapa fundamental en el proceso de investigación en Astrofísica. Después de observar las estrellas utilizando telescopios terrestres y/o espaciales y de obtener los espectros utilizando los espectrógrafos y detectores adecuados, es preciso reducir los datos de cada objeto observado eliminando efectos instrumentales y calibrando su distribución en flujo y en longitud de onda. A partir de ese momento, el estudio de los espectros recogidos posibilita tanto la determinación de los elementos químicos que forman la fotosfera de las estrellas como la obtención de algunos de sus parámetros físicos característicos (temperatura superficial, presión, velocidad radial, densidad, etcétera). Actualmente el análisis detallado de los espectros descansa en el uso de programas de síntesis espectral basados en modelos matemáticos complejos de la atmósfera estelar. No obstante, es todavía práctica habitual recurrir a la clasificación de los espectros estelares en grupos empíricos establecidos previamente, con el objetivo de obtener una información básica sobre el tipo de estrella del que se trata evitando al mismo tiempo el paso por un modelo matemático; además, el estudio sistemático de la distribución de los diferentes tipos de espectros en una selección uniforme y representativa de estrellas, permite a los astrónomos establecer conjeturas sobre las etapas que caracterizan su proceso evolutivo.

Sin embargo, aun siendo una fase esencial, la clasificación espectral precede el análisis de los datos y no intenta reemplazar dicho análisis. Los grandes avances tecnológicos experimentados durante las últimas décadas en el ámbito de la instrumentación astronómica han hecho posible la observación programada y casi automática de multitud de objetos, de forma que hoy en día están disponibles para la comunidad científica grandes bases de datos observacionales, que si bien permiten estudios globales más detallados y consistentes, hacen casi impracticable el análisis detallado de cada espectro individual, tal y como se ha venido realizando durante años. La idea básica vigente es estudiar un conjunto reducido de espectros que sea representativo del conjunto global, lo cual no implica un ejercicio meramente taxonómico sino que tiene implicaciones fundamentales en Cosmología, evolución estelar o elaboración de modelos estelares.

La sistematización del estudio, propia de las disciplinas científicas, requiere la definición de una serie de grupos o categorías bien establecidas en los que se pueda englobar a todos o casi todos los objetos de investigación. En Astronomía el primer paso en este sentido fue dado por Hiparco de Nicea, quien definió una serie de magnitudes que dependen críticamente de la distancia que separa la estrella del observador. Con el desarrollo posterior del telescopio, sería por fin posible definir clases de estrellas libres de efectos debidos a la distancia, el brillo o la posición.

En el siglo XIX el espectroscopio abrió un nuevo nivel de comprensión de la estrellas, posibilitando la determinación de su composición y de forma indirecta de algunas de sus propiedades físicas. Al principio la gran variedad de los espectros estelares, caracterizados por una elevada cantidad de líneas de absorción y emisión visibles, complicó un poco el proceso de identificación y clasificación, puesto que solamente unas cuantas de esas líneas podían asignarse a elementos conocidos. Con el paso del tiempo, los archivos de los principales observatorios fueron disponiendo de decenas de miles de espectros y se pudo comenzar a realizar estudios sistemáticos de las propiedades espectrales con el objetivo de taxonomizar las estrellas.

En esta línea, el espectroscopista italiano Angelo Secchi desarrolló en 1866 una clasificación basada inicialmente en tres clases de espectros estelares: la clase I para estrellas con líneas fuertes y anchas de hidrógeno, como por ejemplo Vega (dentro de este tipo de espectros definió un subtipo para recoger los espectros con líneas de hidrógeno fuertes pero más estrechas, como por ejemplo el de la estrella Orión); la clase II para estrellas con líneas de hidrógeno débiles y abundancia de líneas metálicas, tales como Capella o Arcturus; y finalmente la clase III para recoger estrellas cuyo espectro presenta bandas moleculares complejas, como por ejemplo el de Betelgeuse o Antares. En 1868 completó estas tres clases añadiendo la clase IV para las estrellas con bandas fuertes de carbono, introduciendo finalmente en 1877 una última clase (V) para las que presentan líneas de emisión, como γ Cassiopeiae o β Lyrae [Secchi 1866].

A finales del siglo XIX las clases de Sechi comenzaron a ser sustituidas por la denominada clasificación de Harvard, la cual sentaría las bases para el actual sistema de clasificación estelar. En este sentido, uno de los trabajos pioneros y más conocidos en el campo de la clasificación estelar masiva fue el de E. C. Pickering, astrónomo y director del *Harvard College Observatory* durante más de 40 años, quien distribuyó las estrellas en diecisiete tipos diferentes [Pickering 1890]. Su clasificación era puramente empírica, los espectros estelares se ordenaron de acuerdo a la intensidad de las líneas de absorción correspondientes al hidrógeno y a cada tipo o clase espectral se le asignó una letra en orden alfabético: A para las estrellas con líneas muy intensas de hidrógeno, B para estrellas con líneas algo más débiles, y así sucesivamente hasta la Q. Pickering identificó asimismo un cierto número de estrellas que podían actuar como representantes de cada categoría, de forma que si el espectro no clasificado de una estrella era similar al de una de las estrellas patrón elegidas se le asignaba uno de los diecisiete tipos.

Este esquema de clasificación se utilizó como referencia estándar durante algunos años hasta que, durante la compilación del catálogo *Henry Draper*, el meticuloso y sistemático trabajo realizado en su mayor parte por tres astrónomas, Williamina P. Fleming, Antonia

C. Maury y Annie J. Cannon, mejoró notablemente el proceso de clasificación reduciendo el número de tipos de diecisiete hasta diez [Maury 1897] [Cannon 1901].

En los inicios de la espectroscopia la formación de los espectros estelares era un proceso bastante mal conocido, lo cual impidió su correcta interpretación hasta que a mediados de la segunda década del siglo XX se explicó de forma satisfactoria la ionización de los átomos en las atmósferas estelares. Se descubrió entonces que la formación del espectro dependía en gran medida de la temperatura del gas emitido y, en segundo término, de su densidad. Con esta nueva teoría se hizo patente que cada tipo espectral predeterminado correspondía a estrellas con una determinada temperatura superficial: las líneas de hidrógeno son muy intensas en estrellas que tienen cierta temperatura en su atmósfera, y si la temperatura es más alta o más baja estas líneas serán consecuentemente más débiles. A la luz de estos nuevos descubrimientos, se ordenó la lista de los diecisiete tipos espectrales propuesta originalmente por Pickering en función de temperaturas decrecientes y, naturalmente, ya no quedó en orden alfabético. No obstante, se decidió mantener la misma nomenclatura si bien se reconstruyó el orden de los tipos eliminando varios de ellos; después de sucesivas modificaciones, en su versión final se estableció la secuencia definitiva de tipos espectrales en O B A F G K M R N S (desde las estrellas más calientes a las más frías), utilizándose letras adicionales para designar novas y tipos de estrellas menos comunes. Con algunas pequeñas variaciones, esta clasificación continúa vigente hoy en día, aunque los tipos R y N se han unificado en uno solo, el tipo C, que está formado por estrellas en cuyo espectro se detectan bandas de absorción molecular de compuestos del carbono.

Aunque antes de 1915 Annie Cannon ya había clasificado los 225.300 espectros estelares del catálogo *Henry Draper*, el primer volumen de sus trabajos no se publicó hasta 1918, ya que cada estrella tuvo que ser identificada y su posición y magnitud verificadas correctamente a partir de otros catálogos de la época, lo cual supuso algunos años de trabajo adicionales [Cannon 1918]. De hecho, el noveno y último volumen no estuvo disponible hasta 1924. Cannon prosiguió con este trabajo el resto de su vida, hasta que el catálogo contuvo unas 400.000 estrellas clasificadas según este nuevo esquema de 10 grupos o tipos espectrales [Cannon 1925] [Cannon 1949b].

Gracias al profundo conocimiento derivado del estudio de tan gran número de espectros catalogados, pronto se hizo patente la necesidad de subdividir cada uno de estos tipos iniciales en varias subcategorías; es obvio que las estrellas no pertenecen exactamente a un tipo u a otro, sino que existe una gradación de sus propiedades que las sitúa en algún punto intermedio. Para no complicar más la nomenclatura, se decidió que cada tipo se subdividiera en subtipos identificados con un número entre el 0 y el 9, aplicando números más altos a estrellas más frías de forma que, por ejemplo, una estrella F9 sería muy similar a una

estrella G0. Este esquema final se designó como el sistema Harvard para la clasificación de los espectros estelares.

En 1943 tres astrónomos americanos pertenecientes al Observatorio Yerkes, William Morgan, Philip Keenan y Edith Kellman, adoptaron la idea de clasificación en subdivisiones de Harvard en una versión revisada del catálogo *Henry Draper*, contemplando al mismo tiempo la luminosidad estelar. Con la publicación del primer atlas de clasificación espectral fotográfica [Morgan 1943], estos autores sentaron las bases del nuevo esquema, conocido como sistema Yerkes, sistema MKK, o simplemente MK (siguiendo las iniciales de los apellidos de los autores), en el que se agrega a la nomenclatura ordinaria de cada tipo espectral de la secuencia de Harvard una cifra romana, que puede variar entre I y V e indica la clase de luminosidad de la estrella en relación con el diagrama Hertzsprung-Russell [Russell 1914].

El sistema MK es un esquema empírico de clasificación espectral que utiliza para el proceso de clasificación solamente aquellas características morfológicas observables directamente en los espectros. En él se definen un conjunto de estrellas estándares y la clasificación se lleva a cabo comparando el espectro de cada estrella susceptible de ser clasificada con los de las estrellas estándares, teniendo en cuenta todas las peculiaridades presentes en el espectro. El uso de estándares es de suma importancia, pues ayuda a mantener la autonomía del sistema, asegurando además que diferentes observadores clasifiquen las estrellas de forma similar. Gracias a la definición de este esquema formal de clasificación, Morgan logró demostrar la existencia de los brazos espirales de nuestra Galaxia sin prácticamente ningún tipo de argumentación teórica [Morgan 1966].

El sistema MK original propuesto en 1943, con pequeñas modificaciones sucesivas, es el que se utiliza aún en la actualidad para acometer la clasificación taxonómica de las estrellas basada en sus espectros de la región visible. En él las estrellas se ordenan en un esquema bidimensional según sus temperaturas efectivas y sus niveles de luminosidad.

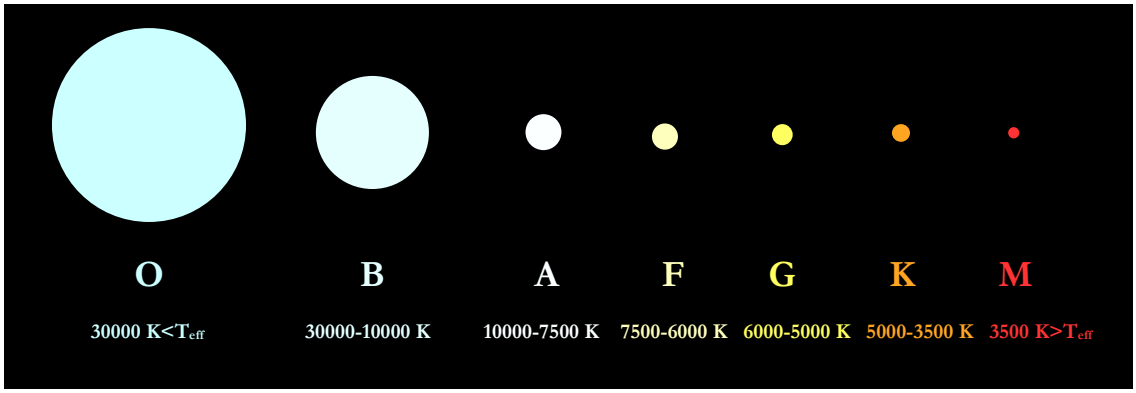


Figura 13. Tipos espectrales MK para estrellas en la secuencia principal

De esta forma, respecto a la temperatura las estrellas se dividen en grupos, denominados tipos espectrales, siguiendo la secuencia de temperaturas decrecientes de Harvard O B A F G K M, cuyas diferencias morfológicas en el espectro se encuentran fundamentalmente en la intensidad de las líneas de absorción de hidrógeno y helio, y en la presencia o ausencia de determinados metales y bandas moleculares (Ca, Mg, Fe, bandas de carbono, titanio, etcétera).

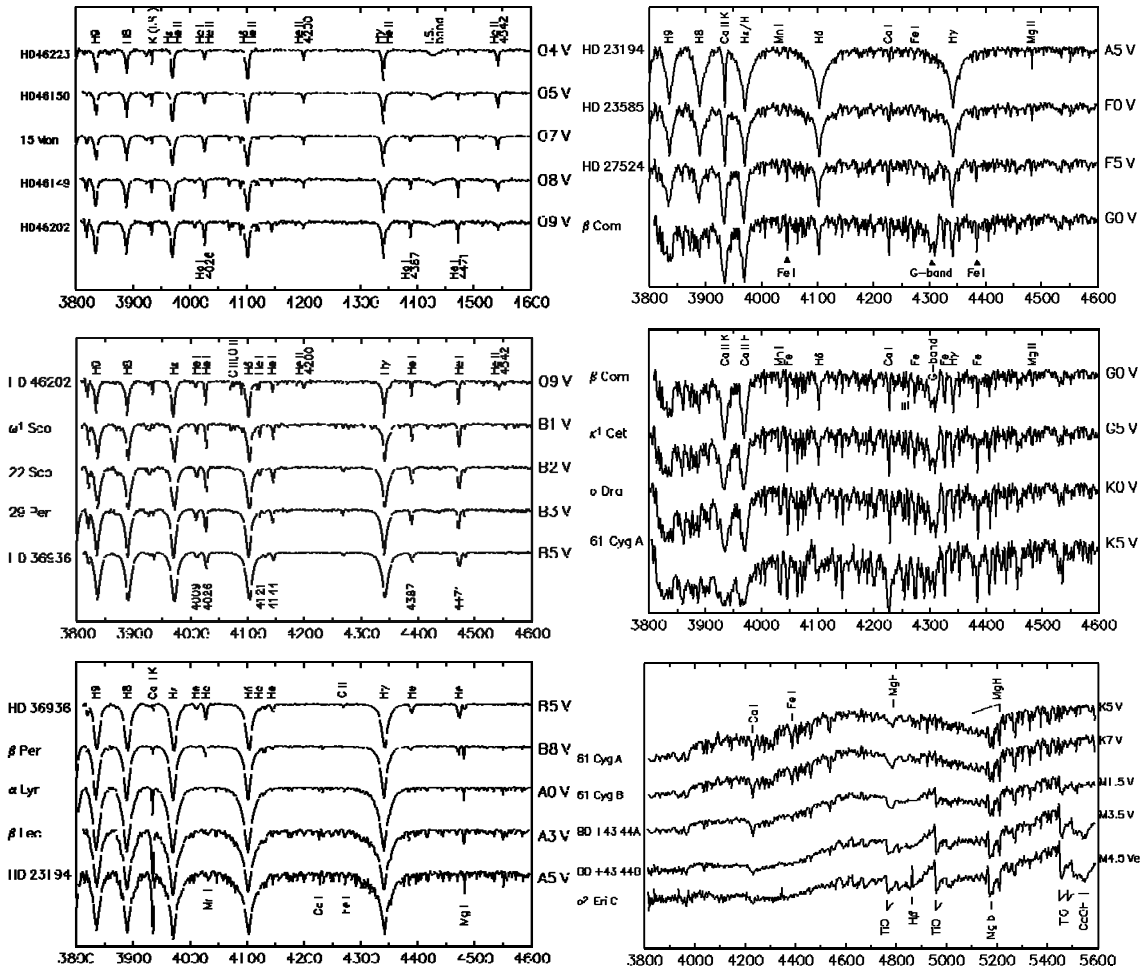


Figura 14. Tipos espectrales O4-M5 [Gray 2010]

Los tipos O, B, y A se denominan primeros tipos, estrellas calientes o estrellas tempranas (nomenclatura esta última que, al contrario de lo que cabría suponer, no tiene nada que ver con la edad de las estrellas). Las estrellas K y M se conocen como estrellas de los últimos tipos, estrellas frías o tardías. Consecuentemente, los tipos F y G corresponden a tipos medios o estrellas intermedias. La secuencia original Harvard de tipos espectrales se ha ido modificando a lo largo de los años con los descubrimientos de estrellas peculiares, de forma que actualmente se completaría con el tipo W para estrellas Wolf-Rayet, C para estrellas de carbono (antiguos tipos R y N), S para estrellas frías caracterizadas por la absor-

ción de óxido de zirconio, L, T, e Y para diferentes clases de enanas marrones y D para las enanas blancas; las clases C y S representan ramas paralelas a los tipos G-M, siendo su composición química superficial diferente. Notaciones adicionales para objetos no estelares serían Q para novas y P para nebulosas planetarias.

Las estrellas azuladas y brillantes de tipo O se caracterizan por ser las más jóvenes y las que presentan mayor temperatura superficial, entre 60000 y 30000 kelvin, por lo que hay suficiente energía en su superficie para arrancar los electrones más exteriores de los átomos y el hidrógeno se encuentra casi todo ionizado; así, las líneas espectrales correspondientes al hidrógeno son débiles o inexistentes, ya que hay poco hidrógeno atómico presente que no esté ionizado. Aparecen líneas correspondientes al helio, tanto neutro (He I) como ionizado (He II) y a otros elementos, como el silicio y el nitrógeno, también ionizados. Las estrellas Meissa y Mintaka, pertenecientes a la constelación de Orión, presentarían espectros característicos de este tipo espectral.

Las estrellas de tipo B son también estrellas brillantes, de color blanco azulado, pero algo más frías ya que su temperatura superficial varía entre 30000 K y 10000 K. Las líneas de hidrógeno son más intensas que en el tipo anterior y aparecen líneas de helio neutro (He I) que se hacen muy intensas en B2 y que van decreciendo hasta prácticamente desaparecer en el subtipo B9; las del hidrógeno aumentan su intensidad según se avanza desde el tipo B0 al B9. También presentan otros metales ionizados como magnesio (Mg II) o silicio (Si II). Rigel o Spica constituyen ejemplos típicos de estrellas de este tipo.

En el tipo espectral A las estrellas son de color blanco o blanco azuladas y presentan temperaturas superficiales del orden de 10000 a 7500 kelvin. Las líneas de hidrógeno alcanzan en esta clase su máxima intensidad (A0) y empiezan a aparecer líneas correspondientes a elementos metálicos ionizados como el magnesio (Mg II), el calcio (Ca II) o el hierro (Fe II). Dentro de las que se puede observar a simple vista son las estrellas más comunes, siendo Sirio y Vega dos representantes clásicas de este tipo de espectros.

En las estrellas de color blanco amarillento de tipo F, la temperatura desciende hasta encontrarse entre 6000 K y 7500 K. El hidrógeno se va debilitando con respecto a la clase anterior, pero en cambio la intensidad de los metales ionizados (hierro, titanio, etc.) va aumentando. Además las líneas de calcio ionizado son ya notables, en concreto dos de ellas denominadas H y K que son particularmente intensas y fáciles de reconocer en el espectro. Arrakis o la Estrella Polar (Polaris) pertenecería a este tipo espectral intermedio.

El tipo espectral G, al que pertenece nuestro Sol o la estrella Alpha Centauri A, abarca las estrellas de color amarillo con una temperatura superficial entre 6000 y 5000 kelvin. Las líneas del hidrógeno son visibles pero muy débiles, dominando las líneas de los

metales en estado neutro. Aparecen ya algunas bandas debidas sobre todo a moléculas sencillas (p. ej. CH).

Las estrellas de tipo espectral K son de color naranja y relativamente frías, de 5000 K a 3500 K. En contraste con las estrellas calientes, el espectro está ahora cubierto por muchas líneas que corresponden a metales no ionizados (Mn I, Fe I, etc.), apareciendo ya algunas bandas moleculares (TiO o CN), sobre todo en los subtipos más tardíos. Además, las líneas de hidrógeno prácticamente desaparecen. Arcturus y Aldebarán son ejemplos de estrellas pertenecientes a este tipo espectral.

Dentro de las estrellas estándares del sistema MK, las M son las más frías con temperaturas inferiores a 3500 kelvin. Sus atmósferas son tan frías que abundan las moléculas que no se disocian en sus átomos constituyentes, por lo que el espectro muestra muchas bandas moleculares, siendo en particular intensas las de la molécula del óxido de titanio (TiO). Su color característico es el rojo y ejemplos típicos de este tipo espectral serían Betelgeuse o Antares.

Cada uno de los tipos espectrales anteriores se divide a su vez siguiendo un sistema decimal en subclases numeradas desde el 0 (para las más calientes del tipo) hasta el 9.5 (las más frías). Por ejemplo, en las estrellas de tipo F las más calientes son las F0, seguidas con menor temperatura por F1, F2, y así sucesivamente hasta el tipo F9 al que le seguiría el G0. En algunos tipos espectrales todavía es necesario afinar más, así existe por ejemplo la clase B0.5 que significa estrellas con una temperatura intermedia entre las de tipo B0 y B1.

Tipo	T_{eff}	Color	Características principales	Ejemplo
O	>30000 K	Azul	Líneas de H ionizado, He neutro e ionizado	Meissa
B	10000-30000 K	Azul-blanco	Líneas de He e H neutro	Rigel
A	7500-10000 K	Blanco	Líneas fuertes de H	Sirius
F	6000-7500 K	Blanco-Amarillo	Aparecen líneas metálicas. Calcio ionizado	Polaris
G	5000-6000 K	Amarillo	Líneas de metales neutros intensas	Sol
K	3500-5000 K	Naranja	Líneas metálicas fuertes y algunas bandas moleculares	Arcturus
M	<3500 K	Rojo	Bandas moleculares de TiO considerables	Antares

Tabla 1. Resumen de las principales características de los tipos espectrales del sistema MK

Además de los tipos espectrales estándares descritos, existen otras estrellas que presentan particularidades en su espectro cuyo origen se debe a diferentes causas. Entre las más comunes están las estrellas de tipos O y B en las que aparecen líneas de emisión cuyo origen se supone relacionado con atmósferas poco densas y muy calientes. Cabe asimismo destacar las estrellas denominadas A magnéticas, como por ejemplo Alioth (quinta estrella

de la Osa Mayor), cuyos espectros presentan el desdoblamiento de las líneas espectrales, fenómeno conocido como efecto Zeeman: existen estrellas que muestran desdoblamientos de tal magnitud que se ha de suponer necesariamente la existencia de campos magnéticos muy intensos, llegando incluso a alcanzar una fuerza de 30000 gauss [Zeeman 1897].

Las estrellas de los tipos espectrales R, N y S son también estrellas frías, con una temperatura superficial similar a las de tipo M, aunque las líneas de sus espectros corresponden a diferentes átomos y moléculas. Las estrellas de tipos R y N se denominan también de carbono por presentar una gran abundancia de este elemento, agrupándose en la actualidad dentro del grupo C. Los espectros de tipo S se caracterizan por la intensidad de las líneas de la molécula de óxido de circonio (ZrO), predominando también las bandas de óxido de lantano y de itrio (LaO e YO, respectivamente).

Otro tipo de estrellas poco frecuentes en los catálogos estelares son las enanas blancas (también denominadas estrellas de tipo D), que serían los restos latentes tras la evolución de estrellas cuya masa es inferior a unas ocho veces la del Sol. La materia de estos objetos se halla extremadamente comprimida (1 cm^3 de la misma puede llegar a pesar varias toneladas). Debido a que la materia degenerada es buena conductora del calor, las enanas blancas poseen la misma temperatura en todos sus puntos y, dado que la envoltura gaseosa que poseen forma una capa aislante, las pérdidas de calor se producen lentamente volviéndose poco a poco más frías y débiles. La primera estrella enana blanca que se descubrió fue Sirio B, la pequeña compañera de Sirio, observada por primera vez por el astrónomo americano Alvan Graham Clark en 1862. Su posterior estudio mostró que tiene una masa comparable a la de nuestro Sol contenida en un volumen como el de la Tierra, lo cual significa que cada centímetro cúbico de materia de Sirio B pesa unas tres toneladas. Aunque este hecho sorprendió a la mayor parte de los astrónomos, para cuando se produjo los avances en el desarrollo de la Mecánica Cuántica ya podían explicar la existencia de este tipo de estrellas.

Son igualmente peculiares las denominadas enanas marrones, estrellas muy frías que presentan una masa insuficiente para producir reacciones termonucleares de hidrógeno. El tipo L lo constituyen estrellas de esta clase con temperaturas entre 1500 y 2000 kelvin que presentan, además de las bandas características de las estrellas M, bandas de hidruros (FeH, CrH, MgH, CaH) y líneas alcalinas prominentes (Na I, K I, Cs I, Rb I). Más frías aun son las enanas marrones de tipo T (con temperaturas entre los 700 y los 1300 kelvin), en cuyos espectros predominan además de los hidruros de las enanas de tipo L, las bandas de absorción de metano (CH_4). Finalmente se ha propuesto el tipo teórico Y para las enanas marrones extremadamente frías, con temperaturas inferiores a los 700 K; si bien no existe aún un prototipo espectral de estas estrellas, investigaciones recientes parecen caracterizarlas por la fuerte absorción de amoníaco (NH_3) [Delorme 2008].

Las estrellas Wolf-Rayet, descubiertas por los astrónomos C. J. E. Wolf y G. Rayet en 1867 al observar tres estrellas de la constelación del Cisne, presentan también singularidades en cuanto a su proceso evolutivo. Las estrellas de este tipo (algunos autores las catalogan dentro de un grupo especial, el W) son muy luminosas y muy calientes, todavía más que las gigantes azules del grupo O, teniendo habitualmente una temperatura superficial superior a los 90000 kelvin y un espectro característico que las diferencia del resto de las estrellas conocidas; por ejemplo, una de sus peculiaridades sería la abundancia de líneas de emisión de oxígeno, carbono o nitrógeno. La materia que forma estas estrellas está siendo lanzada al espacio desde su superficie a velocidades muy altas, y las que se encuentran en asociaciones muestran un alto contenido en nitrógeno, indicativo de que son estrellas masivas que han pasado rápidamente por la etapa de combustión del hidrógeno mediante el ciclo del carbono. Se han encontrado muchas estrellas Wolf-Rayet miembros de sistemas dobles cerrados, por lo que se sugiere que el mecanismo de mezcla del material es debido a algún tipo de interacción gravitacional con la otra estrella.

La otra dimensión del sistema MK se utiliza para referenciar el brillo intrínseco o intensidad luminosa de las estrellas. Históricamente la luminosidad de las estrellas se ha agrupado en cinco clases, etiquetadas desde la I hasta la V.

Los diferentes niveles de luminosidad hacen referencia a la magnitud absoluta de la estrella, M_v, que es una medida de su luminosidad en escala logarítmica con un factor negativo, con lo que magnitudes menores corresponden a estrellas más brillantes. Concretamente, la magnitud absoluta se define como la magnitud que tendría la estrella si se observase desde una distancia de 10 pársecs (aproximadamente $3x10^{14}$ metros) en ausencia de extinción, esto es:

$$M_v = -2.5 \log_{10} L + K,$$

donde L es la luminosidad absoluta de la estrella, es decir, la cantidad de flujo radiado por la estrella en todas direcciones, y K una constante preestablecida por convenio. De la misma forma se puede definir la magnitud aparente, m_v, que se relaciona con la luminosidad de la estrella que se observa desde la Tierra, l, como sigue:

$$m_v = -2.5 \log_{10} l + K_2$$

La determinación de la luminosidad absoluta de una estrella es especialmente interesante, pues permite conocer de forma bastante aproximada distancias estelares mediante la siguiente ecuación:

$$M_v = m_v + 5 - 5 \log d - A_v,$$

siendo d la distancia a la estrella y A_v la extinción interestelar, término utilizado para describir la absorción y dispersión de la radiación electromagnética emitida por un objeto astronómico debido a la presencia de materia (polvo y gas) entre el objeto emisor y el observador [Kaler 2006].

Dentro de un mismo tipo espectral las propiedades físicas de las estrellas pueden diferir, particularmente su tamaño. La luminosidad de una estrella depende fundamentalmente de dos factores: la temperatura superficial y el radio de la misma. De este modo, el hecho de que dos estrellas del mismo tipo espectral (con temperatura superficial similar e idéntico color) presenten luminosidades muy distintas solamente puede explicarse suponiendo que sus respectivos radios sen también muy diferentes. Por ejemplo, Capella sería una estrella de tipo G2 III, es decir, del mismo tipo espectral que el Sol pero de distinta clase de luminosidad (el Sol es una enana V). Capella tiene una magnitud absoluta de -0.5, por lo que es 5.4 magnitudes más brillante que el Sol, lo cual no podría explicarse sino con una mayor superficie radiante y, por tanto, mayor diámetro, ya que ambas tienen idéntico color y temperatura.

Morfológicamente la luminosidad está relacionada con la anchura de algunas líneas específicas en el espectro; las clases de luminosidad se establecen a través de la razón de la intensidad de determinadas líneas espectrales e informan de si la estrella se encuentra en la secuencia principal, en la zona de las gigantes o en la de las supergigantes.

Las estrellas de clase de luminosidad I, también denominadas supergigantes, son las más brillantes, con valores típicos de magnitud absoluta entre -5 y -12. Al tener una gran superficie, suelen presentar radios cientos de veces mayores que el del Sol, emiten una cantidad ingente de energía producto de la intensidad con la que queman su combustible. Existen estrellas supergigantes de prácticamente todos los tipos espectrales: hay supergigantes rojas (como por ejemplo Antares o Betelgeuse) y azules (como puede ser Rigel), presentando estas últimas temperaturas superficiales más elevadas que las primeras. Dentro de las supergigantes se consideran dos subclases: la Ia para las más luminosas y la Ib para las de menor luminosidad.

La clase de luminosidad II corresponde a las gigantes brillantes, estrellas con una magnitud absoluta entre las gigantes y las supergigantes; suelen clasificarse tradicionalmente como gigantes con una luminosidad excepcionalmente alta, pero no lo suficientemente brillantes o masivas para ser consideradas supergigantes. Ejemplos típicos de esta clase serían Adhara (estrella blanco-azulada de tipo B) o Sargas (estrella blanco-amarillenta de la constelación de Escorpión que pertenece al tipo espectral F).

Las gigantes normales constituyen la clase de luminosidad III, siendo estrellas de gran diámetro y por tanto más luminosas que las subgigantes. Habitualmente presentan un

radio y una luminosidad considerablemente mayores a los de una estrella de la secuencia principal con la misma temperatura superficial (radio entre 10 y 100 veces mayor que el radio solar y luminosidad entre 10 y 1000 veces mayor que la del Sol). Ejemplos de este tipo de estrellas serían Alcyone, la estrella más brillante de las Pléyades, o Pollux, gigante naranja de la constelación de Géminis con tipo espectral K.

Las estrellas de clase IV o subgigantes son de mayor tamaño y significativamente más brillantes que las enanas con la misma temperatura superficial, pero sin poder ser consideradas como gigantes. Acostumbran a ser estrellas de menor masa que la solar que evolucionan al agotarse su hidrógeno susceptible de fusión, o bien estrellas de tipo solar o mayores pero en estado de transición fugaz hacia estrellas gigantes. Estas estrellas están fuera de la secuencia principal, pues suelen ser muy viejas, se hallan frecuentemente en los cúmulos globulares y suelen pertenecen a los tipos espectrales G y K. Un ejemplo de las mismas sería Alpha Crucis.

La mayoría de las estrellas conocidas pertenecen a la clase de luminosidad V, son estrellas enanas que están en la secuencia principal y que todavía queman hidrógeno en su núcleo mediante fusión nuclear. La mayor parte de las estrellas pasan el 90% de su vida, aproximadamente, en esta fase. Ejemplos de este tipo de luminosidad los constituyen la estrella AD Leonis o nuestro Sol.

Posteriormente se han añadido a estas cinco clases de luminosidad estándares del sistema MK dos clases más para identificar estrellas menos brillantes que las enanas. Las estrellas de nivel de luminosidad VI o subenanas son ligeramente menos luminosas que las estrellas de clase V y también se encuentran en la fase de combustión del hidrógeno. La diferencia entre ambas estriba en su composición química, pues las subenanas son más ricas en metales; un ejemplo típico de esta clase sería la estrella Kapteyn. Cuando una estrella agota sus reservas centrales de hidrógeno comienza a quemar combustibles más exóticos, convirtiéndose en una enana blanca cuya luminosidad disminuye con el tiempo. A las estrellas de esta clase, entre las que pueden destacarse las ya clásicas enanas blancas 40 Eridani B, Sirio B y la estrella Van Maanen, se les ha asignado la clase de luminosidad VII.

Las dos características que refleja el sistema MK, el brillo y la temperatura superficial, son dos de los parámetros estelares más interesantes y fáciles de medir para los astrónomos, por lo que se utilizan muy a menudo para diferenciar las estrellas. Una forma muy clara de evidenciar tales diferencias es mediante el diagrama de Hertzsprung-Russell. Alrededor de 1910 el astrónomo Danés Ejnar Hertzsprung descubrió un patrón regular cuando relacionaba la magnitud absoluta con el color de una estrella. Henry Russell encontraría un patrón similar dos años después, relacionado la magnitud absoluta con el tipo espectral. Al diagrama conjunto resultante de ambas aportaciones se le denominó diagrama de Herts-

prung y Russell o diagrama H-R [Russel 1914]. En el eje de ordenadas se representa la luminosidad de la estrella, que crece de abajo a arriba, y en el de las abscisas la temperatura superficial, que aumenta a su vez de derecha a izquierda; cada punto del diagrama representa una estrella. Las estrellas se distribuyen en zonas determinadas, situándose la mayoría de ellas en una zona diagonal central que va desde el extremo superior izquierdo (alta luminosidad y temperatura) hacia el extremo inferior derecho (baja luminosidad y temperatura), línea que corresponde a la fase más estable y duradera de sus vidas, denominada secuencia principal, y en la que se encuentran más del 90% de las estrellas observables. No obstante, hay otras regiones del diagrama en donde se acumulan estrellas, como por ejemplo las conocidas como gigantes rojas que se sitúan hacia el extremo superior derecho del diagrama, pues son de gran tamaño y poseen temperaturas superficiales bajas; o las enanas blancas situadas en el vértice opuesto, siendo por tanto más pequeñas y calientes. Se evidencia de esta forma en el diagrama que el tamaño de las estrellas aumenta con la distancia respecto al vértice inferior izquierdo.

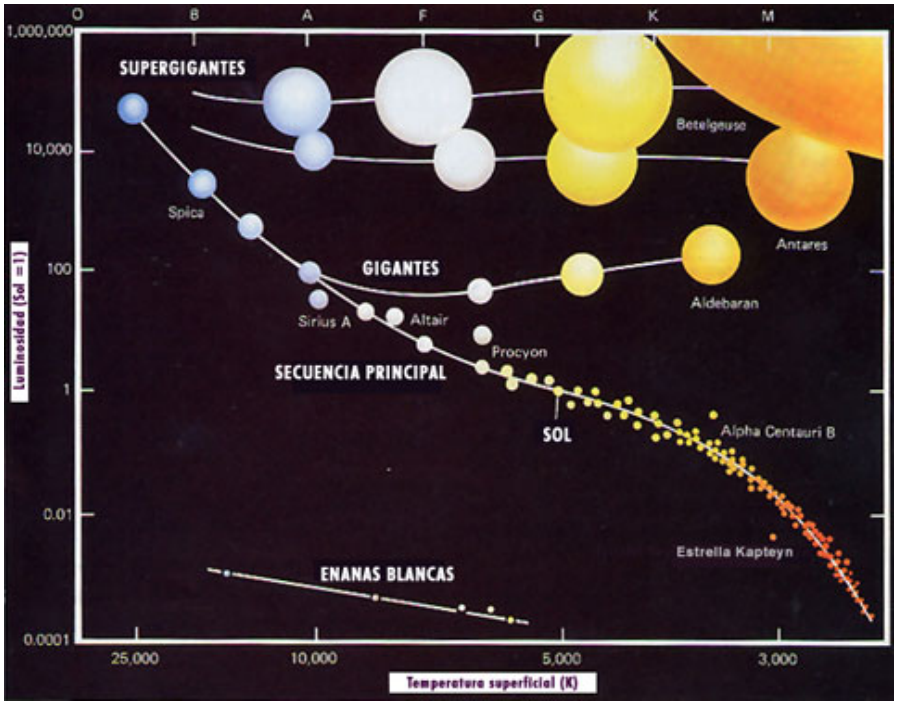


Figura 15. Diagrama H-R, traducido al español [Zeilik 1993]

Si bien el tiempo no se contempla explícitamente en el diagrama H-R, los modelos de evolución estelar han permitido representar sobre el mismo las trazas evolutivas de las estrellas: las estrellas más masivas y luminosas de su parte superior evolucionan más rápidamente, mientras que las de menor masa y luminosidad de la parte inferior del diagrama presentan una evolución mucho más lenta. La evolución típica de una estrella puede divi-

dirse en tres fases principales: la etapa anterior a la secuencia principal, la etapa en la que la estrella se sitúa en la secuencia principal y la etapa posterior a la citada secuencia.

La fase pre-secuencia principal abarcaría entonces el periodo comprendido entre la formación de la estrella, a partir de la contracción y el calentamiento de una nube de material interestelar, hasta su entrada en la secuencia principal. El nacimiento de una estrella ocurre cuando cierta cantidad de materia consigue separarse gravitacionalmente del resto del Universo. Hoy se acepta la teoría de que al comienzo del proceso de condensación gravitacional la nube de materia interestelar se divide en partes, formándose simultáneamente varias estrellas. Cuando la nube de gas y polvo se fragmenta, la energía potencial se transforma en cinética, que a su vez se convertirá en calor debido a las colisiones. Al aumentar la temperatura y la densidad de los fragmentos de la nube comenzará a crecer su radiación, momento en el que se puede decir que se ha formado una protoestrella. A continuación, y siempre que la nube posea una masa lo suficientemente alta, comenzarán en el núcleo de la protoestrella reacciones nucleares que se mantendrán hasta que cese la compresión de la misma, alcanzándose un estado de equilibrio que contrarresta la presión en el interior estelar. En este momento se considera que la estrella ha entrado ya en la fase de secuencia principal. La luminosidad de las protoestrellas es muy alta pero su temperatura efectiva es menor que la de las estrellas que se encuentran en la secuencia principal.

La fase de secuencia principal empieza en el momento en el que comienza la combustión del hidrógeno del núcleo de la estrella, continuando hasta que este hidrógeno se agota como combustible al haberse convertido totalmente en helio. Esta es la etapa evolutiva más larga y estable, siendo por tanto donde la estrella permanece más tiempo, tanto más cuanto menor sea su masa. Por esta razón, la mayor parte de las estrellas observables están en la secuencia principal. Una vez que se ha agotado el hidrógeno nuclear, las reacciones continúan en el límite exterior del núcleo, denominándose a este fenómeno combustión de hidrógeno en capa. Con el comienzo de este tipo de combustión, la estrella inicia la fase post-secuencia principal, etapa mucho más rápida que la anterior a la que se asocian los fenómenos observables más espectaculares.

Las estrellas que se encuentran en fases evolutivas posteriores a la secuencia principal se consideran estrellas evolucionadas. Cuando comienza la combustión en capa del hidrógeno, el núcleo se comprime incrementando su densidad y temperatura hasta que la degeneración electrónica es suficiente como para oponerse a la gravedad, o bien el núcleo se calienta lo suficiente para que comience la fusión de helio. En este punto, el camino evolutivo de la estrella dependerá en gran medida de su masa. En las estrellas de masa media o alta, la comprensión del núcleo conduce al aumento de la luminosidad y el radio de la estrella, transformándose así en una gigante roja. En esta etapa la luminosidad de la estrella puede superar cientos, o incluso miles, de veces la luminosidad del Sol. La siguiente fase evolu-

tiva comienza cuando el helio del núcleo alcanza la temperatura suficiente para iniciar su combustión, sirviendo como combustible hasta que ha sido transformado totalmente en carbono y oxígeno. Entonces el núcleo estelar tiende a contraerse, calentando los alrededores ricos en helio, iniciándose una nueva etapa de combustión de este elemento en capa. La energía producida con esta combustión provoca una nueva expansión de la estrella, que evoluciona hacia la rama asintótica de gigantes temprana (*Early Asymptotic Giant Branch*). En este momento se puede considerar ya que la estrella tiene estructura de supergigante. Una estrella supergigante es aquella que posee un núcleo de carbono y oxígeno, rodeado por una capa de helio, ambos dentro de una capa de hidrógeno. Este núcleo compacto está rodeado por una envoltura extensa rica en hidrógeno. En estas últimas etapas de evolución estelar los procesos físicos de las estrellas y su estructura apenas se conocen, ya que el tiempo necesario para que una estrella evolucione a lo largo de estas últimas fases es pequeño en comparación con su tiempo de vida total, hecho que condiciona en gran medida el número de estrellas disponibles que se pueden obtener para su estudio [Salaris 2006].

Desde que fue formulado por sus creadores, el sistema MK ha constituido una de las herramientas más potentes para el estudio de poblaciones estelares, probando su utilidad durante años al servicio de astrónomos que han necesitado inferir información cuantitativa básica (relacionada con la temperatura efectiva y la gravedad) a partir de los espectros de las estrellas. Aun cuando actualmente las utilidades de síntesis espectral se han convertido en una herramienta habitual para la interpretación de los espectros observados, la clasificación MK continúa aportando una descripción muy útil de un espectro estelar.

Un punto débil de dicho sistema es que, al estar basado en la comparación de los espectros con el conjunto original de estándares seleccionado, implica un importante grado de subjetividad. Además debe utilizarse con precaución, ya que se propuso originalmente para estrellas de población I y los criterios que definen los tipos espectrales se formularon para espectros fotográficos en el rango de longitudes de onda azul-violeta y con una resolución típica de los espectrógrafos fotográficos de la época, es decir, 2-3 Ángstroms por píxel. Estas limitaciones se deben fundamentalmente a que las emulsiones fotográficas en los años cuarenta eran sensibles únicamente a la luz azul-violeta. Sin embargo fue esta una elección necesaria pero afortunada, dado que la zona azul-violeta del espectro, esencialmente desde la línea K de Ca II (3933 Å) hasta la línea H_β (4861 Å), contiene una alta densidad de líneas atómicas y bandas moleculares importantes desde el punto de vista astrofísico, por lo que ha sido posible realizar clasificaciones bidimensionales adecuadas en temperatura y gravedad empleando el sistema MK. Se han propuesto y desarrollado sistemas de clasificación paralelos para las regiones espectrales del rojo, infrarrojo y ultravioleta, los cuales deberían permanecer independientes del sistema de clasificación tradicional, puesto que existen muchas estrellas caracterizadas por un espectro normal en el rango visible y que presen-

tan peculiaridades en el rango infrarrojo o ultravioleta, lo cual implica necesariamente que la clasificación estelar ha de llevarse a cabo individualmente para cada rango espectral.

Durante varias décadas, el sistema original de temperaturas y luminosidades ha experimentado un proceso de calibración constante mediante la definición de nuevos subtipos espectrales, la revisión de los ya existentes e incluso la introducción de nomenclatura adicional para recoger los nuevos tipos de estrellas que se han ido descubriendo a lo largo de los años. Los propios autores, Morgan y Keenan, publicaron a finales de los años 70 dos importantes atlas espectrales recapitulando las revisiones y ampliaciones llevadas a cabo hasta esa fecha: *The Revised MK Spectral Atlas for Stars Earlier than the Sun* [Morgan 1978] y *An Atlas of Spectra of the Cooler Stars: Types G, K, M, S and C* [Keenan 1976]. Desde entonces los esfuerzos se han centrado en tratar de extender el sistema MK más allá de su marco inicial de referencia, con el objetivo de incluir nuevos tipos de estrellas y reflejar otras características espectrales interesantes diferentes de la temperatura y la luminosidad. Keenan, con diferentes colaboradores, continuó toda su vida desarrollando trabajos importantes de calibración del esquema original, añadiendo una dimensión más basada en índices de abundancia de metales para estrellas de tipos tardíos [Keenan 1989], especificando criterios para la clasificación de estrellas de carbono [Keenan 1993] [Barnbaum 1996] y revisando las clases de luminosidad originales para las estrellas gigantes frías [Keenan 1999]; Morgan por su parte propuso estándares y criterios de clasificación para estrellas de poblaciones diferentes a la I [Morgan 1984]; Gray, en sus destacados y ya clásicos trabajos, refina la clasificación de algunos tipos espectrales y amplia el sistema para incluir tipos de estrellas peculiares, como las F y G poco metálicas [Gray 1987-2010]; Kirkpatrick y Henry redefinen cuidadosamente el sistema para adaptarlo a las estrellas enanas de tipo M y más tarde a las del nuevo tipo espectral L [Henry 1994] [Kirkpatrick 1995], mientras que Walborn refina la clasificación de las estrellas de tipo O [Walborn 1972] [Walborn 2002].

Sin embargo, a pesar de este largo proceso de calibración del sistema MK, la clasificación actual sigue la misma línea establecida hace ya más de 60 años. La gran difusión y éxito de este sistema estándar se deben en gran parte a que continúa facilitando una información cuantitativa básica y totalmente empírica sobre las estrellas, puesto que no se basa en ningún modelo matemático y no arrastra, por tanto, la incertidumbre y aproximaciones propias de los mismos. La clasificación MK de una estrella permite conocer de forma bastante aproximada su temperatura efectiva y su luminosidad e incluso, en algunos casos, colegir su estado evolutivo (i. e. secuencia principal o posterior). Cabe mencionar asimismo que el proceso de clasificación en este sistema ha demostrado mantenerse, durante años de calibración y perfeccionamiento, relativamente independiente de conceptos teóricos que evolucionan con el tiempo. Así, con el nacimiento de la Astrofísica Nuclear se ha podido explicar la evolución de las estrellas dentro de la secuencia principal, si bien esto no ha afec-

tado a las clasificaciones en luminosidad y en tipos espectrales. Con los modelos de evolución y de atmósferas, nuestro conocimiento sobre la naturaleza de las estrellas ha aumentado considerablemente, pero por sí mismos no serían de mucha utilidad si no existiese una clasificación estable y bien definida en un sistema estándar preestablecido.

En la siguiente sección se exponen los detalles concernientes al procedimiento de clasificación habitual de las estrellas en el sistema estándar MK.

2.3 La técnica de clasificación manual

Tradicionalmente la clasificación de espectros estelares se ha venido realizando directamente por grupos de expertos humanos de forma manual, sin otra ayuda que su propia experiencia.

El primer paso para comenzar el proceso de clasificación consiste en determinar por un lado el esquema de clasificación espectral, comúnmente el sistema MK descrito en el epígrafe anterior, y por otro el catálogo de estrellas que servirá como guía. Los expertos seleccionan un catálogo de espectros, previamente clasificados en el sistema MK, que se utilizan como espectros patrón durante todo el proceso de clasificación estelar. Debido a que este catálogo se utiliza como referencia para comparar visualmente los espectros no clasificados, debería estar constituido por estrellas que pertenezcan a las mismas clases de luminosidad que las estrellas susceptibles de ser clasificadas; además sería deseable también que contuviese un amplio rango de tipos y subtipos espectrales, clasificados de forma fiable en el mismo sistema de clasificación que se ha escogido previamente.

Para realizar la comparación de las estrellas que se desea clasificar con las del catálogo patrón seleccionado, es imprescindible normalizar todos los espectros de forma que se elimine el componente continuo. El medio interestelar provoca un enrojecimiento que complica el uso de la forma del continuo espectral para determinar la temperatura efectiva de la fotosfera (tipo espectral), por lo que se hace esencial aislar el continuo espectral y centrar la comparación con las estrellas del catálogo en la información aportada por las líneas espectrales. El proceso de normalización se realiza habitualmente ajustando el continuo de cada espectro a una función gaussiana, por ejemplo mediante el programa *gauss* del software IRAF [Valdes 1984], y restándoselo posteriormente al espectro. De esta forma se consigue basar la comparación en la información presente en las líneas, despreciando la distribución del continuo espectral que en ocasiones está muy afectado por efecto de dicho enrojecimiento interestelar. Después de la normalización será necesario escalar los espectros que se pretende clasificar, a fin de que las magnitudes de los mismos sean comparables con las de los espectros del catálogo que se ha seleccionado como guía.

Una vez escalados y normalizados los espectros, el siguiente paso para su clasificación consiste ya en la comparación directa con los espectros del catálogo de referencia. Los expertos estudian entonces visualmente la totalidad del espectro y determinan la relación entre intensidades de algunas líneas de absorción/emisión características (que indican la presencia de H, He, Ca, etc.), así como la profundidad de determinadas bandas moleculares (absorción de TiO, CH, etc.), obteniendo una clasificación inicial que suele comprender de forma aproximada el tipo espectral y la clase de luminosidad [Gray 2009]. Además es posi-

ble utilizar también varios grupos de líneas específicas (p. ej. nitrógeno o azufre) para determinar ciertos parámetros físicos de la fotosfera de las estrellas, como pueden ser las densidades y presiones electrónicas, temperaturas efectivas, gravedad y abundancia de metales. La anchura de las líneas refleja diferentes velocidades rotacionales y microturbulencia, y los desplazamientos de líneas debidos al efecto Doppler muestran la velocidad radial de la estrella [Eden 1992].

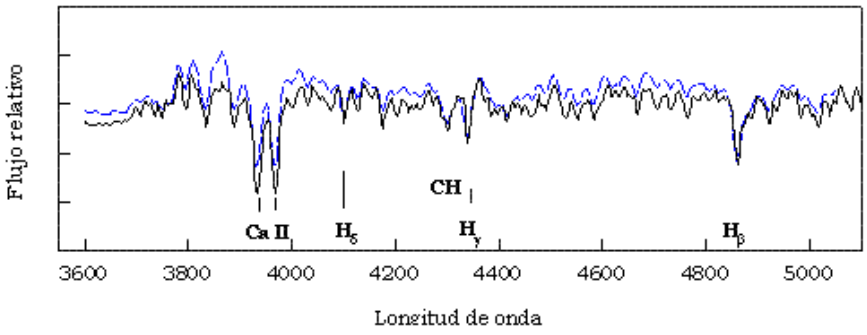


Figura 16. Espectro de tipo F79 comparado con el espectro patrón correspondiente al mismo tipo espectral del catálogo utilizado como referencia

Con el objetivo de confirmar y refinar la clasificación inicial del espectro en el sistema MK, se compara este con los espectros del catálogo patrón que corresponden al mismo tipo espectral. Para ello se superpone el espectro que se pretende clasificar con los diferentes espectros plantilla del catálogo de referencia pertenecientes al mismo tipo espectral en el que inicialmente se había clasificado. El subtipo espectral que se asigna es aquel en el que puede apreciarse una mayor similitud morfológica. En algunos casos es imposible determinar a simple vista a qué subtipo espectral pertenece una estrella, con lo que finalmente se adopta una clasificación mixta que incluye los subtipos espectrales consecutivos que más se asemejan al espectro problema (p. ej. B02, F79, A47, etcétera). De hecho, muchos de los catálogos públicos disponibles en la actualidad, cuyos espectros ópticos se han clasificado de forma manual siguiendo este método, presentan frecuentemente agrupaciones de subtipos [Silva 1992] [Pickles 1998].

La clasificación espectral que se obtiene siguiendo este proceso abarcará, obviamente, los mismos tipos, subtipos espectrales y clases de luminosidad que se recogen en el catálogo patrón. Así por ejemplo, si en el catálogo elegido no se contempla un tipo espectral, este tipo tampoco aparecerá en las estrellas que se clasifiquen mediante este sistema. En resumen, la resolución del proceso de clasificación coincidirá con la del catálogo de referencia. La figura 16 muestra un ejemplo de esta última fase del proceso de clasificación manual, en la que se observa la coincidencia de ambos espectros. El espectro representado en color negro es el que debe ser clasificado, mientras que el de trazado azul muestra el

espectro de la estrella estándar del catálogo guía correspondiente al mismo tipo espectral, en este caso F79.

Aunque el proceso de clasificación tradicional puede parecer a primera vista determinista, en la clasificación de un espectro no existen, sin embargo, criterios definitivos [Jaschek 1991]. En muchas ocasiones, es posible que el ruido imposibilite la correcta medida de los rasgos espectrales antes descritos (banda moleculares, líneas de absorción, etcétera). También es posible que ocurra que debido a las características especiales de una estrella, algunas de las líneas esperadas no estén presentes o lo estén en forma de emisiones, dificultando así la obtención de su tipo espectral. Además, podrían existir asimismo diferencias en la composición química entre los espectros patrón y los espectros de la muestra a clasificar, ya que dependiendo de la metalicidad abundarán más en la estrella unos elementos que otros, independientemente de su tipo espectral. En estos casos la clasificación deberá realizarse, en lugar de atendiendo a criterios particulares, estudiando el espectro en su totalidad y comparándolo visualmente con espectros de estrellas patrón que hayan sido previamente clasificados de manera fiable.

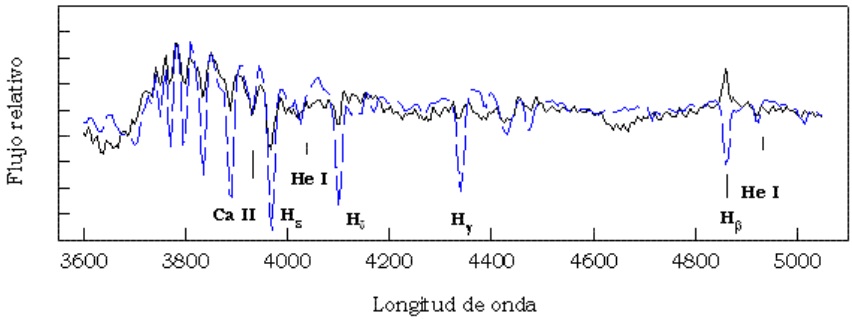


Figura 17. Espectro IRAS 17476-4446 (en negro) comparado con el patrón correspondiente a una estrella de tipo espectral B35I (azul)

En la figura 17 se muestra un ejemplo de espectros en los que aparecen líneas de emisión. Normalmente, al igual que en esta ocasión, las líneas presentes en emisión pertenecen a la serie de Balmer (serie del hidrógeno) [Kaler 1989]. En este espectro (en negro en la figura) se puede apreciar como la línea H_β (4861 Å) presenta emisión y como la intensidad del resto de la serie de Balmer es mucho menor que la que se observa en una estrella normal de tipo B (espectro en color azul en la figura); se trataría de un caso de emisión sobre absorción, donde una contrarresta a la otra. A pesar de estas peculiaridades, la clasificación podría realizarse igualmente atendiendo, por ejemplo, a las líneas de He I que son relativamente intensas y a la ausencia de líneas metálicas, lo cual señalaría a un espectro de tipo B.

En la figura 18 se muestra primeramente la comparación entre el espectro de la estrella IRAS 13203-5917, clasificada como de tipo espectral A79I, y el espectro de referencia del catálogo correspondiente a ese mismo tipo espectral, observándose la gran diferencia existente entre los continuos de ambos espectros, debida principalmente a la existencia de un nivel elevado de extinción, estimada en E(B–V) = 1.35. A continuación se incluye el mismo espectro, ahora desenrojecido, comparándolo de nuevo con el del catálogo patrón, apreciándose aquí una coincidencia casi total entre el componente continuo de ambos espectros.

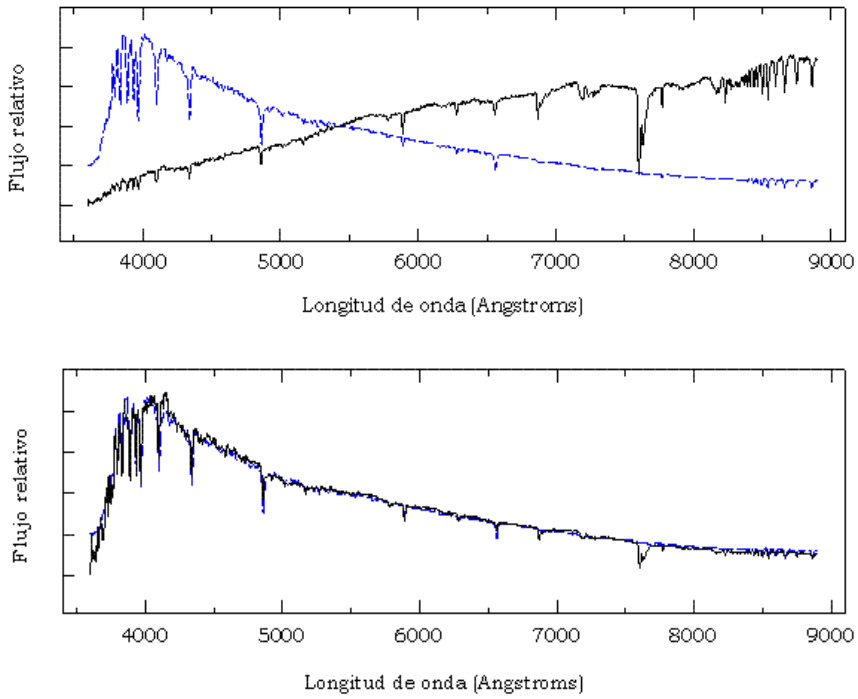


Figura 18. Espectro IRAS 13203-5917 comparado con el patrón correspondiente al tipo espectral A79I, antes y después del desenrojecimiento

La técnica manual de clasificación espectral descrita ha demostrado su eficacia a lo largo de los años, pues se disponía de un volumen de información relativamente manejable. Sin embargo, este procedmiento e totalmente inviable cuando el número de espectros que se pretende clasificar es muy elevado. En los últimos años se ha experimentado un gran aumento en el número de espectros disponibles para el análisis. Esto se debe principalmente al lanzamiento de nuevos satélites, a la evolución de la tecnología de los instrumentos de medida y a la implantación de archivos digitales de datos astronómicos. Actualmente el proceso de obtención de espectros permite disponer de un volumen de información que aumenta día a día, pues es posible recolectar información espectral de varios cientos de estrellas en una única noche de observación telescópica, utilizando técnicas modernas de espectroscopia multiobjeto.

El gran número de espectros, la necesidad de clasificarlos como paso previo del estudio evolutivo del Universo y, finalmente, la gran cantidad de recursos humanos que serían necesarios para realizar dicha clasificación, sugieren que ha llegado el momento de que las técnicas de clasificación espectral evolucionen. La técnica clásica de clasificación espectral tradicional resulta poco operativa en la actualidad y se precisa sustituirla por esquemas de clasificación automáticos y no subjetivos, que incorporen un sistema capaz de emular el comportamiento de los expertos clasificadores y obtengan de forma no supervisada, rápida y precisa la clasificación MK de los espectros. La incorporación de técnicas de Inteligencia Artificial, como se verá a continuación, resulta fundamental en este proceso de automatización del método manual de clasificación estelar.

2.4 Automatización del proceso de clasificación espectral

En el curso de los últimos años, la investigación en el campo de la clasificación espectral de las estrellas se ha centrado en la revisión y perfeccionamiento de las técnicas manuales descritas y, en especial, en el desarrollo de herramientas que permitan su automatización. Además, recientemente se ha experimentado un aumento del interés en los clasificadores espectrales automáticos, debido sobre todo a los proyectos de investigación astronómica a gran escala, como por ejemplo la misión espacial GAIA (con lanzamiento previsto en el 2012) [GAIA 2010], en los que se contempla la recolección masiva de datos, su estructuración y organización, y la posterior explotación mediante técnicas automáticas o pseudo-automáticas.

Estas grandes bases de datos astronómicas actuales y futuras imposibilitan considerablemente la utilización de las técnicas tradicionales basadas en la inspección visual de cada espectro individual, ya que su uso implicaría un gran consumo tanto de tiempo como de recursos humanos. Asimismo, un sistema de clasificación automático eliminaría en gran medida la subjetividad inherente a los métodos manuales (basados en criterios derivados de la experiencia previa de cada experto), garantizando la repetibilidad exacta de todo el proceso y la homogeneidad de los resultados. Con el avance tecnológico de las técnicas computacionales y, en especial en el área de la Inteligencia Artificial, hoy en día es perfectamente factible la elaboración de tal sistema automático, como se pondrá de manifiesto en los capítulos siguientes, constituyéndose en una de las herramientas fundamentales del experto para la clasificación espectral de las estrellas.

Actualmente existen varios proyectos internacionales que trabajan en sistemas de tratamiento de información astronómica basados en la explotación conjunta de los archivos espaciales y las bases de datos astronómicas disponibles (iniciativas denominadas Observatorios Virtuales Internacionales). Nuestro grupo de investigación es miembro activo del Observatorio Virtual Español (SVO) [Solano 2007], formado por varios grupos españoles interconectados que tratan, entre otras proyectos de interés, de desarrollar aplicaciones para el análisis automático de datos astronómicos. Algunas técnicas de Inteligencia Artificial, como las redes neuronales, estarían entre los métodos que se están utilizando para implementar tales desarrollos.

La investigación actual en Inteligencia Artificial ha puesto de manifiesto que dotar a los programas de heurísticas los habilita para afrontar problemas que de otro modo, con las técnicas de computación habituales, serían difíciles o incluso imposibles de resolver. Un ejemplo ya clásico de aplicación de esta disciplina son los programas de juego de ajedrez,

que se han reforzado incluyendo conocimiento sobre estrategias generales y posiciones óptimas, en lugar de confiar solamente en la habilidad del computador para calcular variaciones [Levy 1988]. Otros ejemplos académicos pueden encontrarse en áreas como la Meteorología, la Geofísica, o la Ingeniería Aeroespacial, donde las técnicas de IA se han utilizado para interpretar imágenes de satélites, predecir el tiempo atmosférico e incluso para implementar sistemas de ayuda en la toma de decisiones [Downs 1998] [Krasnopolsky 2006].

Las técnicas de Inteligencia Artificial, como se expuso en la revisión histórica del capítulo precedente, se han venido aplicando en los últimos años a diversos problemas en el campo de la Astrofísica, como por ejemplo la identificación de galaxias [Naim 1995], la predicción de la actividad solar [Calvo 1995] o el análisis de curvas de luz [Sarro 2006]. Durante la pasada década, una de las áreas más prolíficas en la aplicación de estas técnicas (especialmente redes de neuronas artificiales multicapa) y en la cual se encuadra el sistema propuesto en esta tesis doctoral, ha sido la clasificación espectral automática y la obtención de parámetros físicos de las estrellas.

Los primeros intentos de automatización de la clasificación espectral de las estrellas se remontan a varias décadas atrás. En una primera aproximación se aislaron determinadas líneas espectrales correlacionándolas con cada tipo MK característico [Jones 1966], aunque desafortunadamente esta técnica de correspondencia de líneas adolecía de la desventaja de la necesidad previa de conocer el tipo espectral aproximado de cada estrella antes de determinar los índices a buscar, ya que de otro modo se correría el riesgo de encontrar características muy diferentes en las mismas longitudes de onda. Otro de los métodos que se diseñaron fue el del vector de mínima distancia [Kurtz 1984] [LaSala 1994], en el que se trataba de buscar la correspondencia óptima entre el espectro problema y los de un catálogo de estándares, centrando la comparación en diferentes regiones espectrales para los diferentes tipos de estrellas. Si bien se obtuvieron unos resultados respetables (resolución de 2.2 subtipos espectrales), en esta técnica resulta extremadamente complejo fijar los vectores de peso, pues dependen fuertemente del tipo espectral y de la luminosidad, factores desconocidos a priori.

A mediados de la década de los 90, cuatro grupos de investigación independientes comenzaron a aplicar con éxito las redes de neuronas artificiales al problema de clasificación en el sistema MK de espectros de baja resolución en el rango óptico [Hippel 1994] [Weaver 1995] [Gulati 1994] y ultravioleta [Vieira 1998], alcanzando una precisión de 0.6 subtipos y 0.35 clases de luminosidad para estrellas de tipo A (Weaver y Torres-Dodgen) y una resolución de aproximadamente 2 subtipos en los otros tres casos. Todos estos trabajos pioneros pusieron de manifiesto el tremendo potencial de la vertiente basada en redes neuronales para acometer el problema de clasificación espectral, sentando las bases para

una segunda generación de aplicaciones en las que se abordaría la clasificación bidimensional, aumentándose asimismo el tamaño de la muestra de espectros [Weaver 1997] [Bailer-Jones 1998] [Singh 1998] [Weaver 2000]. En la misma época surgieron algunos estudios que trataban el problema de la determinación de parámetros físicos (T_{eff}, log g, [Fe/H]) de las estrellas a través de su espectro, entrenándose para ello redes de neuronas artificiales tanto con modelos de atmósferas estelares [Bailer-Jones 1997] generados mediante el software específico SPECTRUM [Gray 1994a], como con espectros reales (de los tipos F y G, en este caso) cuyos parámetros físicos habían sido determinados previamente [Snider 2001].

La tendencia actual en el análisis de datos astronómicos basado en Inteligencia Artificial se ha desplazado hacia la resolución de problemas específicos de clasificación y parametrización espectral, utilizando para ello las técnicas que han demostrado mayor solvencia en los estudios anteriores, esto es, mayoritariamente sistemas subsimbólicos. A modo de ejemplo cabe mencionar la determinación de parámetros atmosféricos en los cúmulos estelares M 55 y ω Centauri [Willemsen 2005], la clasificación de 2000 espectros de la base de datos *Calgary* [Gupta 2004], la parametrización de estrellas procedentes de observaciones directas basadas en la técnica propuesta por Snider et ál. [Giridhar 2006], la más reciente clasificación en el sistema MK de 5000 espectros del *Sloan Digital Sky Survey* [Bazarghan 2008] o la preparación de métodos automáticos para clasificar los objetos detectados por la futura misión espacial GAIA [Bailer-Jones 2008].

La gran mayoría de los estudios analizados en esta sección han utilizado las redes de neuronas artificiales como paradigma para abordar la automatización de la clasificación espectral, obteniendo diferentes grados de precisión en sus resultados. No es por tanto nuestra intención implementar de nuevo modelos que ya han demostrado en mayor o menor medida su adecuación al problema que nos ocupa. En lugar de desarrollar sistemas dedicados de redes de neuronas artificiales entrenadas para cada caso particular, el objetivo último de este estudio es el análisis, diseño e implementación de un sistema híbrido global de clasificación y parametrización automática de espectros estelares procedentes de observaciones astronómicas, basado en la cooperación de diversas técnicas de Inteligencia Artificial y accesible a la comunidad científica a través de la Red. De esta forma, esta herramienta automática podría dar servicio *online* tanto a espectroscopistas involucrados en grandes *surveys* que, con fines de preselección de espectros o bien meramente estadísticos, necesiten una clasificación o parametrización inicial o incluso cotejar sus propios resultados, como a aquellos investigadores implicados en una amplia variedad de estudios más específicos que deseen la determinación particular de los parámetros físicos o de la clasificación de sus propias estrellas singulares.

Las filosofías de la clasificación y de la parametrización física de los espectros son sensiblemente diferentes. El propósito de la clasificación es alojar a cada estrella problema dentro de un marco definido por una serie de estándares; el sistema MK ha constituido durante décadas una vía productiva para estudiar estrellas individuales, poblaciones estelares e incluso la estructura de las galaxias, debido en gran parte a su amplia difusión y a que, en general, es bien conocida la relación aproximada de sus grupos espectrales con parámetros estelares tales como la magnitud absoluta, la temperatura superficial o la masa. La parametrización estelar busca, en cambio, eludir el paso inicial de la clasificación MK y determinar directamente los parámetros atmosféricos; la desventaja obvia es que los resultados obtenidos dependen en gran medida del modelo seleccionado, aunque por otra parte, las atmósferas modelo pueden construirse fácilmente para metalicidad subsolar y, por lo tanto, se puede obtener la parametrización de espectros que no sería posible clasificar adecuadamente en el sistema Morgan-Keenan.

Entre las diferentes técnicas de Inteligencia Artificial, los sistemas basados en el conocimiento parecen, a priori, los más apropiados para abordar el problema específico de la obtención automática de los tipos espectrales en el sistema MK. La asignación de las diferentes clases espectrales se basa en una serie de criterios e índices espectrales fruto del conocimiento específico y la experiencia propia de los astrónomos en las tareas de clasificación. Por ello proponemos el diseño y desarrollo de un sistema experto específico, en el que se podrían incluir en forma de reglas dichos criterios y de este modo reproducir de forma fiable el razonamiento de los especialistas en este campo de clasificación espectral. Al mismo tiempo, tal sistema podría tanto servir de asistencia en las tareas de clasificación para astrónomos experimentados como facilitar el entrenamiento de nuevos expertos espectroscopistas.

Por otra parte, el enfoque basado en redes de neuronas artificiales parece el más adecuado para la extracción de los parámetros astrofísicos de las estrellas, puesto que generalmente estas redes son capaces de descubrir las relaciones intrínsecas que existen en los patrones con los que han sido entrenadas, habiendo asimismo demostrado a lo largo de los últimos años su eficacia para afrontar problemas en los que los parámetros de salida dependen de forma no lineal de varias variables presentes en los patrones de entrada.

Tal y como apuntan varios autores en estudios recientes [Allende 2004], después de la adquisición, reducción, análisis y clasificación, la última fase del proceso de tratamiento automático de los datos astronómicos de cualquier gran proyecto futuro tendría que ser necesariamente el almacenamiento de los mismos en una base de datos especializada y accesible *online*. Siguiendo esta corriente, el proyecto global en el que se incluye el trabajo presentado en esta tesis doctoral propone la formalización de un único sistema híbrido en el que se combinen y cooperen técnicas de procesado de señales, lógica difusa, sistemas basa-

dos en el conocimiento, diferentes modelos de redes de neuronas artificiales, análisis estadístico y redes funcionales, integradas todas ellas a través de una base de datos relacional que almacene y estructure toda la información disponible, constituyendo al mismo tiempo un método fácil y rápido de comparar y contrastar los resultados obtenidos con los diferentes métodos. Dicho sistema híbrido estará dotado de una interfaz ergonómica, cómoda y sencilla, que permita a los futuros usuarios obtener *online* la clasificación en el sistema MK y/o la parametrización de sus espectros a través de una base de datos estelar accesible a través de Internet [STARMIND 2010].

En los siguientes capítulos se describen en detalle los diferentes módulos del sistema híbrido propuesto, analizando los resultados obtenidos en las diferentes fases del desarrollo del mismo. Cabe esperar que la combinación de diferentes técnicas computacionales resulte en un sistema automático mucho más versátil que los basados únicamente en una de ellas, puesto que aquel debería ser capaz de seleccionar el método óptimo de clasificación para cada espectro particular, adaptándose por tanto mejor a la naturaleza misma del problema de clasificación espectral de las estrellas. La aplicabilidad de las técnicas integradas en el sistema propuesto podría ser más amplia y potente de lo que cabría suponer en un principio, permitiendo un análisis rápido y eficiente de objetos diferentes a las estrellas, como pueden ser galaxias y cuásares.

3 PREPROCESADO Y CARACTERIZACIÓN MORFOLÓGICA DE LOS ESPECTROS

El estudio profundo de la naturaleza es la fuente más fértil de descubrimientos matemáticos

Jean Baptiste Fourier

En el desarrollo del sistema híbrido que se propone para alcanzar el objetivo principal de esta tesis, la automatización de la clasificación y parametrización de espectros estelares, se adoptó una metodología que combina aspectos de las metodologías clásicas de desarrollo de sistemas de información con otros propios de las metodologías de aplicación de técnicas de Inteligencia Artificial (desarrollo de sistemas expertos, diseño de redes de neuronas artificiales, etc.) [Pfleeger 2006].

El paso inicial de esta metodología *híbrida* comprendería el estudio preliminar del problema, así como una primera aproximación al campo de aplicación bajo el que se proyecta solventar el mismo. Con ello se pretende adquirir la terminología propia del área, en este caso la Astrofísica, y los conceptos relevantes necesarios para la comprensión global de la problemática a resolver. Se trata esta de una fase crucial previa al desarrollo del propio sistema, ya que en base a la información adquirida durante la misma se modelará en objetos conceptuales el ámbito de aplicación sobre el que posteriormente se desarrollará todo el trabajo.

Esta etapa se llevó a cabo mediante una serie de entrevistas, tanto estructuradas como no estructuradas, con un grupo de expertos en el campo de la clasificación espectral pertenecientes al área de Astrofísica de la Universidade da Coruña. A través de estas reuniones se puso de relieve la naturaleza del proceso de tratamiento manual de los espectros, así como las características y principios esenciales en los que se fundamentan la clasificación y parametrización espectrales. Al mismo tiempo se adquirieron los conceptos generales necesarios para emprender el desarrollo del sistema. Las conclusiones más notables obtenidas en este análisis preeliminar de requisitos podrían resumirse como sigue:

- La información de las estrellas puede obtenerse a través de distintas técnicas, pero claramente una de las más adecuadas, tanto por la cantidad de información que aporta como por los formatos que maneja (fácilmente transferibles a un ordenador), es la espectroscopia.

- El espectro de una estrella es una señal que relaciona longitudes de onda, que suelen expresarse en ángstroms (Å), con flujos energéticos relativos de la estrella, medidos habitualmente en $erg^{-1}\ cm^{-2}\ s^{-1}\ Å^{-1}$; se obtiene normalmente mediante la reducción de los datos recogidos en las campañas de observación telescópicas.

- Para clasificar adecuadamente el espectro de una estrella es necesario determinar el sistema de clasificación y el catálogo de tipos espectrales que se va a utilizar como referencia. Tanto el propio sistema como el catálogo guía han de ser fiables y estar consolidados.

- El proceso de clasificación manual consiste fundamentalmente en la superposición directa de los espectros que se pretenden clasificar con los del catálogo de referencia. Además será necesario encuadrar previamente cada espectro dentro de un grupo (tipo espectral) de acuerdo con una serie de características presentes o ausentes en el mismo (líneas, bandas, etcétera).

- Algunos conceptos relevantes del ámbito de aplicación serán: líneas de absorción y emisión, bandas moleculares, zona azul y zona roja, escalado y normalización de los espectros, continuo espectral, tipos y subtipos espectrales, temperatura efectiva, gravedad, luminosidad, metalicidad.

Durante esta primera etapa de estudio se puso de manifiesto el interés de los astrónomos en automatizar y objetivar el proceso de clasificación manual, ya que esta fase de análisis espectral es una de las que más tiempo consume y la que está sin duda más sujeta a la experiencia del experto. Por otro lado, se indicó también la necesidad de disponer de una aplicación que permitiera visualizar y analizar de forma rápida, cómoda y sencilla los espectros.

El segundo paso de la metodología adoptada consistió en la toma de las decisiones técnicas pertinentes y en la adquisición y recopilación de todo el material necesario para inicial el desarrollo del sistema: equipos informáticos, software, datos, libros, revistas, etc.

En este punto se seleccionaron los espectros de los catálogos que se utilizarían como referencia, así como aquellos necesarios para la validación y verificación del sistema en sus diferentes fases. Si bien algunos de ellos se obtuvieron en campañas de observación llevadas a cabo por miembros de nuestro equipo de investigación en el Observatorio del

Roque de los Muchachos [IAC 2010], los espectros utilizados son en su mayoría públicos y están accesibles a través de Internet [CDS 2010] [SIMBAD 2010], como también lo está la información referente al sistema de clasificación MK descrito en el capítulo anterior, el cual se eligió como sistema de clasificación estándar [MK 2010].

A continuación se efectuó un estudio de las herramientas disponibles para la gestión e implementación de las distintas técnicas de Inteligencia Artificial seleccionadas (sistemas basados en el conocimiento, lógica difusa, redes de neuronas artificiales, redes funcionales, algoritmos estadísticos de *clustering*, etc.), analizándose asimismo los diversos métodos y algoritmos específicos para cada una de ellas. Finalmente, se seleccionaron aquellos métodos y herramientas que se estimaron los más adecuados para abordar los distintos aspectos del problema de clasificación y parametrización automática de espectros estelares.

La siguiente etapa metodológica, una vez finalizada la fase de adquisición y tras disponer ya de una información detallada, clara y concisa sobre los términos específicos del dominio de aplicación, será el análisis de toda la información recopilada, con el objetivo de descomponer conceptualmente el campo de aplicación sobre el que el sistema va a trabajar y acometer la definición específica del problema; aunque el propósito final de esta etapa es delimitar y definir los aspectos implicados en la clasificación espectral, la división en pequeñas unidades conceptuales facilita en gran medida la comprensión global del problema que se desea resolver.

Por medio de una segunda fase de entrevistas con el grupo de expertos mencionado, se concretaron las características espectrales que comúnmente se miden y analizan para poder determinar el tipo espectral y la luminosidad de una estrella, es decir, su clasificación MK. Además, se analizaron detalladamente los requisitos que debería reunir una aplicación de análisis y clasificación espectral adecuada. Las conclusiones finales obtenidas en esta etapa se resumen en el siguiente esquema:

- El sistema considerado, para lograr los objetivos especificados, debería comprender tanto el análisis morfológico y la posibilidad de visualización personalizada de los espectros como la obtención de la clasificación espectral de los mismos; ambas funcionalidades deberían estar completamente integradas, de forma que el sistema final actuase como una única aplicación eficiente y fácil de utilizar.

- En la implementación del análisis y visualización de espectros serían características deseables la comodidad y eficiencia, la posibilidad de visualizar y analizar espectros en diferentes formatos y comprendiendo distintos rangos y resoluciones, o la facilidad para medir el flujo energético en determinadas longitudes de onda.

- En cuanto a la parte de clasificación/parametrización propiamente dicha, sería recomendable contemplar la posibilidad de obtener una clasificación por niveles (global, tipo, subtipo, luminosidad) de espectros de estrellas en diferentes rangos de longitud de onda, formato y resolución espectral, así como el apoyo de las conclusiones con una medida de la confianza en las mismas y la explicación del razonamiento seguido por el sistema hasta alcanzar unos resultados determinados.

- Los criterios de clasificación que se utilizan actualmente se basan en la determinación visual de los valores para las diferentes características espectrales. En el sistema propuesto se medirán también estas características y se acotarán los valores propios de cada tipo espectral para las estrellas estándares del catálogo seleccionado como guía en cada caso de aplicación. Dentro de los índices espectrales considerados destacan principalmente dos grupos de características: las líneas de absorción/emisión (picos descendentes o ascendentes que indican la presencia de algún elemento químico en la estrella) y las bandas moleculares (zonas del espectro donde el flujo desciende del continuo manteniéndose por debajo en un intervalo amplio de longitudes de onda, señalando la absorción de una determinada molécula).

Las siguientes etapas de la metodología se corresponden con las fases principales de las metodologías clásicas de desarrollo de sistemas: análisis, diseño, implementación, documentación y pruebas [Pfleeger 2006]. Estas fases se siguieron para desarrollar tanto la herramienta de análisis espectral como el sistema híbrido de clasificación y parametrización de espectros. De este modo, en estas últimas etapas metodológicas se diseñaron y entrenaron las diferentes redes de neuronas artificiales y redes funcionales, se diseñaron e implementaron los diferentes sistemas expertos y se desarrollaron e implementaron los métodos de análisis *cluster* seleccionados.

A modo de fase final de la metodología, se llevó a cabo un análisis detallado de los resultados obtenidos con cada técnica de Inteligencia Artificial seleccionada, con el objetivo de concretar cuáles de ellas se adaptan mejor a cada problema específico de clasificación/parametrización espectral y, de esta forma, seleccionar las más óptimas para su implementación en el sistema híbrido final. Para el desarrollo de tal sistema, que integra las diferentes técnicas seleccionadas para automatizar la clasificación y parametrización espectrales, se ha seguido una metodología orientada a objetos en todas sus fases, basada en la técnica de modelado y diseño *Object Modeling Technique* (OMT) [Rumbaugh 1991], adoptando específicamente su concreción práctica, el lenguaje UML (*Unified Modeling Language*) [Rumbaugh 2004] [Dennis 2009] y empleando asimismo patrones de diseño [Shalloway 2004]. Los modelos, diagramas, casos de uso, etc., resultantes de la aplicación de dichas técnicas se recogen en el anexo I.

Como resultado de la aplicación de la metodología híbrida indicada, se propone como solución principal al problema planteado la formalización de un sistema híbrido capaz de determinar el método de clasificación o parametrización más apropiado para cada tipo de espectro y de obtener clasificaciones MK *online* a través de una base de datos estelar en Internet [STARMIND 2010].

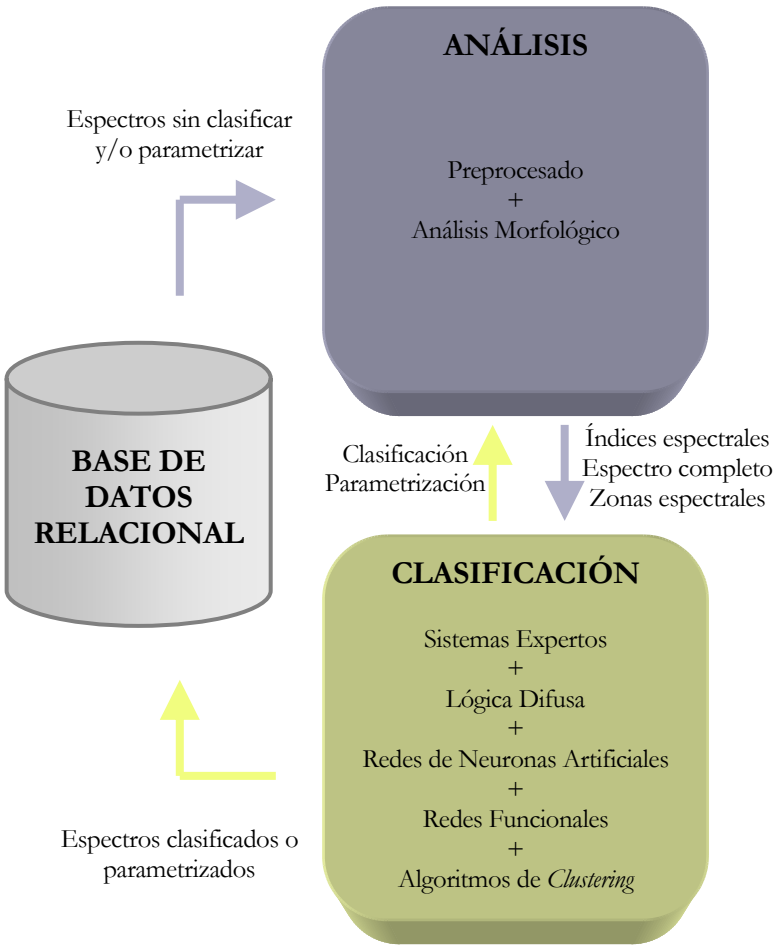


Figura 19. Esquema general del sistema híbrido de análisis y clasificación automática de espectros estelares

El propósito esencial del sistema de análisis y clasificación de espectros estelares es, como se ha mencionado previamente, emular en cierta medida el comportamiento de los expertos en clasificación, es decir, el método tradicional de clasificación manual que se ha analizado en el capítulo precedente. Si bien existen algunos criterios estándares, este proceso complejo se basa en un conjunto de reglas de clasificación propio de cada astrónomo, derivadas de su experiencia previa (véase sección 2.3 para más detalles). Para trasladar estos criterios a un sistema automático de clasificación, se ha optado por combinar una selección de técnicas, fundamentalmente de Inteligencia Artificial, entre las que destacan los sistemas

basados en el conocimiento, las redes de neuronas, los algoritmos de *clustering,* la lógica difusa y las redes funcionales, integrándose todas ellas para interactuar con los resultados del análisis de los datos astronómicos. Finalmente, el sistema híbrido que se propone incluye tres módulos lógicos diferentes, tal y como se muestra en la figura 19.

La base de datos relacional almacena y estructura toda la información disponible sobre las estrellas, incluyendo sus espectros, imágenes, fotometrías, etc., así como todos los cálculos y clasificaciones realizados por los diferentes expertos. La información que mantiene procede tanto de fuentes humanas como bibliográficas; en cuanto a su implementación, se ha desarrollado mediante el gestor *PostgreSQL* (v8.3) bajo Linux [Douglas 2005]. En el capítulo 7 de la presente tesis se recoge una exposición clara y extensa sobre su estructura, características, diseño e implementación.

El analizador espectral o módulo de análisis recupera los datos astronómicos de la base de datos, aplica las operaciones de preprocesado necesarias y lleva a cabo un análisis morfológico exhaustivo de los espectros, el cual incluye el estudio y medida de todos los índices espectrales necesarios para la clasificación, utilizando para ello fundamentalmente técnicas de procesado de señales; el subsiguiente análisis de sensibilidad de los parámetros determina el conjunto de características espectrales válidas para acometer la clasificación en cada caso concreto. El módulo de análisis incluye una interfaz ergonómica que permite a los usuarios finales del sistema analizar de forma clara, fácil y comprensible, los espectros completos y visualizar, identificar y medir aquellas características espectrales deseadas (líneas de absorción, bandas moleculares, etcétera). Además es capaz de extraer diversas regiones espectrales, permitiendo incluso simular la técnica manual mediante la superposición y comparación visual de los espectros problema con los de los catálogos de estrellas de referencia. Las entradas de este módulo están constituidas por los espectros que requieren ser clasificados y la salida consiste en una colección de diferentes índices y parámetros espectrales que se convertirán en el flujo de entrada del clasificador automático. Este módulo se ha desarrollado en *Builder C++* (v6) [Malik 2008] e integra componentes *ActiveX* específicos para la visualización de los espectros.

El clasificador estelar se basa en el diseño e implementación de las diferentes técnicas de Inteligencia Artificial elegidas para esta aproximación a la clasificación MK de los espectros. Las entradas de este módulo están constituidas tanto por los espectros completos que se pretende clasificar (a veces no se incluye todo el rango disponible, sino unas determinadas zonas espectrales de interés) como por los parámetros obtenidos mediante el análisis morfológico previo. La salida, que se transferirá a la interfaz del módulo de análisis para su presentación al usuario final, corresponde a la clasificación por niveles (temperatura efectiva, luminosidad, etc.) de los espectros de entrada, incluyendo un factor de credibilidad que indica la confianza del sistema en sus propias conclusiones. En cuanto a las técnicas

específicas de Inteligencia Artificial, las redes de neuronas artificiales se implementaron utilizando tanto el simulador de la Universidad de Stuttgart, SNNS (v4.3) [SNNS 2010a], como XOANE (*eXtensive Object-oriented Artificial Neural Networks Engine*), una herramienta propia de diseño y entrenamiento desarrollada en nuestro grupo de investigación [Ordoñez 2007]; los sistemas expertos se implementaron utilizando OPS/R2 [Forgy 1986]; el diseño de los distintos modelos de redes funcionales se realizó con *Matlab* (v7.10) [Hahn 2007] y *Mathematica* (v5) [Wellin 2005] y, finalmente, los algoritmos estadísticos de *clustering* se implementaron utilizando también el software *Matlab* (v7.10), en concreto su paquete estadístico *Statistics Toolbox*.

A continuación se describen los diferentes métodos, técnicas y algoritmos que se aplicaron e implementaron para el desarrollo de los módulos que integran el sistema final de clasificación y parametrización automática de espectros estelares. El presente capítulo está dedicado al análisis de datos astronómicos; en los capítulos 4 y 5 se presentan dos enfoques diferentes para llevar a cabo la clasificación automática en el sistema MK; y finalmente el capítulo 6 describe la aplicación del sistema desarrollado al problema de extracción de parámetros físicos de las estrellas.

3.1 Preprocesado

En el módulo de análisis del sistema híbrido propuesto se realiza el preprocesado y análisis morfológico de los espectros estelares mediante técnicas de procesado de señales, ya que se considera para estos efectos que los espectros no son más que señales que relacionan longitud de onda y flujo energético [Proakis 2006].

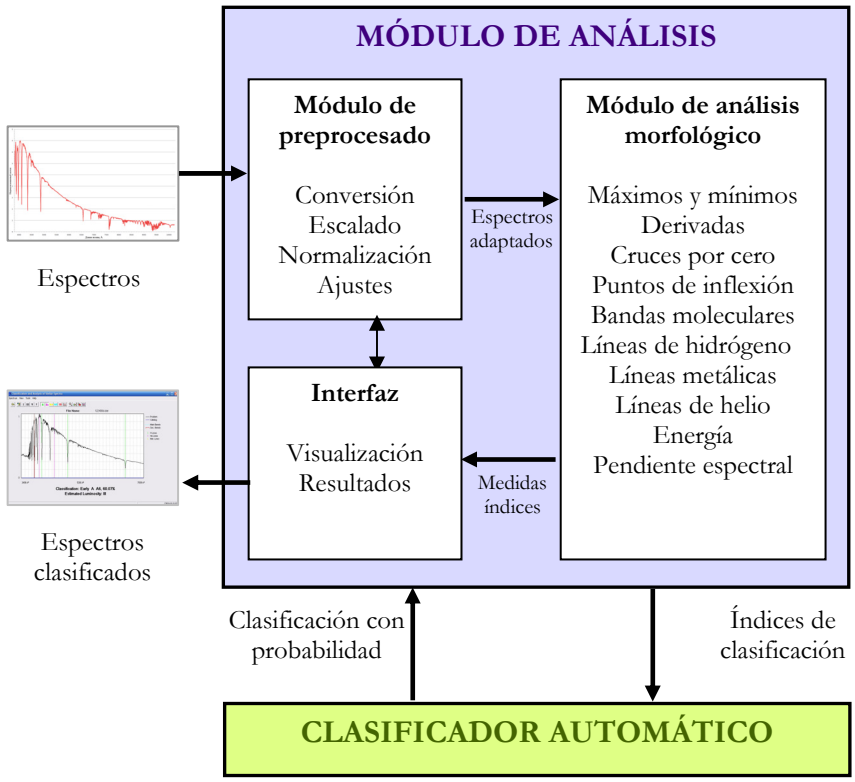


Figura 20. Esquema de las diferentes funcionalidades del módulo de análisis espectral

El flujo de datos de entrada de todo el sistema automático de clasificación lo constituyen los espectros de las estrellas que se desea clasificar, que son transferidos primeramente al módulo de análisis. Estos espectros estarán, obviamente, sin clasificar y pueden presentar peculiaridades y/o un formato distinto al estándar adoptado en el sistema (se eligió aquel que se presenta con más frecuencia en los catálogos espectrales analizados), con lo que será necesario que se adapten antes de proceder a realizar el análisis morfológico correspondiente. El módulo de preprocesado será el encargado de que se efectúen todas las operaciones necesarias que aseguren que los espectros presenten el formato correcto para ser procesados. Estas operaciones incluyen, entre otras, la conversión de los ficheros de datos al formato estándar del sistema, el cambio de escala para facilitar la comparación con los espectros de los catálogos de estándares, el cálculo e interpolación de la dispersión es-

pectral lineal, la detección y ajuste de las zonas espectrales en las que no se dispone de flujo y la comprobación de los rangos espectrales. Este submódulo de preprocesado proporciona como salida el conjunto de espectros de entrada corregidos y adaptados al formato de entrada estándar del sistema.

En la figura 21 se muestra un resumen del formato estándar que deben tener los espectros para que puedan ser clasificados directamente con el sistema desarrollado, sin necesidad de correcciones previas; en todo caso, este será también el formato final de los espectros una vez se les apliquen las operaciones de preprocesado pertinentes.

El sistema híbrido de clasificación espectral acepta como entrada espectros estelares en forma de fichero de texto, con dos columnas separadas por espacios. En la primera columna se proporcionan las longitudes de onda medidas en ángstroms; en la segunda columna los flujos energéticos correspondientes a cada longitud de onda expresados en $erg^{-1}\ cm^{-2}\ s^{-1}\ Å^{-1}$. Se seleccionó este formato de fichero en *texto plano* por ser el más frecuente, tanto en las estrellas procedentes de catálogos públicos como en las que provienen de observaciones directas. Además, esta representación del espectro puede obtenerse con facilidad utilizando la mayoría de las aplicaciones comunes de reducción de datos estelares. Aun así, se implementó un algoritmo de conversión desde el formato binario FITS (*Flexible Image Transport System*), formato de datos habitual en observatorios astrofísicos, al formato de texto de dos columnas descrito.

λ_1	$Flujo_1$	
λ_2	$Flujo_2$	
λ_3	$Flujo_3$	
Å	$erg^{-1}cm^{-2}s^{-1}\ Å^{-1}$	
λ_k	$Flujo_k$	
λ_{max}	$Flujo_{max}$	$\lambda_1 \geq 3510$ Å
λ_{n-1}	$Flujo_{n-1}$	$\lambda_n \leq 9469$ Å
λ_n	$Flujo_n$	$disp = \lambda_n - \lambda_{n-1}$

Figura 21. Resumen del formato estándar de los datos de entrada del sistema

Aunque la mayoría de los espectros de los catálogos públicos se encuentran disponibles en el formato estándar que se adoptó para el sistema, durante la fase de adquisición de los diferentes conjuntos de espectros de prueba se observó que algunos de ellos presentaban un mismo formato, diferente al descrito, en el que cada conjunto de espectros se representa mediante dos ficheros de texto:

- Fichero de características en el que se incluye una línea por cada espectro, especificándose en ella el identificador del mismo, la longitud de onda inicial, la dispersión o frecuencia de muestreo y el tipo espectral y la luminosidad (si se conocen).

- Fichero de datos único en el que se incluyen los valores relativos al flujo energético de todos los espectros; cada línea de flujos va precedida del mismo identificador de espectro que se le ha asignado a cada uno de ellos en el fichero de características.

En el módulo de preprocesado se implementaron las operaciones necesarias para transformar al formato estándar del sistema los espectros que presentan este segundo formato. Para ello se diseñó un algoritmo de conversión que incluye los siguientes pasos:

1. Análisis del fichero de características: para cada espectro se obtiene su identificador, la longitud de onda inicial, λ_i, el número de muestras, N, y la distancia entre las mismas o dispersión, d; esta información se almacena para futuras consultas.

2. Obtención de los datos: se lee secuencialmente el fichero de flujos energéticos y se calculan las longitudes de onda correspondientes a cada flujo mediante la siguiente ecuación:

$$\lambda_k = \lambda_1 + d \cdot k,$$

   donde k ($0 \le k < N$) es el número de muestra actual y d la dispersión o frecuencia de muestreo.

3. Conversión al formato estándar: la longitud de onda calculada mediante la fórmula anterior (λ_k) se almacena en un fichero de texto junto con el flujo correspondiente obtenido del fichero de datos (F_k). Este fichero se encuentra ya en el formato aceptado por el sistema, pues presenta N columnas de pares de longitud de onda y flujo energético (λ_k, F_k).

Por lo tanto, mediante la implementación de las operaciones de conversión de formato se transforman los espectros de entrada en ficheros de texto con un formato entendible y procesable por el sistema híbrido de clasificación, de forma que se aumenta considerablemente el número de espectros susceptibles de ser analizados por el mismo.

En la técnica manual habitual, como se ha indicado, los astrónomos versados en clasificación cotejan los espectros con aquellos pertenecientes a los catálogos de referencia seleccionados para cada caso concreto. Para facilitar esta comparación es preciso que todos los espectros estén en la misma escala o valor de flujo de referencia. Esta operación de escalado se realiza ajustando los flujos energéticos de cada espectro de forma que en una determinada longitud de onda se establezca un flujo predeterminado (en nuestro caso sería 100 $erg^{-1}\ cm^{-2}\ s^{-1}\ Å^{-1}$, debido a que es este valor el que se utilizaba en el primer catálogo de referencia que seleccionamos [Silva 1992]). Por otra parte, se realiza un escalado adicional que consiste en dividir todo el espectro por el valor máximo de flujo energético: de esta forma en la longitud de onda que originalmente presentaba el valor de flujo más alto, el flujo será siempre unitario, y en el resto de longitudes de onda oscilará dentro del intervalo [0, 1], independientemente del espectro del que se trate. En la figura 22 se muestran dos espectros de tipo A, el que se desea clasificar en azul y el correspondiente al mismo tipo en

el catálogo de referencia en verde, antes y después del proceso de escalado de los mismos. Como puede observarse en la primera gráfica, antes de escalar los espectros la comparación visual de las características espectrales (como por ejemplo la intensidad de la línea de hidrógeno H_β en 4861 Å) se convierte en una tarea bastante laboriosa; en cambio, una vez realizadas las operaciones de preprocesado, en la segunda gráfica se observa claramente que esta comparación visual resulta mucho más sencilla.

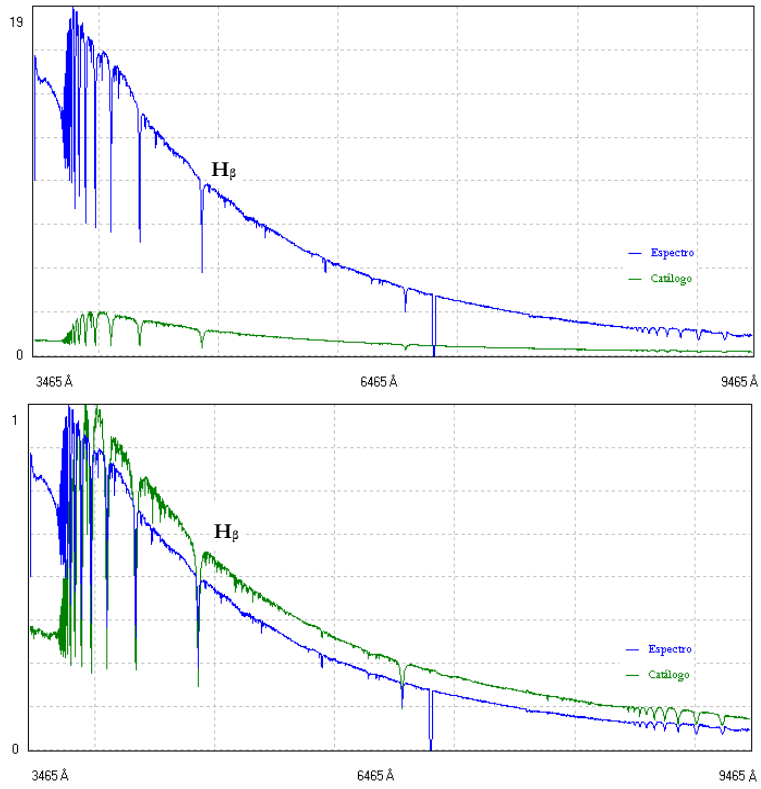


Figura 22. Comparación entre un espectro de tipo A y el estándar del catálogo guía antes y después de las operaciones de escalado

En cuanto a las longitudes de onda consideradas, el sistema acepta espectros de cualquier rango espectral, aunque es deseable que al menos se proporcionen flujos energéticos dentro del rango de longitudes de onda contemplado en los catálogos de referencia de estándares (de 3465 Å a 9469 Å). Los espectros cuyo rango de longitudes de onda sea menor serán procesados, si bien el usuario será advertido de que el sistema no puede garantizar la obtención de una clasificación consistente, ya que puede ocurrir que la mayoría de los índices utilizados para la clasificación se encuentren fuera del rango espectral proporcionado (las características espectrales más notables suelen aparecer entre 3933 Å y 7000 Å).

La dispersión, es decir, la frecuencia de muestreo o distancia entre dos muestras consecutivas, no está limitada; su valor se calcula en el módulo de preprocesado, ya que no existe uniformidad entre los distintos catálogos. Además, restringir este parámetro supon-

dría perder precisión en el espectro, lo cual no sería recomendable de ningún modo. Para obtener el valor de la dispersión de un espectro se extraen aleatoriamente varias zonas espectrales y se calcula la distancia en ángstroms entre muestras consecutivas, comprobando que coincide en los diferentes intervalos extraídos. En algunos casos, si bien no frecuentes, ocurre que determinadas zonas presentan más datos de flujo que otras, ya que están muestreadas con mayor precisión, esto es, la dispersión no es constante en todo el espectro. Con el objetivo de unificar el espectro se ha implementado un algoritmo que calcula y ajusta la dispersión a través de los siguientes pasos:

1. Obtención de la dispersión mínima: se recorre el espectro completo calculando las distintas distancias entre muestras consecutivas, seleccionado finalmente la menor de ellas como dispersión mínima.

2. Ajuste del espectro: se interpola linealmente el espectro utilizando como frecuencia de muestreo la mínima obtenida en el paso anterior, de manera que la dispersión sea de esta forma constante en las diferentes zonas espectrales.

Aunque la mayor parte de los espectros contienen datos de flujo energético en todo el rango de longitudes de onda, en la etapa de análisis y selección de los espectros de validación se observó que algunos catálogos incluyen espectros que presentan zonas en las que o bien no se proporcionan datos (*gaps*) o bien se les asigna un valor artificial de flujo constante (normalmente flujo 0). Estas carencias de información suelen deberse principalmente a los efectos de la atmósfera y a la resolución de los aparatos de medida [Birney 2006]. Para corregir los espectros de forma que, en la medida en que sea significativo (a veces los huecos son tan amplios que la pérdida de información no puede ser solventada), todo el rango espectral quede cubierto se implementó un algoritmo de detección y ajuste de regiones espectrales que presentan ausencia de datos; en él se trató de reproducir el sistema de ajuste que se realiza manualmente sobre el espectro cuando los expertos en clasificación localizan zonas espectrales vacías, esto es:

1. Detección de huecos: se realiza un examen del espectro completo calculando la distancia entre muestras consecutivas; cuando esta distancia es mayor que la dispersión se ha detectado una zona sin datos. En el caso de valores de flujo constante (normalmente 0), se establece un número máximo de muestras consecutivas con el mismo valor que se consideran admisibles y a partir de él se procede a corregir el espectro de igual forma.

2. Corrección del espectro: se calcula mediante interpolación lineal el valor del flujo energético para todas las longitudes de onda de la zona vacía detectada.

En la figura 23 se muestra el proceso de corrección de las zonas sin datos de un espectro de tipo G: el señalado en verde es el espectro completo original de la misma estrella, mientras que el de trazo azul es el espectro corregido mediante interpolación en las zonas sin flujo resaltadas en magenta en la figura, como por ejemplo las correspondientes a la línea CaII, H (aproximadamente en 3968 Å) o a la denominada *G band* (entre 4300 Å y 4320 Å). Aunque en el espectro interpolado ambas zonas no son totalmente exactas al original, se ha solventado en gran medida la ausencia de información y se puede incluso calcular un valor aproximado para estos dos índices de clasificación, estimación que de otra forma resultaría imposible.

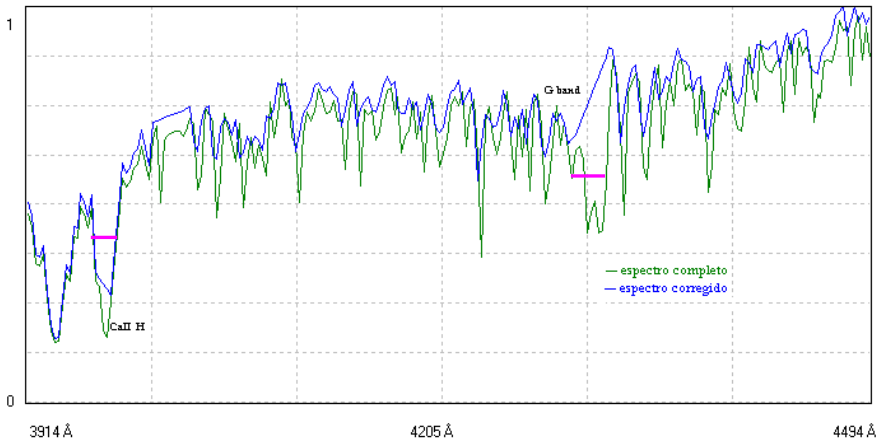


Figura 23. Interpolación de zonas espectrales sin datos de flujo para un espectro de tipo G

Como resultado de todas las operaciones llevadas acabo en el módulo de preprocesado, los espectros de entrada se encuentran ya transformados al formato estándar del sistema, escalados de acuerdo al catálogo de referencia de estándares seleccionado y corregidos en las zonas que presentan huecos; por consiguiente, están ya en condiciones de ser proporcionados al módulo de análisis morfológico para proceder al cálculo de los índices necesarios para la clasificación y/o extracción automática de parámetros físicos.

3.2 Análisis morfológico

Los espectros, adaptados al formato estándar del sistema y corregidos mediante las operaciones de preprocesado, se transfieren al submódulo de análisis en el que se procede a realizar un análisis morfológico exhaustivo de los mismos, utilizando para ello fundamentalmente técnicas de procesado de señales [Proakis 2006]. El procesamiento de los espectros que se lleva a cabo en este punto comprende dos aspectos claramente diferenciados: la extracción de características de la señal de flujo y la estimación de los valores de los índices que van a servir de base para la clasificación y/o parametrización automática.

En primer lugar se calculan los valores característicos del espectro, interpretado como señal que relaciona longitudes de onda y flujos energéticos, considerando dos enfoques diferentes:

- Análisis matemático: máximos y mínimos relativos en distintos intervalos de interés, derivadas sucesivas de la señal, cruces por cero, puntos de inflexión, pendiente en algunas zonas, transformadas (Fourier, Laplace, Z), señal de continuo espectral, energía espectral (integral discreta del flujo energético), etc.
- Análisis estadístico: vectores de medias, vectores de desviaciones típicas, varianza muestral, relación señal a ruido (SNR), etc.

En la figura 24 se recoge un ejemplo del tipo de procesado al que inicialmente se someten los espectros en el submódulo de análisis morfológico; en trazo negro se muestra el espectro de una estrella de tipo A2, la derivada primera del flujo en cada longitud de onda se muestra en verde, y la desviación típica en color amarillo. Esta caracterización numérica y estadística de los espectros será la que en parte se empleará para estimar los valores de los índices espectrales susceptibles de utilizarse en la clasificación y/o parametrización automáticas. De este modo, en una segunda fase de estudio morfológico de los espectros se detectan y miden una serie de parámetros que se contemplan en la técnica de procesamiento manual, los cuales podrían englobarse dentro de tres grupos generales:

- Intensidad o anchura equivalente (EW) de líneas espectrales de absorción y emisión de elementos químicos: series del hidrógeno (Balmer, Paschen, etc.), helio, metales y otros elementos (Ca, K, Fe, Mg, Mn, Si), etc.
- Bandas moleculares de absorción de diferentes compuestos: hidrógeno y carbono (CH), óxido de titanio (TiO), etc.

- Relaciones entre intensidad o anchura equivalente de líneas de absorción/emisión: ratios de anchura equivalente entre líneas cercanas (CaII H/CaII K, CaI/H_δ), diferencia de intensidades (CaII K-H_δ), etc.

La mayor parte de los parámetros de clasificación que se detectan y miden mediante esta segunda fase de análisis morfológico de la señal se adquirieron a través del estudio realizado sobre el proceso de clasificación manual que practican los expertos, observándose asimismo las diferentes fuentes bibliográficas disponibles. La medida de sus valores se obtiene mediante algoritmos de procesado de señales que se basan fundamentalmente en la estimación del continuo espectral local de las líneas de absorción/emisión, y en el cálculo de la energía de las bandas moleculares.

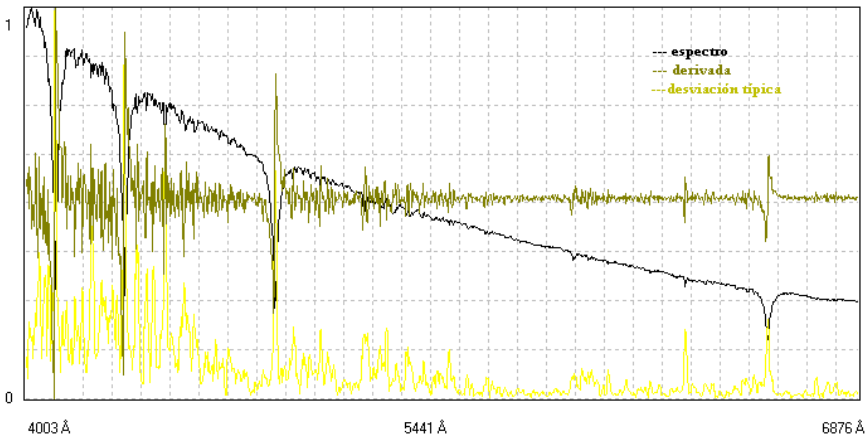


Figura 24. Ejemplo de la caracterización matemática y estadística de un espectro de tipo A2

Desde un punto de vista puramente morfológico, una banda molecular es una zona espectral donde el flujo energético decrece repentinamente con respecto al continuo local y se mantiene por debajo de este durante un intervalo de longitud de onda lo suficientemente amplio. Con el propósito de determinar dicho intervalo, que en el proceso manual establecen visualmente los astrónomos expertos en clasificación, fue preciso desarrollar un algoritmo de ajuste que comprende los siguientes pasos:

1. Determinación de la anchura de la banda: un grupo de expertos realizó una aproximación del intervalo de longitudes de onda en el que se espera encontrar cada banda molecular estudiada habitualmente en la técnica manual de clasificación estelar.

2. Validación del intervalo en los espectros del catálogo de referencia: cada región señalada por los expertos en el paso anterior se contrastó con las bandas moleculares presentes en las estrellas de tipos tardíos del catálogo de estándares correspondiente

a cada caso particular; se eligieron las estrellas de los tipos K y M por ser estas las que teóricamente presentan un mayor número de bandas moleculares y con una profundidad más pronunciada.

3. Ajuste final de la banda molecular: se estableció como intervalo final de cada banda molecular aquel que mejor concordancia tenía con el de los espectros de los catálogos de estándares, pues son estos los que se toman como referencia en todo momento.

Como resultado de este proceso minucioso de calibración, cada banda molecular queda definida por su longitud de onda central y el radio del intervalo que abarca.

Los espectros, aunque ya han sido adaptados y corregidos mediante las operaciones de preprocesado, presentan con frecuencia un desfase de unos pocos ángstroms que normalmente es debido a tres factores: la falta de precisión de los aparatos de medida, la velocidad radial de la estrella y la no corrección al sistema de referencia local en reposo (cuando se calibra un espectro en longitud de onda suele realizarse una corrección de punto cero, denominada corrección al sistema de referencia en reposo, que consiste en sumar o restar un desplazamiento en longitud de onda a todo el espectro para corregir el movimiento de rotación del sistema Tierra/Sol proyectado en la línea de visión de la estrella por efecto Doppler [Eden 1992]). Este desplazamiento de la señal no afecta al análisis morfológico global de la misma, puesto que todo el espectro se encuentra desplazado. Sin embargo, este desfase sí podría influir en la detección de una banda molecular o una línea de absorción particular, ya que puede parecer que esta no se halle presente en el espectro cuando en realidad se encuentra desplazada a la anterior o siguiente longitud de onda. Estos desplazamientos no tienen gran incidencia en el cálculo de la energía de las bandas moleculares, debido a que, como se ha puesto de manifiesto con el algoritmo anterior, el propio ajuste del intervalo de cada banda se realiza ya mediante aproximaciones: el hecho de incluir en este punto unas pocas muestras más en el cálculo no supone introducir un error digno de tenerse en cuenta. En el caso de las líneas espectrales de absorción y emisión, como se verá más adelante, esta situación cambia.

Para detectar una banda molecular determinada en un espectro simplemente se analiza el intervalo en el que se espera encontrar la misma, el cual se habrá establecido previamente empleando el algoritmo de calibración descrito. Una vez que se ha extraído dicho intervalo del espectro global, se procede a calcular la energía de la banda; esto, en términos de procesado de señales, significa estudiar el área situada por debajo del continuo espectral en la región de longitudes de onda en la que teóricamente se ubica dicha banda. Consecuentemente, para tratar morfológicamente las bandas moleculares solamente será necesario estimar el valor de su energía y decidir posteriormente si son lo suficientemente signifi-

cativas en cada espectro. Con el objetivo de calcular el valor del área comprendida por cada banda molecular, en el módulo de análisis morfológico se implementó un algoritmo que puede resumirse en los siguientes pasos:

1. Delimitación superior de la banda: se realiza una interpolación lineal entre los extremos del intervalo definido para cada banda molecular, calculando las proyecciones sobre la recta obtenida para las longitudes de onda incluidas en el intervalo que abarca cada banda. Esto es, para cada valor de longitud de onda del intervalo de la banda, $\lambda_k \in [\lambda_i, \lambda_d]$, se tiene que:

$$L(\lambda_k) = F(\lambda_i) + p \cdot (\lambda_k - \lambda_i) \mid p = \left(\frac{F(\lambda_d) - F(\lambda_i)}{\lambda_d - \lambda_i} \right),$$

   donde $L(\lambda_k)$ será la proyección en la recta que une los extremos de la banda de la longitud de onda λ_k; $L(\lambda_i)$ la proyección de la longitud de onda correspondiente al extremo izquierdo del intervalo de la banda, λ_i, que coincide con el valor del flujo en ese punto, $F(\lambda_i)$, y $L(\lambda_d)$ la que corresponde al extremo derecho, λ_d, también equivalente a su flujo energético, $F(\lambda_d)$; finalmente p será la pendiente en cada punto de la recta que une los dos extremos de la banda.

2. Estimación del área global: se calcula mediante integración (integral discreta) el área comprendida entre la recta de delimitación superior de la banda, determinada en el paso anterior, y el eje de abscisas. Esto es:

$$G = \int_i^d L(\lambda_k)\, d\lambda$$

3. Estimación del área circundante: se calcula el área que rodea a la banda molecular mediante la integral discreta de la señal de flujo entre los extremos de la misma. De esta forma, siendo F la función de flujo energético del espectro, se tiene que:

$$E = \int_i^d F(\lambda_k)\, d\lambda$$

4. Obtención de la energía de la banda: se estima mediante la diferencia entre el área total, calculada en el segundo paso del algoritmo, y el área externa de la banda; de esta forma se obtendrá un valor numérico representativo de la energía de cada banda, B_{id}, tanto mayor cuanto más profunda y amplia sea esta. Esto es:

$$B_{id} = G - E = \int_i^d L(\lambda_k)\, d\lambda - \int_i^d F(\lambda_k)\, d\lambda \qquad \text{(E1)}$$

En la figura 25 se muestra un ejemplo que ilustra el procedimiento seguido para el cálculo del valor de las bandas moleculares en un espectro de tipo M. La zona marcada en azul celeste corresponde a la energía de la banda molecular que se quiere estimar (B_{id}), la zona delimitada por el trapecio rectángulo con los lados en rojo sería el área global del segundo paso del algoritmo (G), y la zona verde correspondería al área circundante a la banda (E); a simple vista puede observarse que la energía de la banda puede aproximarse mediante la diferencia de las dos áreas anteriores.

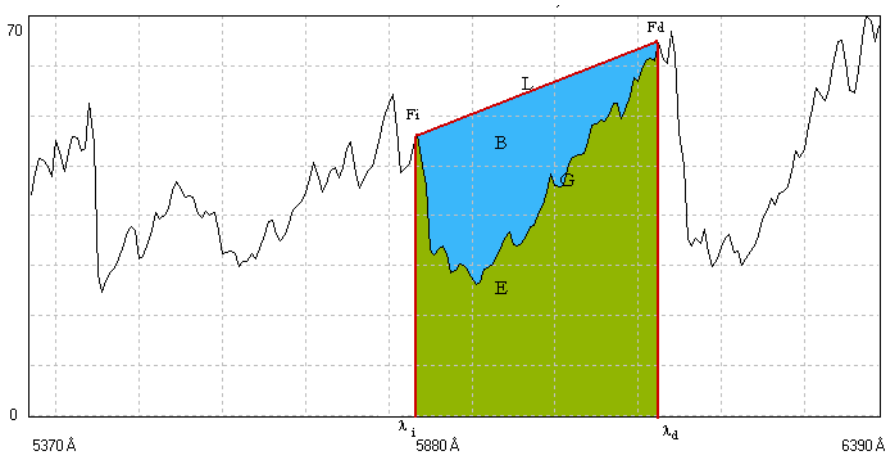


Figura 25. Estimación de la energía espectral de la banda alrededor de 5940 Å para un espectro de tipo M mediante el algoritmo implementado en el sistema

Las líneas de absorción/emisión son líneas oscuras o brillantes que aparecen en un espectro uniforme y continuo como resultado de una carencia (absorción) o exceso (emisión) de fotones en una región específica de longitudes de onda en comparación con sus regiones cercanas. Morfológicamente, una línea de absorción es un pico descendente (o ascendente si se tratase de líneas de emisión) que aparece en una longitud de onda preestablecida en los espectros. A diferencia de lo que ocurre en el caso de las bandas moleculares, la longitud de onda teórica en la que se espera encontrar cada línea se conoce previamente, con lo cual no sería necesario implementar en este punto un algoritmo que ajuste la región espectral de localización para cada una de ellas.

Sin embargo, como se ha indicado anteriormente, es frecuente que los espectros presenten desfases en longitud de onda debidos, entre otros factores, al efecto Doppler que sí podrán tener influencia en la detección de las líneas de absorción/emisión, provocando que muchas veces estas se encuentren en longitudes de onda anteriores o posteriores a la teórica. A causa de estos desplazamientos que afectan a todo el rango espectral, el proceso de detección de las líneas será, consecuentemente, más complejo que en el caso de las bandas moleculares donde este desfase no tenía efectos reales en la estimación final del valor aproximado de su energía. El algoritmo diseñado a efectos de corregir los posibles despla-

zamientos y así detectar apropiadamente las líneas espectrales consta de los siguientes pasos:

1. Detección preeliminar de los picos: se calcula la derivada primera del flujo energético para todas las longitudes de onda pertenecientes a un intervalo estrecho alrededor de la muestra en la que teóricamente debería encontrarse el pico (habitualmente se consideran dos muestras anteriores y dos posteriores); a continuación se estudian los cambios de signo de dicha derivada (puntos de inflexión), localizándose una línea de absorción en la longitud de onda en la que se transita de un valor negativo a uno positivo, o una línea de emisión en caso contrario. Esto es:

$$D^1(\lambda_t) = F(\lambda_{t+1}) - F(\lambda_t) \mid F(\lambda_t) = \begin{cases} \text{línea absorción} & \text{si } D^1(\lambda_{t-1}) < 0 \ \&\& \ D^1(\lambda_t) > 0 \\ \text{línea emisión} & \text{si } D^1(\lambda_{t-1}) < 0 \ \&\& \ D^1(\lambda_t) < 0, \end{cases}$$

   siendo $D^1(\lambda_t)$ la derivada primera del flujo para la longitud de onda teórica en la que se espera detectar el pico, λ_t, y $F(\lambda_t)$ el valor del flujo energético en dicho punto; el intervalo de estudio para detectar la línea sería entonces $[\lambda_{t-2}, \lambda_{t+2}]$.

2. Validación de los picos detectados: cada uno de los picos descubiertos con el procedimiento anterior se corrobora utilizando el vector de desviaciones típicas del intervalo aproximado en el que teóricamente debe aparecer la línea espectral (± 2 muestras); si en la longitud de onda en la que se ha localizado un pico en el primer paso del algoritmo la desviación típica supera un cierto umbral de corte (que depende de la relación señal a ruido), la línea de absorción o emisión detectada se confirma y se procede a realizar su medida. Siendo ahora λ_p la longitud de onda en la que se ha detectado un pico dentro del intervalo teórico $[\lambda_{t-2}, \lambda_{t+2}]$, entonces se tendría que:

$$\left.\begin{aligned} \sigma(\lambda_p) &= \sqrt{\frac{\sum_{i=p-1}^{p+1} \left(F(\lambda_i) - \overline{F(\lambda_i)}\right)^2}{2}} \\ \overline{F(\lambda_i)} &= \frac{\sum_{j=i-1}^{i+1} F(\lambda_j)}{3} \end{aligned}\right| \ \sigma(\lambda_p) > \mu_{snr} \ \Rightarrow \ \text{línea confirmada},$$

   donde $\sigma(\lambda_p)$ es la desviación típica del flujo en la longitud de onda teórica del pico detectado (λ_p), $\overline{F(\lambda_i)}$ es la media muestral del flujo para la longitud de onda λ_i y μ_{snr} equivale al umbral de corte que indica si el pico detectado es suficientemente significativo, teniendo en cuenta la señal a ruido propia del espectro; en nuestro caso, es-

te umbral se corresponde con el valor de la función de distribución de la desviación típica que supera al 75% de los valores de la desviación típica muestral para todo el espectro.

La verificación de las líneas detectadas mediante el método del cambio de signo de la primera derivada de la función de flujo, se realiza principalmente para evitar los falsos positivos que con frecuencia se presentan en espectros con mucho ruido: puede ocurrir que en un mismo intervalo de pocas muestras ($[\lambda_{t-2}, \lambda_{t+2}]$) se detecten varias fluctuaciones del signo de la derivada causadas por pequeños picos que no son otra cosa que ruido, por ello es necesario verificar que realmente todos los picos detectados son lo suficientemente significativos y obedecen a la absorción o emisión real de elementos químicos en determinadas longitudes de onda del espectro.

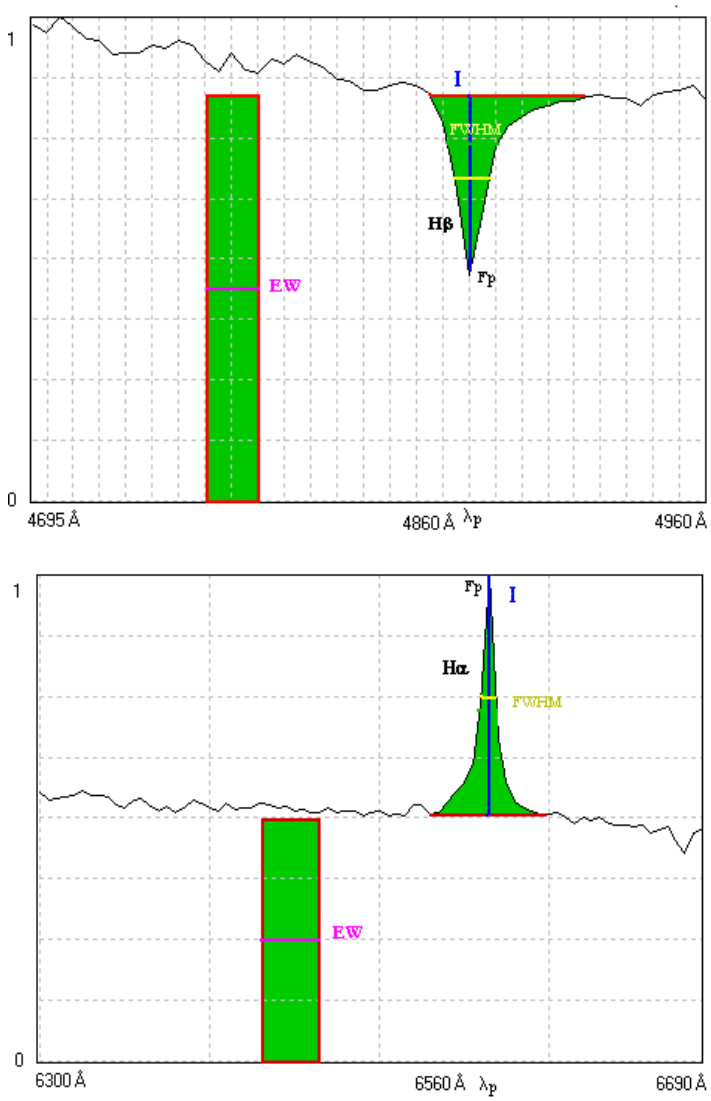


Figura 26. Representación de las tres medidas diferentes consideradas (I, EW y FWHM) para líneas de absorción y emisión en espectros de tipos espectrales A0 y B1, respectivamente

Una vez que se ha determinado inequívocamente la posición real en el espectro de cada línea de absorción/emisión considerada, se procede a realizar la estimación de su valor. En este punto es preciso indicar que se han considerado tres medidas diferentes para las líneas espectrales: la intensidad (I), la anchura equivalente (*Equivalent Width*, EW) y la anchura a media altura (*Full Width at Half Maximum*, FWHM). La intensidad de una línea, expresada en $erg^{-1}\ cm^{-2}\ s^{-1}\ Å^{-1}$, es la medida de su flujo energético en la longitud de onda del pico con respecto al continuo espectral local de la zona en la que se localiza el mismo; la anchura equivalente, medida habitualmente en Å, se corresponde con la base de un rectángulo que tuviese como altura la medida del continuo espectral local y como área la misma del perfil de la línea; la anchura a media altura (también en Å) será la anchura de la línea medida en la mitad de la intensidad del pico. En la figura 26 se muestran estas tres medidas para la línea de absorción H_β (4861 Å) en un espectro de tipo A0 y para la línea H_α (6563 Å) en emisión en un espectro de tipo B1. Con una línea roja se representa la estimación del continuo local para la zona espectral considerada; en azul se muestra la medida de la intensidad (I) de cada línea respecto a su continuo local, en amarillo la anchura de las líneas a media altura (FWHM) y finalmente en magenta se representa la anchura equivalente (EW), que correspondería a la base del rectángulo cuya altura fuese la medida del continuo local de cada línea y cuya área la del pico correspondiente, que se muestra en verde en la figura.

Tal y como se ha puesto de manifiesto, para tratar morfológicamente las líneas de absorción/emisión y obtener las diferentes medidas consideradas, es necesario realizar una estimación del continuo espectral local para cada una de ellas. En una primera aproximación, se consideró apropiado calcular el valor del continuo espectral tratando de determinar los extremos de cada línea y fijar así un intervalo de longitudes de onda para cada una de ellas, de la misma forma que se delimitan las bandas moleculares. Sin embargo, en este caso es necesario realizar un ajuste particular para cada espectro específico, ya que la anchura de las líneas varía significativamente de unos espectros a otros (sobre todo si son de niveles de luminosidad diferentes). Es decir, no es posible establecer a priori un intervalo de delimitación teórico y general para cada línea (tal y como se realizaba para las bandas), sino que será preciso hallar sus longitudes de onda limítrofes para cada espectro particular. Por lo tanto, en el módulo de análisis morfológico se implementó un algoritmo basado en la interpolación lineal del flujo entre los extremos de cada línea, empleando de nuevo el estudio de los cambios de signo de la derivada primera de la función de flujo y el vector de desviaciones típicas para tratar de detectar los límites de cada una de ellas.

Este primer método no produjo unos resultados totalmente satisfactorios, ya que si bien para una gran cantidad de espectros el ajuste era apropiado, para un subconjunto amplio de los pertenecientes a los diferentes catálogos seleccionados no fue posible delimitar convenientemente todas las líneas espectrales consideradas; en espectros con una relación

señal a ruido alta se suelen producir fluctuaciones constantes del flujo energético que, aun implicando cambios en el signo de la primera derivada del mismo, no son lo suficientemente significativas como para señalar la longitud de onda inicial o final de una línea de absorción/emisión. También resultaría impracticable la detección mediante este método cuando las líneas espectrales aparezcan superpuestas. En la figura 27 se muestra un ejemplo del ajuste del continuo mediante este método tanto en una línea para la cual el procedimiento resulta apropiado (línea Ca I en 4227 Å), como para aquellos casos en los que la superposición (líneas Si IV en 4089 Å y H_δ en 4102 Å) o el ruido (línea Ca II K en 3934 Å) impiden la correcta estimación del continuo. En azul se muestra el continuo local real (ajustado manualmente por los expertos) y la longitud de onda inicial y final para cada línea, mientras que en rojo se muestran estos mismos valores estimados mediante este primer método de ajuste; en magenta se representa el área de cada línea que se desperdicia en aquellos casos en los que el método no resulta del todo apropiado.

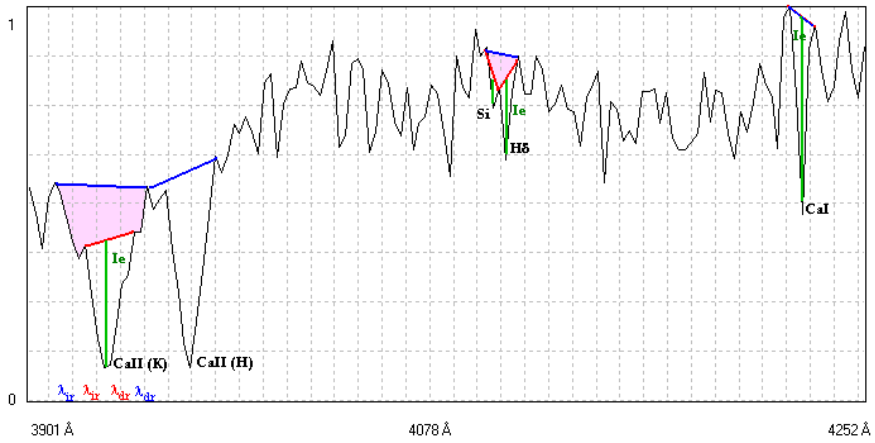


Figura 27. Ajuste del continuo local para tres líneas de absorción de un espectro de tipo G8 utilizando el método basado en el signo de la derivada primera

En vista de las limitaciones de este primer procedimiento, se decidió estimar el continuo espectral suavizando la señal mediante un filtro paso bajo, excluyendo los picos o desviaciones debidas al ruido en un intervalo predefinido alrededor de la longitud de onda en la que se espera encontrar el pico de absorción o emisión, λ_p. Para implementar dicho filtro se optó por el método de media móvil central de 5 puntos (*central moving average*) [Droke 2001], que selecciona los 5 flujos más estables dentro del intervalo considerado alrededor de la muestra en la que se ha detectado una línea. Esto es:

$$C_p = \frac{\sum_{i=p-m}^{p+m} X_i \cdot F(\lambda_i)}{N} \quad \Big| \quad X_i = \begin{cases} 1 & \text{si } \sigma(\lambda_i) < \sigma_n \\ 0 & \text{si } \sigma(\lambda_i) > \sigma_n \end{cases},$$

donde C_p es la estimación del continuo para la muestra en la que se ha detectado el pico, (λ_p); $F(\lambda_i)$ es el flujo en la muestra i; m es el número de muestras a cada lado del pico que se utilizarán para computar el continuo local (en este caso el intervalo sería $[\lambda_{p-m}, \lambda_{p+m}]$, con un valor para m de 20, es decir, se considerarían 20 muestras a cada lado del pico susceptibles de ser incluidas en el cómputo del continuo); N el número real de muestras que extrae el filtro para realizar el cálculo (en nuestro caso específico serán 5, por ser *moving average* de 5 puntos); y X es un vector binario que indica los flujos representativos del continuo local de la zona espectral tratada: si $F(\lambda_i)$ es un valor de flujo representativo del continuo local, entonces X_i será 1; en cambio si $F(\lambda_i)$ es un pico, el valor de X_i será 0. Para determinar si un valor de flujo es lo suficientemente estable como para ser incluido en el cálculo del continuo local, se compara su desviación típica, $\sigma(\lambda_i)$, con un umbral preestablecido que se correspondería con la enésima desviación típica menor del intervalo considerado (en nuestro caso será la quinta, pues se ha elegido el método *moving average* de 5 puntos).

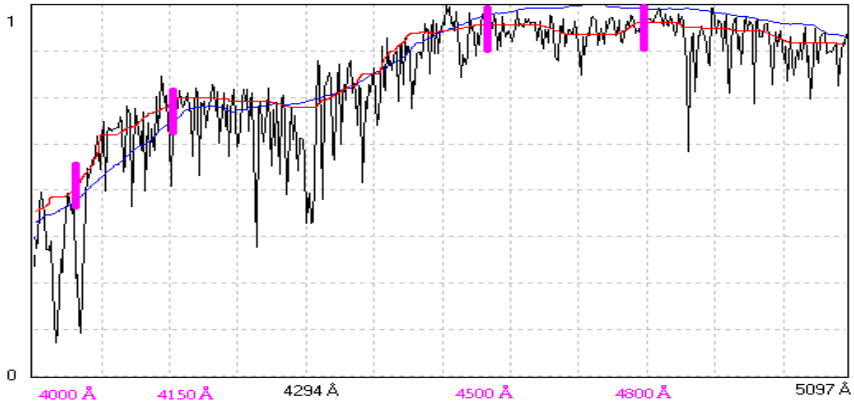


Figura 28. Ajuste del continuo local para un espectro de tipo G8 utilizando el método *moving average* de 5 puntos

Con este segundo método de estimación se consiguió mejorar considerablemente los resultados obtenidos con el anterior, sin embargo en algunos casos se continuaba sin obtener un ajuste del todo apropiado del continuo local en la zona de detección de algunas líneas específicas. La figura 28 muestra en color azul la estimación del continuo realizada siguiendo este método para un espectro de tipo G8; en rojo se muestra el continuo indicado por los expertos para cada caso. Como puede apreciarse, la estimación es en general bastante correcta, pero en algunas zonas (como por ejemplo las marcadas en magenta en la figura) se producen desviaciones considerables con respecto a la estimación realizada manualmente por los expertos; en algunas regiones del espectro en las que aparece mucho ruido o una gran profusión de líneas espectrales, la señal no se suaviza adecuadamente, pues se incluyen más picos de los deseados en el cómputo del continuo local, resultando este en valores más elevados que los reales estimados por los expertos.

Con el objetivo de tratar de sortear los inconvenientes de las técnicas anteriores, en la implementación final de la estimación del continuo local se optó por un tercer método que se basa en la combinación de los procedimientos parciales que demostraron su eficacia en los dos métodos precedentes. Así se definieron dos intervalos situados a izquierda y derecha de la longitud de onda central en la que se había detectado cada pico (λ_p), cuya anchura será predeterminada (20 muestras para cada lado) excepto en aquellos casos en los que se consideró que, debido a las particularidades de la línea espectral, era necesario calibrar específicamente la amplitud de cada intervalo (por ejemplo en líneas muy próximas entre sí o que se encuentren en una región espectral rica en bandas moleculares). Al igual que en el segundo método, en estos intervalos seleccionados se suaviza la señal filtrando los picos mediante el citado método de media móvil central de 5 puntos [Droke 2001], es decir, se excluyen del cómputo parcial del continuo de cada intervalo las muestras con mayor desviación típica y se seleccionan únicamente las 5 muestras con el flujo más estable y representativo. Matemáticamente estas operaciones pueden expresarse como sigue:

$$\left.\begin{aligned} C_{izq} &= \frac{\sum_{j=li}^{ld} X_j \cdot F(\lambda_j)}{N} \\ C_{der} &= \frac{\sum_{j=ri}^{rd} X_j \cdot F(\lambda_j)}{N} \end{aligned}\right| \quad X_j = \begin{cases} 1 & \text{si } \sigma(\lambda_j) < \sigma_n \\ 0 & \text{si } \sigma(\lambda_j) > \sigma_n \end{cases},$$

donde C_{izq} y C_{der} se corresponden con las estimaciones parciales del continuo en el intervalo seleccionado a la izquierda ($[\lambda_{ri}, \lambda_{rd}]$) y a la derecha ($[\lambda_{ri}, \lambda_{rd}]$) de la muestra en la que se ha detectado el pico (λ_p); $F(\lambda_j)$ será el flujo en la muestra j; N el número real de muestras que se utilizarán en el cómputo de los continuos parciales a derecha e izquierda (en nuestro caso se incluirán 5 muestras para cada uno de los dos intervalos, debido a la implementación del filtro paso bajo mediante la técnica *moving average* de 5 puntos); y X se corresponde con un vector binario que indica los flujos representativos del continuo local de la zona espectral tratada. Tal y como se realizaba en el segundo método expuesto, para determinar los valores de flujo energético que son lo suficientemente relevantes como para ser incluidos en el cálculo de los continuos parciales, para cada intervalo se ordenan las muestras de menor a mayor valor de la desviación típica de su flujo, $\sigma(\lambda_j)$, eligiéndose solamente las primeras N muestras (5 en este caso), ya que serán aquellas con menor desviación y por tanto las de flujo más estable. Una vez que se ha calculado mediante el procedimiento descrito el continuo a derecha e izquierda de la línea, se interpolan linealmente ambos valores (a semejanza del primer método implementado) para obtener una estimación final en la longitud de onda del pico, $C_{real}(\lambda_p)$, tal que:

$$C_{real}(\lambda_p) = C_{izq} + (\lambda_p - \lambda_{izq}) \cdot \left(\frac{C_{der} - C_{izq}}{\lambda_{der} - \lambda_{izq}} \right)$$

La figura 29 ilustra gráficamente el procedimiento seguido para estimar el continuo local de la línea Hγ (en 4340 Å) en un espectro de tipo A4 utilizando este tercer método descrito. En color magenta se representa el intervalo izquierdo con sus longitudes de onda limítrofes y su continuo parcial estimado, mientras que en azul se muestran los valores correspondientes al intervalo derecho; los puntos rojos son las muestras eliminadas en cada intervalo debido a su elevada desviación y, finalmente, en verde se muestra el continuo real que se obtiene de la interpolación lineal de ambos valores parciales. En la figura 30 se muestra en color azul la estimación del continuo realizada siguiendo este método final para el espectro de tipo G8 incluido en la figura 28, representándose en trazo rojo el continuo calculado por los expertos para todo el espectro; tal y como puede apreciarse, la estimación basada en este tercer método resulta bastante más adecuada y similar a la de los expertos que la que se obtuvo con el segundo método (figura 28), sobre todo en aquellas zonas (en magenta en la figura) en las que el segundo método no resolvía apropiadamente

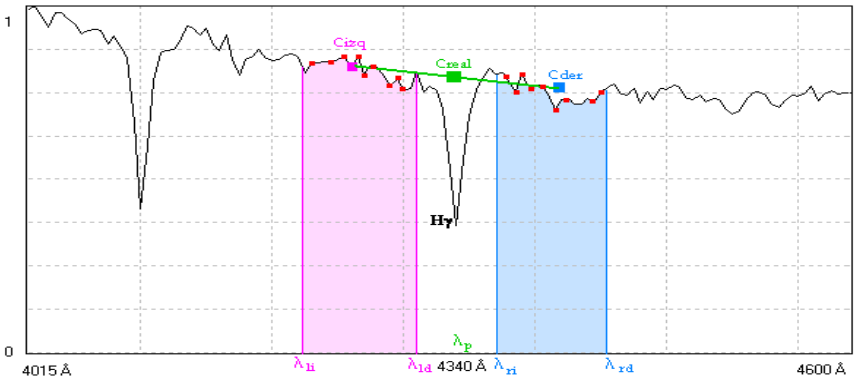


Figura 29. Procedimiento para estimar el continuo local basado en intervalos para un espectro de tipo A4

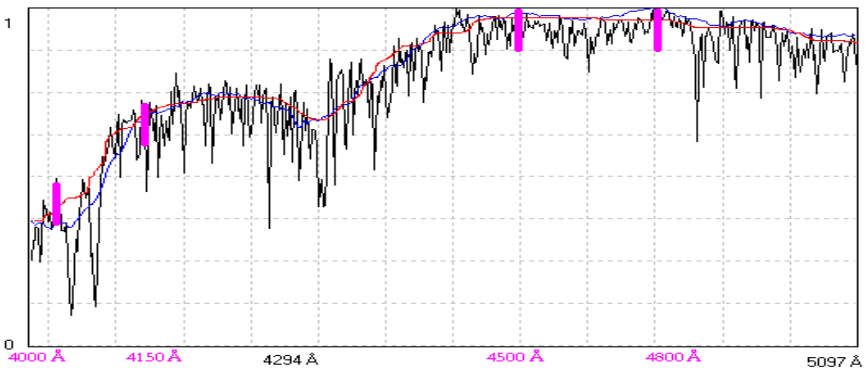


Figura 30. Ajuste del continuo local para un espectro de tipo G8 utilizando el método final propuesto

En el sistema final de clasificación y parametrización de espectros estelares se ha incluido en forma de algoritmo el tercer método descrito para obtener el continuo local de todas las líneas espectrales consideradas en cada caso particular estudiado. Como se ha mencionado al principio de esta sección, la estimación de este continuo es imprescindible para determinar el valor de las tres medidas contempladas en el caso de las líneas de absorción y emisión, es decir, la intensidad, la anchura equivalente y la anchura a media altura. Así, una vez estimado el continuo local, el valor de estos parámetros se obtendrá como sigue:

- La intensidad, I, de una línea de absorción o emisión se obtiene calculando la desviación (diferencia) de su flujo energético con respecto al continuo local estimado para la zona espectral circundante a dicha línea; su valor se expresa en unidades de flujo ($erg^{-1}\,cm^{-2}\,s^{-1}\,Å^{-1}$) y será positivo para las líneas de absorción y negativo para las de emisión. Siendo de nuevo λ_p la longitud de onda de la muestra en la que se ha detectado el pico, se tiene que:

$$I(\lambda_p) = C_{real}(\lambda_p) - F(\lambda_p) \tag{E2}$$

- La anchura equivalente, EW, de una línea espectral se corresponde con la base del rectángulo cuya altura sería la medida de su continuo espectral local y su área la misma que la de dicha línea; este parámetro se mide en unidades de longitud de onda (Å), siendo de nuevo su valor positivo para las líneas de absorción y negativo para las de emisión. Si se considera, a efectos de delimitar aproximadamente cada línea, un intervalo de n muestras alrededor de la longitud de onda de la misma (λ_p), la anchura equivalente se expresaría entonces como:

$$EW(\lambda_p) = \frac{\int_{i=p-n}^{p+n} C_{real}(\lambda_p) - F(\lambda_p)\,d\lambda}{C_{real}(\lambda_p)} = \frac{\int_{i=p-n}^{p+n} I(\lambda_p)\,d\lambda}{C_{real}(\lambda_p)} \tag{E3}$$

- La anchura a media altura, FWHM, de una línea de absorción o emisión equivale a la anchura de su perfil tomada en la mitad de su intensidad; al igual que en el parámetro anterior, su valor se expresa en unidades de longitud de onda (Å), pero en este caso será siempre positivo. Matemáticamente podría expresarse como:

$$FWHM(\lambda_p) = \lambda_d - \lambda_i \left| \begin{array}{l} F(\lambda_i) = F(\lambda_d) = \dfrac{I(\lambda_p)}{2} \\ \lambda_d > \lambda_i \end{array} \right. \tag{E4}$$

En el módulo de análisis morfológico se extraen por medio de los algoritmos referidos una gran cantidad de características relevantes del espectro, pero solamente un subconjunto de ellas se verán involucradas en la obtención de los índices espectrales que se utilizarán posteriormente para llevar a cabo la clasificación o parametrización estelares; estos serán prácticamente los mismos que detectan y estiman visualmente los expertos cuando tratan de determinar la clasificación MK de una estrella. Sin embargo, durante el desarrollo del sistema se consideró conveniente realizar todos los análisis posibles, incluyendo otros parámetros distintos a los habituales (como por ejemplo la energía espectral o la adición de la energía de determinadas bandas moleculares) con el fin de encontrar algún criterio de clasificación poco frecuente o difícil de detectar visualmente por los expertos. El análisis de la sensibilidad de cada parámetro detectado y medido en este análisis exhaustivo de los espectros, es decir, su capacidad real de discriminación entre tipos espectrales y niveles de luminosidad, se describe detalladamente en los capítulos que siguen, correspondientes a los dos enfoques de la clasificación automática. En la tabla 2 se muestran algunos de los índices espectrales más comunes que se detectan y miden a través de los algoritmos implementados en este módulo. En los capítulos siguientes se relacionarán los diferentes parámetros considerados en cada caso específico de clasificación o parametrización espectral.

Índice	**Descripción**
Línea Ca II (K)	I (3933 Å)
Línea Ca II (H)	I (3968 Å)
Línea He I	EW (4026 Å)
Línea H I $_{\delta}$	I (4102 Å)
Línea H I $_{\gamma}$	EW (4340 Å)
Línea Fe I	EW (4405 Å)
Línea H I $_{\beta}$	I (4861 Å)
Línea H I $_{\alpha}$	I (6563 Å)
G band	EW (4300 Å)
Bandas TiO	6250 ±150 Å
Banda TiO	5160 ±150 Å
Ratio CH-H I $_{\gamma}$	G band/H I $_{\gamma}$
Ratio H I $_{\delta}$-HeI	H I $_{\delta}$ /He I

Tabla 2. Relación de algunos índices espectrales utilizados en la clasificación MK

La salida del módulo de análisis morfológico estará constituida por el conjunto de los valores resultantes de medir las diferentes características espectrales requeridas en cada supuesto concreto (intensidad, anchura equivalente y anchura a media altura de líneas de absorción y/o emisión, energía de bandas moleculares, diferentes ratios entre intensidades de líneas, energía espectral, etcétera). Asimismo se proporcionarán todas las características morfológicas y estadísticas típicas del espectro (máximos, mínimos, derivadas, puntos de inflexión, continuo espectral, vector de medias y desviaciones típicas, etcétera). Los resultados de todos los análisis realizados sobre los espectros se mostrarán al usuario final del sistema a través de la interfaz de visualización implementada en el módulo de análisis, cuyas características se recogen en el capítulo 7.

Una vez que los espectros estelares han sido adaptados al formato estándar del sistema, rectificados mediante las operaciones de preprocesado y finalmente extraídas todas sus características relevantes mediante el análisis matemático, estadístico y morfológico de los mismos, se estará en condiciones de iniciar el proceso de clasificación y/o parametrización automática, cuyos detalles se recogen profusamente en los capítulos que se exponen a continuación

4 CLASIFICACIÓN ESPECTRAL AUTOMÁTICA: ENFOQUE HÍBRIDO I

It's difficult to be rigorous about whether a machine really "knows", "thinks", etc., because we're hard put to define these things. We understand human mental processes only slightly better than a fish understands swimming

John McCarthy
The Little Thoughts of Thinking Machines

El propósito último de la presente tesis doctoral es, como ya se ha indicado, formalizar un sistema de información para la automatización del análisis, clasificación y parametrización de espectros estelares; tal sistema tenderá a reproducir, mediante la inclusión de una combinación exitosa de técnicas de Inteligencia Artificial, los métodos que han utilizado los expertos en este campo durante décadas, los cuales se basan principalmente en la observación directa de las características más relevantes de los espectros.

En el capítulo anterior se han descrito las técnicas y algoritmos implementados para acometer la fase de adaptación y estudio morfológico de los espectros, que trata de emular la inspección visual preliminar a la que son sometidos en la técnica manual tradicional. En este capítulo se expondrá el módulo del sistema dedicado a las tareas de clasificación estelar automática en el esquema MK, basando tal automatización fundamentalmente en un conjunto de índices espectrales cuyo valor se estima previamente en el módulo de análisis a través del estudio matemático y la caracterización morfológica de los espectros.

Las técnicas tradicionales de tratamiento de datos astronómicos, que han servido provechosamente a la comunidad astrofísica durante años, son cuanto menos difíciles de aplicar en el momento actual, caracterizado por la disponibilidad de grandes archivos digitales de datos cuyo volumen aumentará previsiblemente de forma considerable en años venideros, pues están en curso varios grandes proyectos que aúnan los esfuerzos de investigadores de todo el mundo (por ejemplo la misión espacial GAIA [GAIA 2010]), en los que se contempla la recopilación de datos a gran escala, su organización y su explotación automática, que con frecuencia incluye la clasificación y parametrización física de espectros estela-

res. Actualmente, por lo tanto, la clasificación u obtención de parámetros estelares mediante el estudio visual de los espectro

s individuales resultaría en la mayoría de los casos poco operativa, cuando no inviable, ya que supondría sin duda alguna un gasto de tiempo, recursos y esfuerzo ingente. Es por consiguiente este un momento propicio para que las técnicas de clasificación espectral evolucionen hacia esquemas automáticos no subjetivos que obtengan de forma sistemática, rápida y eficiente la clasificación de las estrellas, garantizando tanto la posibilidad de repetición exacta del proceso completo como la uniformidad en los resultados.

Las técnicas computacionales englobadas dentro del área de Inteligencia Artificial permiten dotar a los sistemas informáticos de rasgos propios de la inteligencia humana, como son la capacidad de aprendizaje o la utilización simultánea de conocimiento heurístico de varios campos, lo cual los capacita para abordar la resolución de problemas que de otro modo serían más complicados de solventar o incluso irresolubles. Como ya se indicó en el epígrafe dedicado a la revisión histórica (véanse secciones 1.2 y 2.4), desde finales del siglo pasado algunas de estas técnicas se han venido aplicando a diferentes problemas en el campo de la Astrofísica (identificación de galaxias, análisis de luz, etc.) y especialmente en aquellas áreas que nos ocupan: la parametrización física y la clasificación MK de espectros estelares; no será nuestro objetivo desarrollar un sistema basado en modelos que ya han probado su adecuación (la investigación en este campo se ha centrado casi exclusivamente en redes de neuronas artificiales del tipo MLP), sino formalizar un sistema híbrido orientado a la clasificación y parametrización física automáticas de espectros estelares que se fundamente en la cooperación activa de diferentes técnicas de Inteligencia Artificial vertebradas a través de una base de datos relacional, especializada y disponible para la comunidad científica a través de la Red; su propósito sería asistir tanto a investigadores que, con el fin de cotejar sus propios resultados, pretendan obtener una clasificación alternativa de grandes bases de datos espectrales, como a aquellos astrónomos involucrados en estudios más específicos que tengan la necesidad de obtener parámetros físicos o clasificaciones MK de sus estrellas singulares.

La propia naturaleza del proceso de clasificación de las estrellas dentro del sistema MK, que consiste esencialmente en encuadrar a cada espectro estelar dentro de un grupo definido por una serie de estándares, sugiere la elección preliminar de los sistemas basados en el conocimiento o sistemas expertos entre las diversas técnicas de Inteligencia Artificial existentes; estos podrían constituirse en una herramienta idónea para ayudar a determinar las clases espectrales, pues su asignación se basa en la aplicación de una serie de criterios o reglas de conocimiento individuales y propias de cada astrónomo, producto de su experiencia previa en tareas de clasificación. Considerando por tanto este matiz, una parte importante del desarrollo estará dirigida a la implementación de tales sistemas expertos específi-

cos. Sin embargo, con el objetivo de reproducir lo más fielmente posible dentro del sistema automático propuesto el tipo de razonamiento en el que se basan las técnicas tradicionales, en este capítulo se realizará un análisis diferencial de una selección de métodos computacionales que a priori parecen adecuados para abordar diferentes aspectos del análisis espectral, considerando tanto técnicas clásicas (algoritmos de agrupamiento, análisis de componentes principales, etc.) como de Inteligencia Artificial (los ya mencionados sistemas expertos, lógica difusa, redes de neuronas artificiales, redes funcionales).

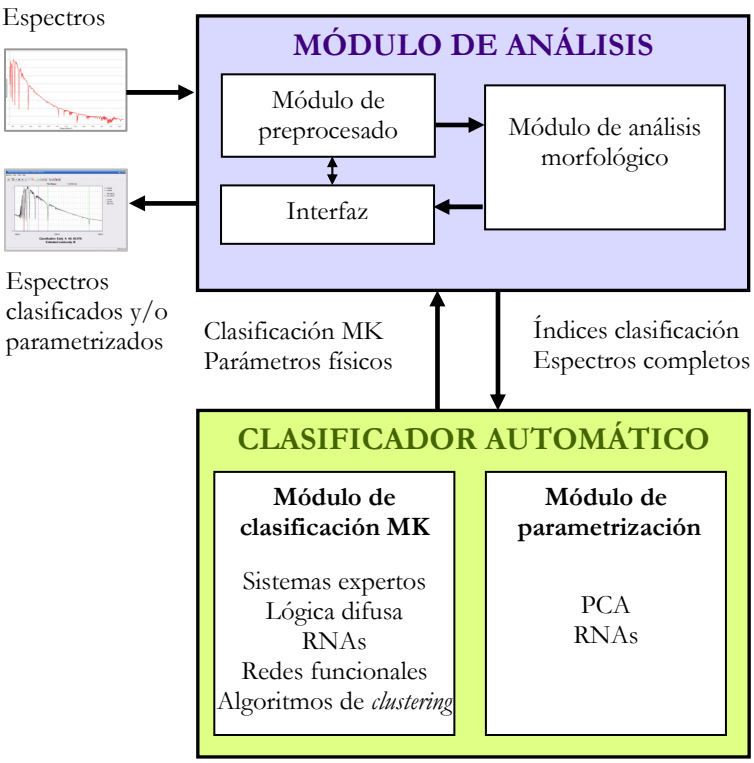


Figura 31. Técnicas y funcionalidades incluidas en el módulo de clasificación/parametrización automática

Partiendo de una selección de espectros ópticos procedentes de catálogos consolidados y clasificados homogéneamente en el sistema MK, en el presente capítulo se describirá la implementación de las diferentes técnicas mencionadas analizando detenidamente los resultados individuales obtenidos con cada una de ellas, de forma que finalmente estemos en condiciones de incluir las más idóneas en un sistema híbrido que integre el análisis morfológico descrito en el capítulo anterior con la combinación de las técnicas que hayan resultado más eficientes para resolver los diferentes problemas específicos de la clasificación MK. Es esperable que tal sistema, basado en la integración y cooperación de varias técnicas, sea más adaptable y eficiente que aquellos basados en una única técnica: este debe-

ría ser capaz de determinar y seleccionar el mejor método de clasificación para cada espectro, adaptándose a la naturaleza misma de la clasificación tal y como se lleva a cabo en su vertiente manual, puesto que los astrónomos estudian y tratan individualmente cada espectro con sus peculiaridades y aplican su conocimiento y criterios de forma selectiva.

En el capítulo 5 se presentará la solución adoptada finalmente para desarrollar el módulo de clasificación del sistema informático de tratamiento de espectros estelares. En él se ha hecho una evolución basada por una parte en la creación de nuestro propio catálogo de estrellas estándares y, por otra, en la revisión de las técnicas computacionales que han logrado un rendimiento óptimo en este primer planteamiento que se recoge a continuación.

4.1 Catálogos públicos de espectros estelares

En nuestro grupo de investigación, la primera oportunidad de aplicar técnicas de Inteligencia Artificial al análisis de espectros estelares se presentó cuando, en el curso de un estudio sobre las últimas fases de la evolución estelar, surgió la necesidad de determinar el tipo espectral MK de un conjunto amplio de fuentes observadas, posibles candidatas a ser catalogadas como estrellas en la fase post-AGB, i. e. estrellas de masa intermedia muy evolucionadas que han dejado atrás la secuencia principal y que llevan el camino de convertirse en nebulosas planetarias [Salaris 2006]; para abordar este problema inicial se optó por diseñar un sistema experto específico de clasificación de estrellas supergigantes (luminosidad I en el sistema MK), que si bien pertenecen a etapas evolutivas bien diferenciadas, sus características espectrales y estructurales son semejantes a las de las estrellas post-AGB [Suárez 2001]. En esta primera experimentación se eligieron como plantillas para la clasificación los espectros de clase de luminosidad I procedentes del catálogo guía que se estaba utilizando hasta el momento en la clasificación manual por el método tradicional [Silva 1992].

La experiencia de este desarrollo inicial nos permitió percatarnos de que para afrontar el problema global de la clasificación MK de las estrellas es necesario disponer de un catálogo de espectros que proporcione una buena resolución para todos los tipos espectrales considerados y tantas clases de luminosidad como sea posible. Por lo tanto, con el fin de diseñar y desarrollar herramientas automáticas que optimicen el costoso proceso de clasificación manual, hemos confeccionado una base de datos compuesta por una amplia muestra de espectros ópticos procedentes en su totalidad de catálogos públicos disponibles *online*: la librería de espectros ópticos de D. Silva y M. Cornell, extendida ahora a todas las clases de luminosidad [Silva 1992], el catálogo de observaciones de G. Jacoby, D. Hunter y C. Christian [Jacoby 1984] y la librería digital de espectros recopilados por A. Pickles [Pickles 1998].

Los espectros de los catálogos de Silva y Pickles no corresponden a estrellas reales, sino que se obtuvieron promediando los flujos de diferentes estrellas pertenecientes al mismo tipo espectral, con el fin de suavizar las diferencias y establecer un modelo para cada tipo; en cambio, el catálogo de Jacoby agrupa espectros reales, de hecho algunos de ellos se han utilizado como fuente para elaborar los dos catálogos anteriores.

El primero de los tres catálogos se seleccionó principalmente porque es el que han utilizado más habitualmente los expertos de nuestro grupo de investigación como catálogo guía en el proceso de clasificación manual mediante superposición [Silva 1992]. Con la finalidad de llevar a cabo síntesis empírica de poblaciones estelares, en 1992 D. Silva y M. Cornell confeccionaron una nueva biblioteca digital de espectros ópticos, tratando de solventar las carencias de recopilaciones anteriores. Para ello combinaron tanto datos publicados

previamente como espectros adquiridos por ellos mismos en campañas de observación durante los años 1988 y 1989. El espectro compuesto de cada tipo se formó escalando multiplicativamente el subconjunto de espectros individuales recopilados y promediando su flujo; de esta forma se obtuvieron 72 subtipos espectrales distintos (abarcando desde el O hasta el M), contemplándose asimismo las cinco clases de luminosidad del sistema MK. La mayoría de los espectros resultantes son de metalicidad solar, si bien se incluyen algunos ricos en metales y otros de débil metalización. Estos espectros promediados presentan longitudes de onda entre 3510 Å y 8930 Å, están escalados a flujo 100 en 5450 Å, ofrecen una resolución espectral de 11 Å FWHM (*Full Width at Half Maximum*) y una dispersión de 5 Å.

En aquellos tipos espectrales en los que no aparecen suficientes muestras en el catálogo de Silva como para abstraer las peculiaridades que identifican a las estrellas de ese tipo, los expertos suelen consultar un segundo catálogo de apoyo, en nuestro caso el de Pickles de 1998. Este catálogo secundario está compuesto por espectros que se obtuvieron incorporando datos de diferentes fuentes, agrupándolos por tipo espectral, luminosidad, metalicidad, fuerza de las líneas de absorción, etc. y eligiendo posteriormente los supuestamente mejores espectros en cada intervalo de longitud de onda, muestreándolos de nuevo a la resolución escogida y combinándolos en la librería digital final; cada una de las fuentes seleccionadas para cada espectro se inspeccionó detenidamente, cotejándose entre sí, con el fin de comprobar que cada componente de cada espectro tenía asignado un tipo espectral y una clase de luminosidad similares. De esta forma se creó un catálogo de 131 espectros calibrados en flujo que abarca todos los tipos espectrales y niveles de luminosidad MK con abundancia solar, incluyendo asimismo algunas estrellas enanas de tipos intermedios (F-K) y gigantes de tipos tardíos (G-M), tanto pobres como ricas en metales. El catálogo presenta una cobertura espectral completa en longitud de onda (de 1150 Å a 10620 Å) para todos sus componentes, extendiéndose hasta 25000 Å para aproximadamente la mitad de ellos, principalmente en tipos espectrales tardíos con metalicidad solar; los espectros finales están normalizados a flujo 1 en 5556 Å, presentan una frecuencia de muestreo de 5 Å y una resolución de aproximadamente 10 Å [Pickles 1998].

El tercer y último conjunto de espectros utilizados para confeccionar nuestro propio catálogo de espectros útiles se corresponde con los de la librería digital de espectros reales obtenidos en diversas campañas de observación durante los años 1980 y 1981 en el Observatorio *Kitt Peak* por G. Jacoby, D. Hunter y C. Christian. Estos espectros se agregaron con el objetivo de completar, en la medida de lo posible, aquellos subtipos espectrales y niveles de luminosidad en los que aparecía una mayor carencia de datos en los dos catálogos anteriores (fundamentalmente los tipos espectrales O y A, y las clases II y IV) y conformar así una muestra lo suficientemente representativa de las principales peculiaridades que pueden presentar los espectros ópticos de las estrellas. El catálogo de Jacoby está for-

mado por 161 estrellas cuyos espectros cubren un rango de longitudes de onda de 3510 Å a 7427 Å, con una resolución de aproximadamente 4.5 Å y 1.4 Å de dispersión o incremento de lambda (longitud de onda) por píxel; además abarca todos los tipos espectrales y clases de luminosidad del sistema MK, siendo la mayor parte de las estrellas de metalicidad solar [Jacoby 1984].

Durante las fases de desarrollo del sistema automático de clasificación MK, se puso de manifiesto la necesidad de añadir a los anteriores un conjunto más amplio de espectros con el fin de posibilitar la convergencia y generalización óptima de las redes de neuronas artificiales, ya que constituyen estas una técnica cuyo rendimiento se ve influenciado notoriamente por la composición del conjunto de patrones con los que se entrenan. El catálogo adicional seleccionado para este fin consiste en una base de datos de 908 espectros obtenidos con el espectrógrafo ELODIE en el observatorio francés de Haute-Provence; sus espectros están normalizados a 1 en 5550 Å y abarcan el rango de 4100 Å a 6800 Å con una dispersión de 0.05 Å y una resolución de 0.13 Å FWHM, presentando además una gran cobertura de subtipos espectrales y luminosidades en el sistema MK, para metalicidades ([Fe/H]) de -3.0 a 0.8 [Prugniel 2001].

La información completa sobre los espectros que componen los diferentes catálogos seleccionados, así como la distribución en tipos espectrales y clases de luminosidad de cada uno de ellos se recoge en forma de tablas en el anexo II.

Previamente a la aplicación de esta base de datos final al diseño de sistemas automáticos de clasificación, los expertos espectroscopistas que colaboran en este desarrollo han estudiado visualmente, analizado morfológicamente y contrastado los valores de los parámetros de los espectros estelares procedentes de los cuatro catálogos citados, utilizando para ello la información disponible en bases de datos públicas [SIMBAD 2010]; d se eliminaron aquellos espectros que no satisficiesen ciertos criterios: los de nivel muy alto o muy bajo de metalicidad (como algunos del catálogo de Silva con valores de [Fe/H] inferiores a -1), los que presentan huecos importantes en regiones espectrales con abundancia de índices de clasificación (por ejemplo algunos de tipos tempranos del catálogo de Pickles), los que incluyen mucho ruido, aquellos en los que divergen mucho las clasificaciones MK de unas fuentes a otras (como ocurre en varios espectros del catálogo de Jacoby) y los subtipos espectrales y/o niveles de luminosidad de los que existen muy pocos representantes (p. ej. el tipo O). Posteriormente se efectuó un análisis exhaustivo de los espectros restantes mediante técnicas estadísticas de *clustering*, descartando asimismo aquellos que no consiguieron integrarse dentro de uno de los grupos obtenidos con alguno de los diferentes algoritmos implementados (*K-means*, ISODATA, etcétera). Como resultado de este proceso de selección, se obtuvo finalmente un catálogo principal con 258 espectros procedentes de los catálogos de Silva (27), Pickles (97) y Jacoby (134), y un catálogo adicional con 500 es-

pectros extraídos del catálogo de Prugniel (del cual se eliminaron fundamentalmente aquellos en los que no se proporcionaba una clasificación MK completa); todos estos espectros se escalaron, normalizaron, interpolaron y corrigieron debidamente (aplicando las operaciones detalladas en el capítulo anterior), para disponer de una base de datos espectral homogénea que sería a priori lo suficientemente representativa, pues ofrece una transición continua de las características espectrales entre cada tipo espectral y sus tipos adyacentes, presentando asimismo objetos pertenecientes a las cinco clases de luminosidad principales del sistema MK.

La composición de esta base de datos final se muestra en la tabla 3, con los espectros procedentes de los tres primeros catálogos en negro y los pertenecientes al catálogo adicional resaltados en trazo azul. En la figura 32 se recoge la distribución final de tipos espectrales y niveles de luminosidad. En ambas puede observarse que el catálogo principal (Silva, Pickles, Jacoby) es bastante homogéneo en relación al número de espectros de cada tipo, sin embargo presenta algunas carencias en cuanto a clases de luminosidad (II y IV); en el catálogo final secundario (Prugniel), la mayor parte de los espectros pertenecen a tipos espectrales intermedios (F-K) y a la clase de luminosidad V. Las características concretas de todos los espectros que forman nuestro archivo digital pueden consultarse en el anexo II. Asimismo, los catálogos originales completos de los que se extrajeron los espectros están disponibles para su descarga a través de Internet (Silva [VIZIER 2010], Pickles [IFA 2010], Jacoby [ADC 2010], Prugniel [ELODIE 2010]).

	B	**A**	**F**	**G**	**K**	**M**	**TOTAL**
I	16	10	12/2	9/4	8/4	4	59/10
II	4	---	3/1	3/6	1/7	5	16/14
III	14/9	8	9/6	14/37	15/35	18/2	78/89
IV	3	1	5/43	9/30	3/5	---	21/78
V	13/11	18/12	19/170	14/84	10/27	10/5	84/309
TOTAL	50/20	37/12	48/222	49/161	37/78	37/7	258/500

Tabla 3. Distribución de tipos espectrales y luminosidades en el archivo digital de espectros para el desarrollo del sistema híbrido I

Mediante el análisis de los espectros que constituyen nuestra base de datos de trabajo, se dedujeron para cada tipo espectral los valores característicos de algunos parámetros, tales como líneas espectrales de absorción o bandas moleculares, que serán con los que se comparen los espectros que se suministren al sistema para su clasificación; en este sentido, servirán tanto para delimitar las reglas de los sistemas expertos como para entrenar y validar las redes de neuronales que se diseñarán. Los índices espectrales específicos que se consideran en cada caso se detallan en la sección siguiente.

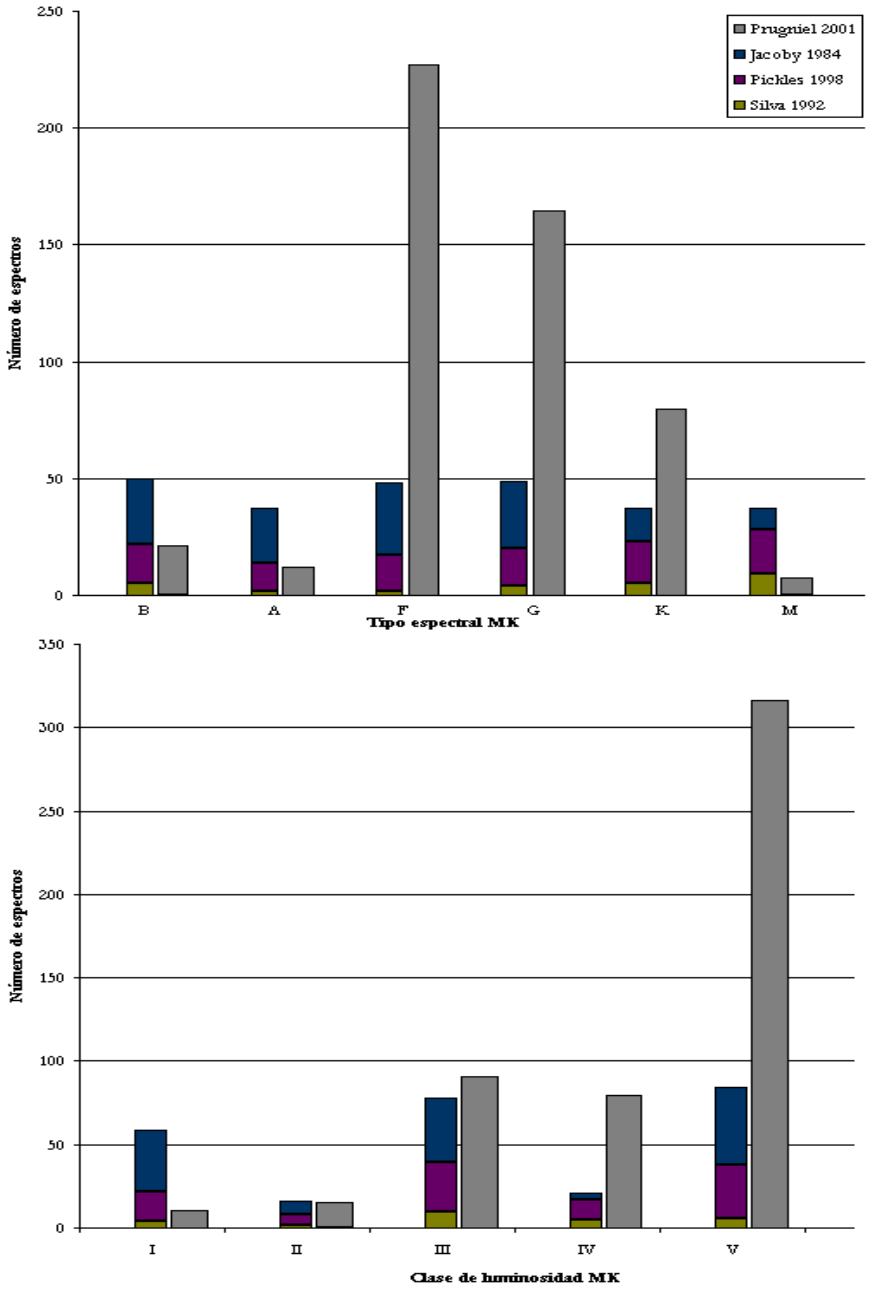


Figura 32. Distribución de tipos espectrales y clases de luminosidad del conjunto de espectros seleccionados. Los colores muestran los distintos catálogos de referencia

4.2 Criterios e índices de clasificación

La radiación emitida por las estrellas es una excelente fuente de conocimiento acerca de su composición química y de las condiciones físicas imperantes en su atmósfera, pues el análisis de las líneas espectrales proporciona información relevante sobre propiedades tan interesantes como la temperatura superficial, la presión, la densidad o la velocidad radial, a la vez que permite identificar gran parte de los elementos químicos que las constituyen. Los distintos tipos de estrellas presentan diferentes peculiaridades observables en su espectro, que son las que comúnmente se estudian para determinar la clasificación MK de las mismas. Estos rasgos característicos pueden aislarse mediante la definición de índices espectrales de clasificación [Gray 2009].

Si bien en las principales fuentes bibliográficas sobre clasificación se establecen diversos tipos de índices, en el presente estudio el conjunto de parámetros espectrales considerado se corresponde principalmente con las características que estudian visualmente los expertos espectroscopistas de nuestro grupo cuando tratan de obtener la clasificación de los espectros mediante el método tradicional. La gran mayoría de estos índices espectrales se agrupan en tres tipos generales: intensidad (I), anchura equivalente (EW) o anchura a media altura (FWHM) de líneas espectrales de absorción y emisión (He, H, Fe, Ca, K, Mg, etc.); profundidad (B) de bandas moleculares de absorción (TiO, CH, etc.); y relaciones entre las diferentes medidas de las líneas de absorción/emisión (ratios H/He, CaII/H, etcétera).

Una vez determinado el conjunto de índices espectrales que se va a aplicar en cada supuesto concreto de clasificación, el valor de los mismos se obtiene mediante los algoritmos de procesado incluidos en el módulo de análisis que, como ya se expuso detalladamente en el capítulo anterior, se basan fundamentalmente en el cálculo de la energía de las bandas moleculares y en la estimación del continuo espectral local de las líneas de absorción/emisión.

La profundidad o energía de una banda molecular se corresponde con el área situada por debajo del continuo espectral en la región de longitudes de onda en la que teóricamente se ubica dicha banda. Así, en el algoritmo diseñado para tal fin, se estima la profundidad de cada banda considerada aproximando su valor mediante integración discreta en el intervalo real de la misma, el cual se ha calibrado previamente de forma manual sobre los espectros de referencia para cada banda molecular considerada como posible índice de clasificación.

La intensidad de una línea de absorción/emisión es la medida de su flujo energético en relación con el continuo espectral de la zona en la que se espera localizar dicha línea; la

anchura equivalente se corresponde con la base de un rectángulo que tenga la misma área que la línea y como altura el valor del continuo espectral local; la anchura a media altura se define como la anchura de la línea medida en la mitad de su intensidad. Por lo tanto, a fin de establecer el valor de estos tres parámetros para todas las líneas de absorción/emisión consideradas es preciso calcular el continuo espectral de la zona circundante a cada línea.

La determinación no supervisada del continuo espectral es uno de los problemas clásicos en el campo de la clasificación estelar, sobre todo en estrellas de tipos intermedios y tardíos (F-M) cuyo espectro se caracteriza por presentar gran cantidad de líneas y bandas que obstaculizan en gran medida el ajuste sistemático del nivel real del mismo. Con el objetivo de tratar de sortear esta dificultad, en el módulo de análisis se diseñó un algoritmo que realiza una estimación del continuo local para cada línea espectral y obtiene un pseudo-continuo que, aunque no exacto, es válido para calcular el valor de los parámetros espectrales referidos a las líneas de absorción y emisión (I, EW, FWHM). En las diferentes fases del desarrollo del sistema de clasificación automática se fue refinando el método de cálculo de este continuo local, a medida que los resultados del ajuste de cada una de las opciones contempladas se contrastaban con las estimaciones reales realizadas de forma manual por los expertos para los espectros del catálogo de referencia; de este modo, la técnica inicial basada en la interpolación lineal del flujo energético entre los extremos de cada línea fue evolucionando hacia la atenuación de la señal de flujo mediante diferentes filtros.

En el algoritmo final implementado se combinan los procedimientos que demostraron ser más eficaces durante la etapa de experimentación previa con un método nuevo inspirado en la técnica desarrollada por N. Cardiel y J. Gorgas para su programa INDEX [Cardiel 1999]. Para medir el continuo local de las líneas de absorción/emisión, detectadas en el espectro previamente a través de un algoritmo que se basa en el estudio de la derivada primera y de la desviación típica del flujo, se definen dos intervalos adyacentes a cada una de ellas (uno hacia el rojo y otro hacia el azul) en los que se calcula un valor para cada continuo lateral suavizando la señal de flujo por medio de un filtro paso bajo (media móvil central de 5 puntos [Droke 2001]) que excluye las muestras de cada intervalo con mayor desviación estándar; ambas estimaciones (continuos locales izquierdo y derecho) se interpolan, con ajuste polinómico, para obtener la medida final del pseudocontinuo en la longitud de onda correspondiente a cada línea. Los intervalos laterales se establecieron mediante un proceso de calibración manual realizado sobre los espectros pertenecientes al catálogo principal (Silva 1992, Pickles 1998, Jacoby 1984), logrando así un ajuste propio y adaptado a las peculiaridades de cada línea concreta de absorción o emisión.

Las particularidades de los algoritmos de detección de bandas moleculares y líneas espectrales, así como la definición matemática de las medidas consideradas para cada una de ellas (energía, intensidad, anchura equivalente, etc.) y los procedimientos implementados

para estimar su valor, se describen detalladamente en la sección dedicada al módulo de análisis morfológico (v. sec. 3.2).

Por medio de los citados algoritmos de análisis se extraen una gran cantidad de características relevantes de cada espectro susceptibles de ser incluidas como criterios de clasificación, aunque únicamente un subconjunto reducido de las mismas se verá involucrado en la obtención de los índices finales definidos en cada caso. Con el objetivo de realizar un estudio del problema lo más exhaustivo posible, durante las primeras fases de desarrollo del sistema se juzgó apropiado efectuar todos los análisis viables, considerando otros parámetros y medidas que no se incluyen habitualmente en los criterios empleados en el proceso de clasificación tradicional, bien porque no han demostrado su adecuación o bien porque su incidencia sobre el tipo espectral o la luminosidad es difícil de detectar directamente de forma visual. De este modo, se establece el valor para parámetros poco usuales tales como la energía espectral total o la adición de la energía de bandas moleculares adyacentes; asimismo, para cada línea espectral se mide su anchura equivalente, intensidad y anchura a media altura, independientemente de que estas formen o no parte de los criterios contemplados en el supuesto de clasificación considerado.

La elección final de los índices óptimos para cada caso particular se ha basado principalmente en la experiencia adquirida por los expertos de nuestro grupo durante las etapas previas de clasificación estelar mediante el método tradicional; si bien estos criterios propios se han contrastado con los recogidos en las distintas fuentes bibliográficas [Jaschek 1991] [Gray 2009] [Gray 2010] [MK 2010], haciendo especial hincapié en el estudio de los índices de Lick [Worthey 1994].

La idoneidad del subconjunto de parámetros espectrales seleccionado para cada proceso específico de clasificación se verificó mediante un análisis de sensibilidad completo, llevado a cabo sobre los espectros de los catálogos de referencia, en el que se evaluó la resolución real de cada uno de los índices definidos a la hora de determinar la clasificación MK de las estrellas.

En la tabla 4 se muestran los 25 índices espectrales elegidos finalmente para esta primera aproximación al desarrollo de un sistema automático de clasificación de espectros estelares. Esta selección incluye la medida de la energía de varias bandas moleculares de óxido de titanio (TiO), la intensidad o anchura equivalente de diferentes líneas de absorción (entre ellas algunas de las que forman la serie de hidrógeno de Balmer), algunos ratios entre líneas espectrales próximas y algún otro parámetro menos usual como la energía espectral o la estimación global del valor de varias bandas moleculares. En la primera columna se incluye el código asignado para identificar cada parámetro seleccionado, los cuales se especifican asimismo en la segunda columna; la tercera detalla la descripción de los índices espec-

trales, mientras que en la cuarta se recogen, si es el caso, los intervalos definidos para estimar el valor de cada uno de ellos, los cuales se obtuvieron mediante calibración manual sobre los espectros del catálogo guía; la última columna muestra la referencia al algoritmo de análisis morfológico utilizado para estimar dicho valor (v. sec. 3.2).

Id	Índice	Descripción	Intervalo	Alg.
1	B (4950 Å)	Banda TiO	4950 Å - 5060 Å	E1
2	B (6225 Å)	Banda TiO	6075 Å - 6375 Å	E1
3	B (5160 Å)	Banda TiO	5160 Å - 5308 Å	E1
4	B (5840 Å)	Banda TiO	5840 Å - 5990 Å	E1
5	B (5940 Å)	Banda TiO	5805 Å - 6075 Å	E1
6	B (6245 Å)	Banda TiO	6205 Å - 6285 Å	E1
7	B (6262 Å)	Banda TiO	6132 Å - 6392 Å	E1
8*	B (6745 Å)	Banda TiO	6645 Å - 6845 Å	E1
9*	B (7100 Å)	Banda TiO	7050 Å - 7150 Å	E1
10*	I (3933 Å)	Línea Ca II (K)	3908 Å - 3928 Å 3938 Å - 3958 Å	E2
11*	I (3968 Å)	Línea Ca II (H)	3955 Å - 3965 Å 3975 Å - 3990 Å	E2
12	I (4340 Å)	Línea H I $_{\gamma}$	4325 Å - 4338 Å 4345 Å - 4355 Å	E2
13*	I (4102 Å)	Línea H I $_{\delta}$	4090 Å - 4100 Å 4107 Å - 4127 Å	E2
14*	I (4026 Å)	Línea He I	4001 Å - 4021 Å 4030 Å - 4050 Å	E2
15	I (4471 Å)	Línea He I	4446 Å - 4466 Å 4475 Å - 4485 Å	E2
16	I (4861 Å)	Línea H I $_{\beta}$	4835 Å - 4855 Å 4865 Å - 4885 Å	E2
17	I (6563 Å)	Línea H I $_{\alpha}$	6530 Å - 6560 Å 6570 Å - 6590 Å	E2
18	EW (4300 Å)	Banda G	4283 Å - 4318 Å	E3
19*	I (3933 Å) / I (3968 Å)	Ratio Ca II (K), Ca II (H)	---	---
20*	I (4102 Å) / I (4026 Å)	Ratio H I $_{\delta}$, He I (4026 Å)	---	---
21*	I (4102 Å) / I (4471 Å)	Ratio H I $_{\delta}$, He I (4471 Å)	---	---
22	EW (4300 Å) / I (4340 Å)	Ratio Banda G, H I $_{\gamma}$	---	---
23	$\sum_{i=1}^{i=2} B_i$	Bandas TiO principales (1-2)	---	---
24	$\sum_{i=3}^{i=9} B_i$	Bandas TiO secundarias (3-9)	---	---
25	$\int I(\lambda_i)\, d\lambda$	Energía espectral	---	---

Tabla 4. Índices espectrales seleccionados para la clasificación MK en el primer sistema automático

Los índices marcados con * en la tabla anterior forman el subconjunto que forzosamente se ha excluido para el tratamiento de los espectros del catálogo secundario (Prugniel 2001), pues se corresponden con características morfológicas que quedan fuera del rango espectral de dicho catálogo (4100-6800 Å) y que son, por tanto, imposibles de estimar; esta limitación, como se verá en las secciones siguientes, repercute en el rendimiento de algunas de las técnicas implementadas.

Asimismo, es necesario mencionar en este punto que no siempre se ha empleado el conjunto de índices anterior completo, sino que debido a que se ha llevado a cabo un estudio en los espectros del catálogo principal de referencia (Silva 1992, Pickles 1998, Jacoby 1984) sobre los parámetros que más influyen en la determinación de los distintos tipos espectrales y niveles de luminosidad, en algunos casos se ha hecho una selección de los mismos con el fin de refinar los resultados. A continuación se expone el procedimiento concreto y los resultados obtenidos en este análisis de sensibilidad realizado sobre los índices espectrales de clasificación preseleccionados.

4.3 Análisis de sensibilidad

En este primer enfoque híbrido para automatizar la clasificación de las estrellas en el sistema MK se seleccionó un conjunto de 33 características morfológicas de entre todos los criterios de clasificación recopilados en el estudio preliminar del problema, esto es, los indicados por los expertos espectroscopistas y los hallados en la bibliografía. Estos posibles índices espectrales de clasificación se sometieron a un exhaustivo análisis de sensibilidad, en el que se evaluó tanto su grado de adecuación como su capacidad real para discernir entre las diferentes clases de espectros.

Así, con el objetivo de corroborar la correcta definición de los índices, se estimó el valor de las características morfológicas escogidas (haciendo uso de los algoritmos implementados en el módulo de análisis) para los espectros del catálogo principal de referencia (Silva 1992, Pickles 1998, Jacoby 1984), examinando detenidamente su variación con el tipo espectral y el nivel de luminosidad. A través de este estudio minucioso se logró establecer la resolución real de cada índice, delimitando al mismo tiempo los diferentes tipos de espectros que es capaz de discriminar cada uno de ellos.

Las figuras siguientes se corresponden con los gráficos empleados para evaluar el comportamiento de algunos de los índices espectrales más significativos, mostrando su dependencia con el tipo espectral MK y/o con la clase de luminosidad; en las figuras 33-35 se muestra un conjunto de índices espectrales que, a causa de su excelente rendimiento en los espectros de referencia, se incluyeron en la selección final de parámetros para la clasificación MK, mientras que en la figura 36 se recogen algunos de los que fueron finalmente descartados debido a que su resolución real no era del todo congruente con la teórica.

En la figura 33-a se representa la variación con el tipo espectral y la clase de luminosidad del flujo de la línea de calcio en 3933 Å (índice 10 en la tabla 4 de la sección precedente); estudiando el comportamiento de este índice para las estrellas de los catálogos de referencia se deduce que podría ser un buen discriminador del subtipo espectral en tipos intermedios (FG), pues su valor va aumentando desde el tipo A6 hasta alcanzar su máximo en estrellas de tipos F tardíos (F6-F8) y luego disminuye de nuevo para presentar valores prácticamente nulos en estrellas de tipo M (lo cual según los expertos significaría ausencia de la línea en el espectro) [Gray 2009]. Además, como puede observarse en la gráfica, a priori parece ser capaz de separar las estrellas supergigantes (♦ luminosidad I) para los tipos espectrales tempranos (BAF).

La figura 33-b muestra la dependencia del valor de la intensidad de la línea de absorción de calcio en 3968 Å (índice 11) con el tipo espectral y la luminosidad; al igual que para el índice anterior, su valor se incrementa hasta los tipos F fríos, disminuyendo enton-

ces hasta desaparecer en las estrellas más tardías. Así, conociendo previamente la clasificación *global* de la estrella (temprana, intermedia o tardía), este parámetro podría ser útil para determinar el tipo espectral MK (separando con bastante precisión las estrellas de tipo B de las de tipo A, las de tipo F de las de tipo G y las de tipo K de las de tipo M), pudiendo incluso llegar a discriminar en algún caso entre subtipos (por ejemplo para los tipos G y K). En cuanto a la luminosidad, podría asimismo utilizarse este índice para diferenciar las supergigantes (♦ luminosidad I) del resto de estrellas en los tipos espectrales BAF. Es preciso indicar que en algunos casos la medición de esta línea de calcio se ve muy afectada por la línea de hidrógeno próxima (HI$_\varepsilon$ 3970 Å), ya que en muchas estrellas ambas se encuentran superpuestas y resulta complicado aislar una de otra.

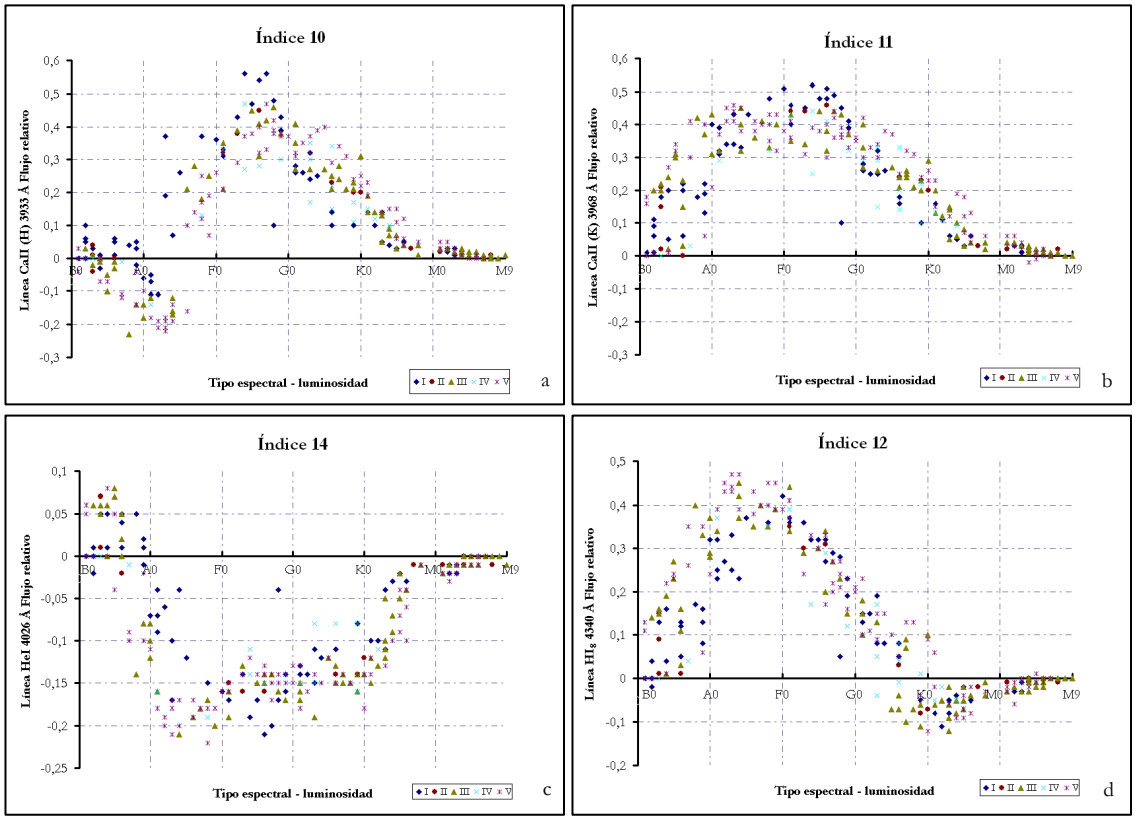


Figura 33a-d. Índices para la clasificación MK. Flujo energético en función del tipo espectral y la luminosidad
a) CaII, H 3933 Å; b) CaII, K 3968 Å; c) HeI 4026 Å; d) HI$_\gamma$ 4340 Å

En la figura 33-c se representa la relación entre la intensidad de la línea de helio en 4026 Å (índice 14) y la clasificación MK de la estrella; tal y como se aprecia claramente en la gráfica, este parámetro solamente presenta valores significativos en las estrellas de tipo B, con lo cual podría seleccionarse como índice de clasificación válido para diferenciar dichas estrellas del resto. En cambio para la luminosidad, el análisis de su comportamiento en las estrellas del catálogo de referencia no permite establecer ningún patrón digno de ser tenido en cuenta.

La figura 33-d ilustra la variación del flujo relativo de la línea de hidrógeno en 4340 Å (HI_γ de la serie de Balmer e índice 12 en la tabla 4) con el tipo espectral y el nivel de luminosidad; analizando el comportamiento de dicho parámetro en las estrellas de referencia se puede concluir que, si se conoce de antemano el tipo global, podría erigirse en un índice idóneo para diferenciar entre subtipos, sobre todo para estrellas de tipos espectrales A2 (que es donde alcanza su máximo valor) a G9. Igualmente, este índice podría servir también para distinguir la clase de luminosidad I (♦) en las estrellas tempranas (BA).

En la figura 34-a se muestra la relación existente entre la intensidad de la línea HI_β de la serie de Balmer (4861 Å, índice 16) y el tipo espectral y clase de luminosidad en el sistema MK; observando detenidamente su fluctuación en la gráfica, puede deducirse que este parámetro podría ser útil a priori para separar los tipos espectrales de las estrellas tempranas (BA) e intermedias (FG). Además, una vez establecido el tipo espectral, podría llegar incluso a ser un buen indicador del subtipo en estrellas de tipos AFG [Morgan 1978]. Este índice parece capaz también de determinar la clase de luminosidad en tipos tempranos (BA) pues, tal y como se aprecia en la figura, consigue en cierto modo separar las supergigantes (♦ luminosidad I) de las estrellas gigantes (▲ luminosidad III) y de las enanas (✳ luminosidad V).

La figura 34-b refleja la variación con el tipo espectral y la luminosidad del cociente entre la línea de hidrógeno en 4102 Å (HI_δ de la serie de Balmer) y la línea de absorción de helio en 4471 Å (índice 21 de la tabla 4); del estudio detallado del comportamiento de este ratio para las estrellas del catálogo de referencia se infiere que podría delimitar adecuadamente el tipo B, debido a que presenta valores significativos únicamente para estrellas de dicho tipo espectral, pudiendo utilizarse tanto para discernir entre subtipos como entre niveles de luminosidad.

La figura 34-c ilustra la dependencia entre la anchura equivalente de la denominada banda G (4300 Å, índice 18) y la clasificación MK; como se advierte claramente en la gráfica, su valor se hace significativo y va aumentando paulatinamente desde los tipos A más fríos (a partir de A6 aproximadamente) hasta los tipos K más calientes (K0-K2). De esta forma, este parámetro podría ser muy eficaz en la determinación del subtipo espectral, sobre todo para estrellas intermedias (FG), pudiendo asimismo utilizarse para separar estas de las tempranas (BA). En relación con la clase de luminosidad, se observa que en las estrellas de tipos tardíos (KM) es relativamente capaz de aislar las estrellas supergigantes (♦ luminosidad I) del resto.

En la figura 34-d se representa la medida de la profundidad de la banda de TiO en 5840 Å (índice 4 de la sección anterior) en relación con el tipo espectral y la clase de luminosidad del sistema de clasificación MK. Tal y como puede apreciarse fácilmente en la grá-

fica, este índice podría seleccionarse para discriminar entre subtipos de estrellas tardías (KM), debido a que su valor se hace más significativo a medida que disminuye la temperatura. Sin embargo, este parámetro no presenta un comportamiento que permita establecer una relación clara entre su valor y el nivel de luminosidad.

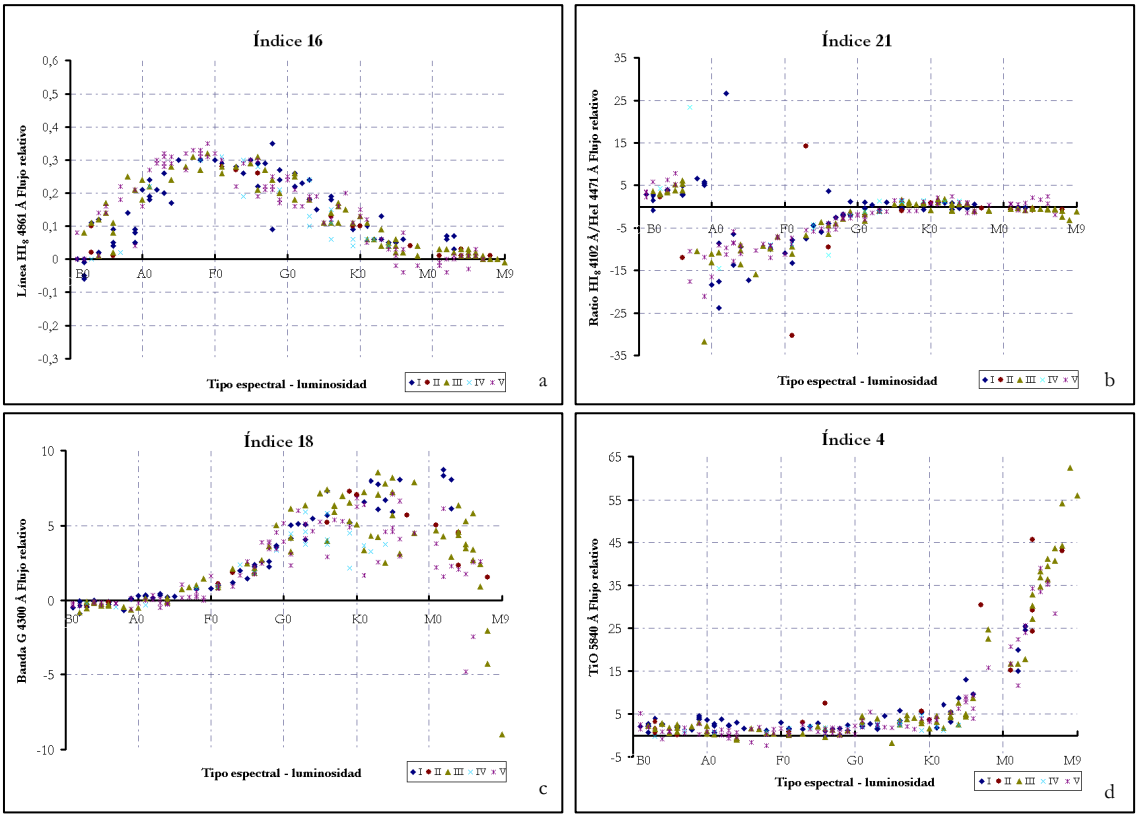


Figura 34a-d. Índices para la clasificación MK. Flujo energético en función del tipo espectral y la luminosidad a) HI_{β} 4861 Å; b) HI_{δ} 4102 Å/HeI 4471 Å; c) Banda G 4300 Å; d) TiO 5840 Å

La figura 35-a muestra la relación que existe entre la profundidad de la banda de TiO en 4950 Å (índice 1) con el tipo espectral y la clase de luminosidad MK; mediante el análisis del comportamiento de este parámetro en las estrellas de los catálogos de referencia puede colegirse que podría ser apto para determinar correctamente el tipo espectral en estrellas tardías (tipos KM), puesto que su valor se hace significativo en estrellas de tipos intermedios ya tardíos (G8-G9) y va incrementándose rápidamente hasta los tipos más fríos del sistema MK (M7-M9). Al mismo tiempo, parece a priori ser válido también para separar del resto las estrellas supergigantes (♦ luminosidad I) en tipos espectrales intermedios (FG) y las gigantes (▲ luminosidad III) en estrellas cuyo espectro pertenezca al tipo M, sobre todo en las de subtipo espectral M4 y siguientes, tal como puede observarse en la figura.

En la figura 35-b se representa la variación de la profundidad de la banda de TiO en 6225 Å (índice 2) con la clasificación MK de la estrella; como ocurría con el parámetro

anterior, su valor va aumentando gradualmente hasta los tipos espectrales más fríos, no obstante esta banda comienza a hacerse ya notable en las estrellas de tipo G y su curva de progresión es mucho más suave, con lo cual su resolución será mayor que la del índice precedente [Gray 2010]. De este modo, la medida de esta banda podría aprovecharse para delimitar el subtipo espectral en estrellas GKM e incluso para distinguir entre los tipos F y G, sabiendo de antemano que se trata de una estrella intermedia. En cuanto a la luminosidad su comportamiento es más versátil, pues parece ser capaz de separar las estrellas supergigantes (♦ luminosidad I) pero para tipos espectrales GK aunque, al contrario de lo que ocurría con la banda TiO 4950 Å, no discrimina bien las gigantes de tipo M pero en cambio sí podría mostrarse útil para aislar las estrellas enanas (⁎ luminosidad V) en tipos tardíos (G8 y posteriores).

Después de confeccionar y estudiar cuidadosamente los gráficos referentes a todas las bandas moleculares preseleccionadas (índices 1-9), se encontró que ninguna de ellas era completamente satisfactoria, pues su desempeño real en los espectros de los catálogos de referencia no coincidía plenamente con el comportamiento esperado: según los expertos en clasificación a través de las bandas de TiO es posible determinar la clasificación *global* de la estrella (i. e. temprana, intermedia y tardía) e incluso discriminar adecuadamente los subtipos espectrales en estrellas tardías. Algunas estrellas del catálogo presentan valores elevados en determinadas bandas moleculares mientras que en otras, pertenecientes al mismo grupo, las bandas de TiO más profundas se encuentran en zonas diferentes. Con el propósito de tratar esta peculiaridad, se consideraron otros índices que no solamente pretenden medir la profundidad de determinadas bandas moleculares, sino que también son potencialmente aptos para estimar su proliferación en el espectro. De este modo se incluyeron dos parámetros nuevos, consistentes en la adición de varias bandas de TiO relevantes, que no se contemplan en el método clásico de clasificación ni en la bibliografía consultada. En la figura 35-c se muestra uno de ellos (índice 23), en concreto el resultante de sumar las bandas moleculares de TiO en 4950 Å y en 6225 Å (figuras 35-a y 35-b, respectivamente). El análisis minucioso de la gráfica pone de manifiesto que este parámetro sí es susceptible de utilizarse para clasificar globalmente la estrella, pues parece separar con bastante precisión las estrellas tempranas de las intermedias y de las tardías. Además aúna las cualidades de los dos índices que resume, ya que a priori podría emplearse tanto para diferenciar los tipos F y G en estrellas intermedias como para discriminar entre los tipos K y M en estrellas tardías, obteniendo también una buena resolución estimando el subtipo espectral en tipos G y posteriores; este índice agregado podría asimismo convertirse en un buen indicador de la clase de luminosidad I (♦) en estrellas de tipos FGK, siendo también capaz de separar las enanas (⁎ luminosidad V) a partir del tipo espectral G8. La figura 35-d ilustra la fluctuación de la energía espectral (integral del flujo energético en todo el intervalo de longitudes de onda, índice 25) con respecto al tipo espectral MK; aunque este índice presenta una curva carac-

terística que lo haría a priori apropiado para determinar el tipo espectral, su valor presenta una dependencia muy fuerte de la fuente de procedencia del espectro, peculiaridad que puede observarse claramente en la gráfica donde las tres series que se han resaltado en diferentes colores se corresponden con los tres catálogos diferentes utilizados como referencia.

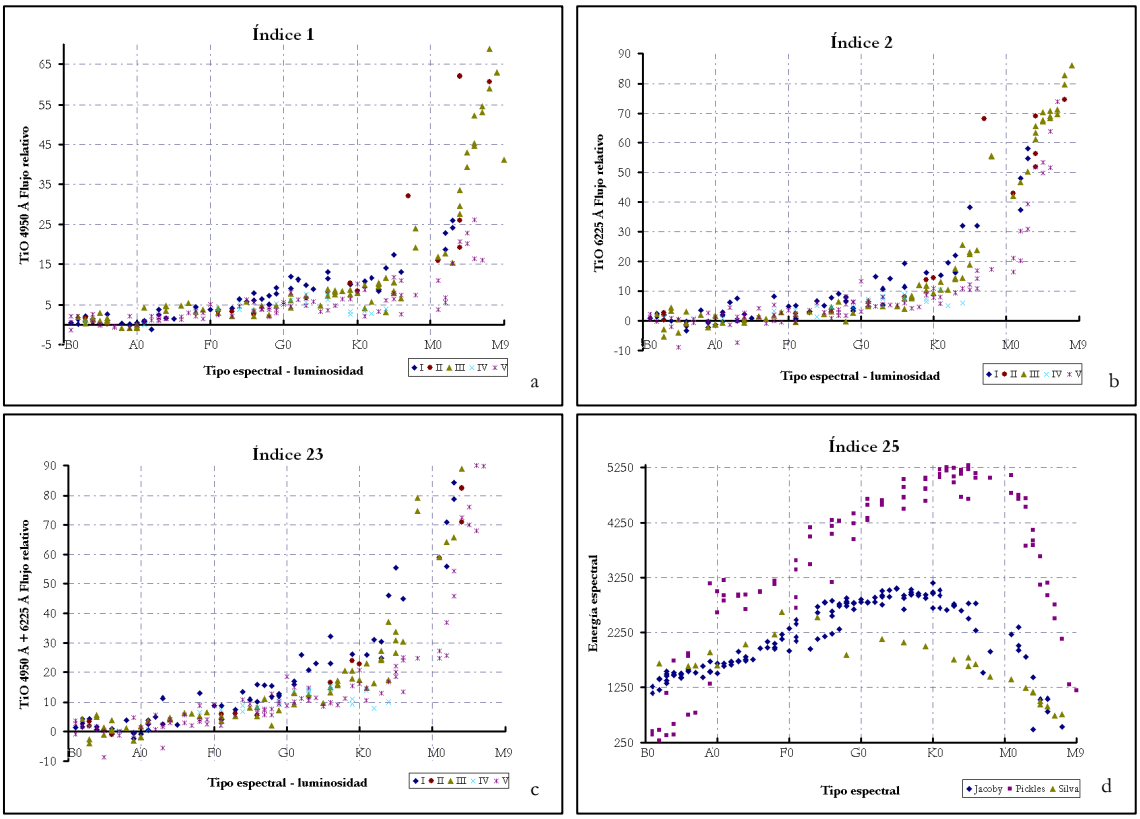


Figura 35a-d. Índices para la clasificación MK. Flujo energético en función del tipo espectral y la luminosidad
a) TiO 4950 Å; b) TiO 6225 Å; c) TiO 4950 Å+TiO 6225 Å; d) Energía espectral

La figura 36-a presenta la variación con el tipo espectral del cociente entre las líneas de hierro en 4045 Å y en 4173 Å; este parámetro preseleccionado a priori no se ha incluido finalmente como índice en este primer sistema automático de clasificación, puesto que su valor fluctúa de forma bastante arbitraria y no es sencillo establecer una relación concreta con la clasificación MK de la estrella; tal y como puede observarse en la grafica, para todos los tipos espectrales registra valores muy similares, tanto positivos como negativos.

En la figura 36-b se muestra la relación existente entre la profundidad de la banda de TiO en 4335 Å y el tipo espectral MK. Si bien el estudio de la gráfica indica un patrón de variación similar al de otros parámetros analizados (con un incremento progresivo a partir de los tipos intermedios), este comportamiento no coincide con el esperado para este índice: al igual que ocurre con las otras bandas de óxido de titanio, debería presentar valo-

res cada vez más elevados a medida que disminuye la temperatura y, por el contrario, se observa que existe una anomalía en las estrellas M en donde registra valores decrecientes, llegando a ser prácticamente inapreciable en los subtipos más fríos. Esta desviación con respecto a su resolución teórica podría deberse a que en la zona espectral en la que se ubica (4365 Å-4505 Å) existan otras características espectrales que pueden estar contaminando la medida de esta banda, por ejemplo las líneas de CaI en 4455 Å o de FeI en 4405 Å; debido a las razones expuestas, finalmente se excluyó este parámetro de la selección de índices aptos para estimar la clasificación MK.

La figura 36-c ilustra el comportamiento de la banda de TiO en 5805 Å con respecto al tipo espectral de la estrella. Como ya ocurría para el parámetro anterior, su curva no coincide con la esperable para una banda molecular, pues de nuevo la medición se ve afectada por otras líneas cercanas; concretamente en este caso podría incluir a la línea de HeI en 5876 Å, ya que presenta valores significativos únicamente en el tipo B (patrón característico para las líneas de helio) y en las estrellas más tardías del tipo M, donde presumiblemente la banda molecular sea lo suficientemente intensa como para contrarrestar la influencia de la citada línea. Así, este índice se descartó también a la hora de realizar la selección final para el sistema de clasificación desarrollado.

En la figura 36-d se representa el cociente entre las líneas de magnesio (4481 Å) y hierro (4385 Å) en función del tipo espectral. Un primer examen somero de la gráfica parece indicar que este parámetro podría ser útil para separar las estrellas tempranas (BAF) del resto, ya que presenta valores significativos solamente para esos tipos espectrales; en cambio, un estudio más detenido permite constatar que su capacidad de discriminación es muy limitada, pues no aísla bien las estrellas de los primeros subtipos B ni tampoco las de los últimos de tipo F. Debido a estas restricciones, no se consideró adecuado que este ratio formase parte del grupo de índices finalmente elegidos para acometer el desarrollo del sistema automático de clasificación.

La figura 36-e muestra como evoluciona el valor de la profundidad de la banda de TiO en 5622 Å con el tipo espectral de la estrella. Como se advierte claramente en la gráfica, este parámetro registra valores muy similares y poco significativos para los diferentes tipos espectrales del sistema MK, con lo que no sería apropiado incluirlo como índice válido para discernir entre ellos.

En la figura 36-f se recoge la relación entre la intensidad de la línea de hidrógeno en 4340 Å (HI_{γ} de la serie de Balmer) y la clase de luminosidad de la estrella. En un principio se consideró adecuado representar cada uno de los índices espectrales en función del tipo espectral y de la luminosidad por separado, obteniendo como resultado gráficas similares a la de esta figura, en las que obviamente resulta bastante complejo advertir las tendencias

implícitas; además, la mayoría de los índices preseleccionados que son sensibles al tipo espectral también lo son al nivel de luminosidad, con lo que es difícil aislar ambas variaciones. Así, finalmente se optó por descartar este tipo de gráficas para el análisis de sensibilidad y se adoptó la representación conjunta de la variación de cada índice con la temperatura y la luminosidad, tal y como se recoge en las figuras precedentes (33-35).

En las figuras de esta sección se han incluido solamente algunos ejemplos representativos de los esquemas utilizados para evaluar la sensibilidad de los distintos índices seleccionados para la clasificación. La relación completa de gráficas en las que se apoyó este exhaustivo análisis de sensibilidad puede consultarse en el anexo III.

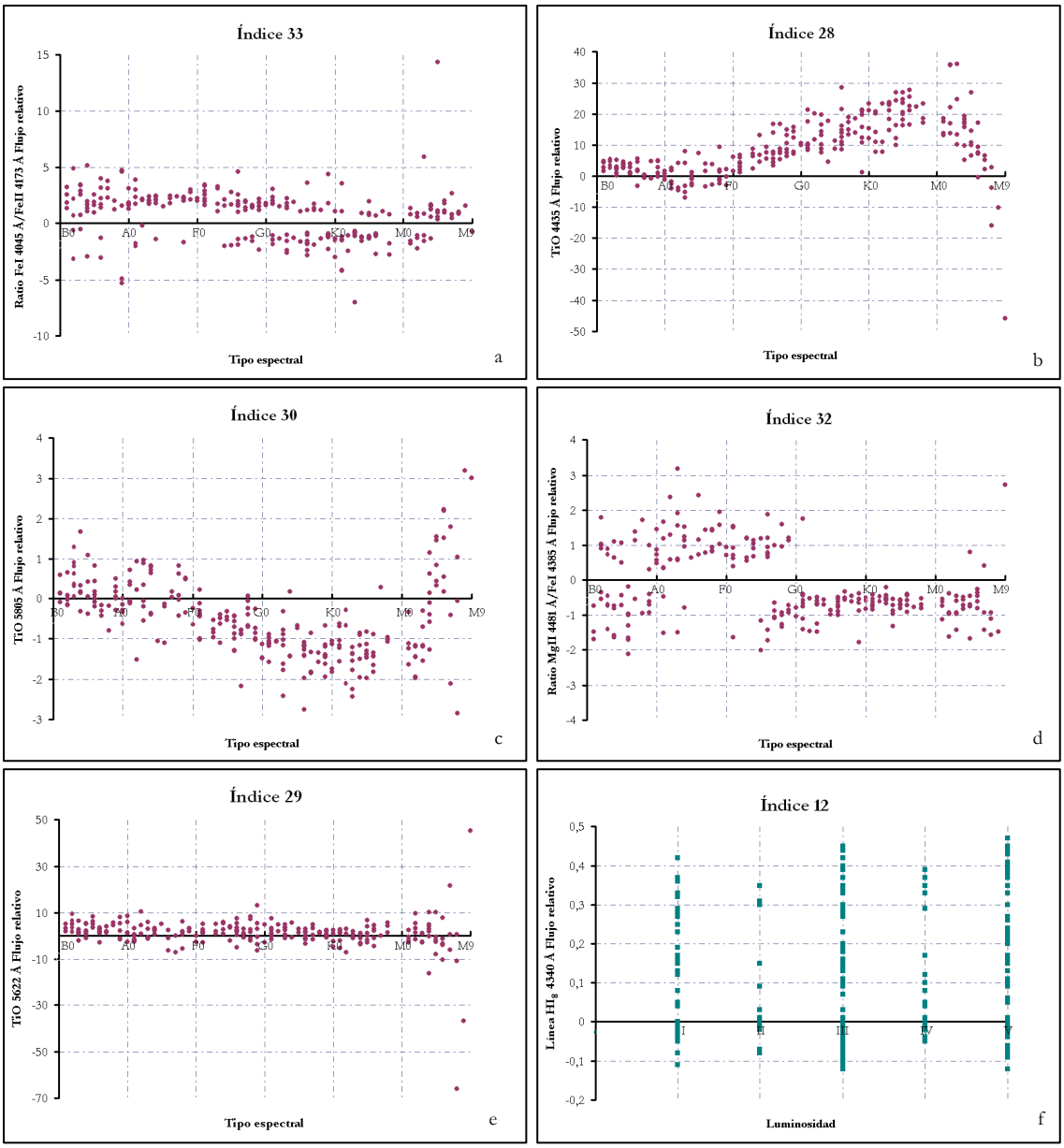


Figura 36a-f. Índices descartados por su baja resolución en tipos espectrales y/o niveles de luminosidad
a) FeI 4045Å/FeII 4173Å; b) TiO 4435Å; c) TiO 5805Å; d) MgII 4481Å/FeI 4385Å; e) TiO 5622Å; f) HI_{γ} 4340Å

En la tabla 5 se relacionan los resultados más relevantes del estudio llevado a cabo sobre la sensibilidad real de cada índice, contrastándolos con la resolución teórica de los mismos indicada por los expertos. Los parámetros identificados del 1 al 25 son los que forman el conjunto final de índices considerados aptos para abordar la clasificación MK, es decir, aquellos que en el análisis sobre los 258 espectros del catálogo principal de referencia presentaron un patrón claro y reproducible de discriminación entre tipos espectrales y/o clases de luminosidad. La primera y segunda columna recogen el identificador y la definición de cada índice respectivamente (con un asterisco en el id se indican aquellos parámetros que no se contemplan habitualmente en el proceso de clasificación manual pero que, debido a su sensibilidad, se incorporaron también en el sistema final); en la tercera columna se muestran los tipos, subtipos y niveles de luminosidad que potencialmente podría discriminar cada uno de ellos, y en la cuarta se especifican los que en realidad es capaz de delimitar, de acuerdo con el rendimiento conseguido en los catálogos de referencia; además en esta última columna, cuando un índice ha demostrado no ser idóneo para la clasificación (id 26-33), se adjunta también el motivo de su exclusión.

Id	Índice	Resolución teórica	Resolución real
1	B (4950 Å)	Clasificación global (tempranas, intermedias, tardías)	Tipos K-M Luminosidad I intermedias Luminosidad III tipo M
2	B (6225 Å)	Clasificación global (tempranas, intermedias, tardías)	Tipos G-M Subtipos K-M Luminosidad I tipos G-K Luminosidad V tipos K-M
3	B (5160 Å)	Tipos K-M	Tipos G-M
4	B (5840 Å)	Tipos K-M	Subtipos K-M
5	B (5940 Å)	Tipos K-M	Subtipos M
6	B (6245 Å)	Tipos K-M	Tipos K-M
7*	B (6262 Å)	Tipos K-M	Tipos K-M
8	B (6745 Å)	Tipos K-M	Subtipos M Luminosidad III-V tipo M
9*	B (7100 Å)	Tipos K-M	Subtipos M
10	I (3933 Å)	Tipos A-G	Subtipos F-G Luminosidad I tipos B-F
11	I (3968 Å)	Tipos A-G	Tipos A-M (previa clasif. global) Luminosidad I tipos B-F
12	I (4340 Å)	Tipos B-G Luminosidad I tempranas	Subtipos A-G (previa clasif. global) Luminosidad I tipos B-A
13	I (4102 Å)	Tipos B-G Luminosidad I tempranas	Subtipos A-F

Id	Índice	Resolución teórica	Resolución real
14	I (4026 Å)	Tipos O-B	Tipo B
15	I (4471 Å)	Tipos O-B	Tipo B
16	I (4861 Å)	Tipos B-G Luminosidad tempranas	Tipos B-K Subtipos A-G (previa clasif. tipo) Luminosidad tipos B-A
17	I (6563 Å)	Tipos B-G Luminosidad I tempranas Espectros con emisión	Tipos B-K (previa clasif. global) Subtipos A
18	EW (4300 Å)	Tipos A-G	Tipos A-G Subtipos F-G Luminosidad I tipos K-M
19	I (3933 Å)/I (3968 Å)	Tipos A-G	Tipos A-F
20	I (4102 Å)/I (4026 Å)	Tipos B-A	Tipo B
21	I (4102 Å)/I (4471 Å)	Tipos O-A	Subtipos B Luminosidad tipo B
22	EW (4300 Å)/I (4340 Å)	Tipos F-K	Tipos G-K
23*	$\sum_{i=1}^{i=2} B_i$	No contemplada	Tempranas, intermedias, tardías Tipos F-M Subtipos G-M Luminosidad I tipos F-K Luminosidad V tipos K-M
24*	$\sum_{i=3}^{i=9} B_i$	No contemplada	Subtipos K-M
25*	$\int I(\lambda_i)\, d\lambda$	No contemplada	Tempranas, intermedias
26	B (4953 Å)	Tipos K-M	No discrimina (valor sólo a partir de M5)
27	B (6140 Å)	Tipos K-M	Subtipos M (valor sólo a partir de M4)
28	B (4435 Å)	Tipos K-M	No discrimina (incluye otros índices)
29	B (5622 Å)	Tipos K-M	No discrimina (comportamiento arbitrario tipos B-M)
30	B (5805 Å)	Tipos K-M	No discrimina (incluye otros índices)
31	I (4144 Å)	Tipos O-B	No discrimina (comportamiento erróneo tipo M)
32	I (4481 Å)/I (4385 Å)	Tipos F-G	No discrimina (comportamiento arbitrario tipos B, F)
33	I (4045 Å)/I (4173 Å)	Tipos A-G	No discrimina (comportamiento arbitrario tipos F-M)

Tabla 5. Análisis de sensibilidad de los índices de clasificación seleccionados en el enfoque híbrido I

Durante el proceso de ajuste sucesivo llevado a cabo en esta etapa se descartaron un total de 8 índices de las 33 características morfológicas integrantes de la selección inicial, ya que en algunos casos, como queda reflejado en la tabla anterior, la resolución hallada y la teórica difirieron sensiblemente; se prescindió así de algunos parámetros que originariamente parecían apropiados pero que ciertamente no superaron con éxito esta fase de análisis (como por ejemplo la línea de helio en 4144 Å o la banda de TiO en 5805 Å) y, de la misma forma, otros índices que no se consideraban, al menos de forma explícita, en el método tradicional fueron finalmente designados como válidos para esta primera aproximación al problema de la clasificación automática (p. ej. la energía espectral o la adición de bandas moleculares).

Este conjunto final de índices espectrales resultante del estudio de sensibilidad llevado a cabo (con identificadores del 1 al 25, coincidentes con los relacionados en la tabla 4) serán los que se apliquen en las distintas fases de desarrollo del sistema de clasificación, tanto formando parte de los criterios de clasificación implementados en forma de reglas en los sistemas expertos como para la confección de los patrones de entrenamiento, validación y prueba de las redes de neuronas artificiales y redes funcionales (aunque en ciertos casos particulares también se ha considerado adecuado para estos efectos el empleo de determinadas zonas espectrales de interés o incluso del rango completo de longitudes de onda).

No obstante, como se verá en las secciones siguientes, en muchas ocasiones se ha refinado esta selección de parámetros de clasificación efectuándose un proceso de ajuste aún más fino por medio de técnicas que permiten minimizar y optimizar el número de índices necesarios para obtener la clasificación MK, tales como el análisis de componentes principales (PCA) o los algoritmos estadísticos de agrupamiento (*K-means*, Max-Min, etcétera). Asimismo, en muchas ocasiones el estudio de los resultados obtenidos con las diferentes técnicas de Inteligencia Artificial implementadas ha permitido reajustar de nuevo la resolución real de los parámetros de clasificación, llegando incluso a suprimirse algunos de los que se habían juzgado convenientes en esta primera etapa de análisis previa al desarrollo del sistema.

4.4 Sistemas basados en el conocimiento y lógica difusa

En el análisis y tratamiento de los espectros estelares, además de los valores cuantitativos y cualitativos, muchas veces resulta fundamental la experiencia del astrofísico. El conocimiento que tenga el experto del problema que está analizando, la valoración contextual y simbólica que le da a los distintos parámetros o la aplicación de reglas heurísticas (fruto a menudo de un proceso de aprendizaje del tipo prueba-error) determinan, en gran medida, el proceso de análisis. Así, en el caso concreto de la clasificación en el sistema MK, se incluye cada espectro dentro de un grupo específico (tipo espectral y clase de luminosidad) en base a un conjunto de criterios propios de cada experto, los cuales descansan casi enteramente en su propio conocimiento del proceso y en su experiencia previa en tareas similares.

Las anteriores consideraciones indican que el uso de técnicas de Inteligencia Artificial, en particular sistemas simbólicos deductivos que imiten la forma de trabajar del astrofísico, puede ayudar a la hora de resolver parte de los inconvenientes que presentan las técnicas tradicionales de procesado de datos astronómicos, enunciados y discutidos en profundidad en capítulos anteriores.

Por lo tanto, teniendo en cuenta la idiosincrasia del problema de la automatización de la clasificación espectral se propone como primera estrategia para abordarlo el diseño e implementación de un sistema basado en el conocimiento que emule de forma satisfactoria, y dentro de lo posible, el actual proceso de clasificación manual (v. sec. 2.3). El objetivo último será, como se ha indicado anteriormente, el desarrollo de un sistema híbrido que integre diversas técnicas computacionales a través de una base de datos astronómica *online*. Se espera que el sistema final llegue a clasificar espectros estelares con una tasa de éxito similar al porcentaje de acuerdo entre los expertos humanos que los han clasificado manualmente (aproximadamente del 80%); aun más, consideramos que tal sistema podría incluso tener una función adicional contribuyendo eficazmente al entrenamiento de nuevos expertos espectroscopistas.

Durante los años 70-80 se desarrollaron con éxito muchas aplicaciones de Inteligencia Artificial basadas en sistemas expertos, i. e. programas inteligentes que hacen uso del conocimiento y de procedimientos de inferencia propios de un experto humano (como por ejemplo la habilidad de toma de decisiones) para solventar problemas que son lo suficientemente complejos como para requerir una dosis significativa de pericia humana en su resolución [Giarratano 2004]; los términos sistema experto, sistema basado en el conocimiento o incluso sistema basado en reglas se usan a menudo como sinónimos. Los objetivos de los

sistemas expertos son generalmente más ambiciosos que los de los programas convencionales o algorítmicos, ya que con frecuencia se convierten no solamente en herramientas útiles para resolver problemas sino que también suelen utilizarse como asistentes inteligentes e incluso como ayudantes para el adiestramiento de nuevos expertos en un área determinada. Tienen por tanto estos sistemas un gran potencial para capturar el conocimiento y la experiencia de los profesionales actuales en la rama considerada, posibilitando que esta sabiduría esté disponible para otros en forma de herramientas de soporte técnico y de ayuda al entrenamiento.

Un sistema experto se compone habitualmente de una base de conocimiento (reglas y hechos), un motor de inferencia y una interfaz de usuario. Se pueden citar como ejemplos ilustrativos de sistemas expertos reputados el DENDRAL, diseñado en la Universidad de Stanford para asistir a los químicos en la identificación de moléculas orgánicas [Feigenbaum 1980], el MYCIN diseñado también en la Universidad de Stanford con el objetivo de diagnosticar enfermedades infecciosas de la sangre [Shortliffe 1984], el XCON/R1 apto para configurar ordenadores DEC VAX de acuerdo a las especificaciones del cliente [McDermott 1980], el generador de estructuras moleculares MOLGEN [Kerber 1995] o, dentro ya del campo de la Astrofísica, el sistema experto desarrollado para caracterizar espectros del satélite IUE en el rango ultravioleta [Rampazzo 1988]. Para simplificar y acelerar el desarrollo de estos sistemas se crearon lenguajes y herramientas específicas, como por ejemplo OPS5 [Forgy 1981], CLIPS [Giarratano 2004] o JESS [Friedman-Hill 2003].

La primera generación de sistemas expertos presentaba algunos inconvenientes, relacionados principalmente con la adquisición del conocimiento y con la gestión de la incertidumbre inherente al razonamiento.

El problema de transferir el conocimiento humano dentro del sistema es tan serio que a menudo se denomina *cuello de botella de la adquisición*, ya que constriñe la construcción de un sistema experto de la misma forma que un cuello de botella ordinario constriñe el flujo de líquido en una botella. Para un experto, es un trabajo duro, largo y complicado explicar el conocimiento y las estrategias de razonamiento que utiliza para resolver problemas en un dominio específico, para posteriormente codificar todo este conocimiento en forma de hechos y reglas. Aunque se han desarrollado varias técnicas con el objetivo expreso de facilitar esta tarea, ninguna de ellas puede realmente llegar a explicitar la totalidad del conocimiento manejado por el experto para resolver el problema en cuestión: el razonamiento humano es un proceso muy complejo y es necesario tener en cuenta que es muy difícil recabar todo el conocimiento (incluso el relacionado con un problema muy pequeño), ya que este podría no estar disponible de forma explícita ni siquiera para el propio experto (uso inconsciente del sentido común, casos particulares, relaciones implícitas en el contexto, etcétera).

El segundo problema clásico de un sistema experto de primera generación lo constituye la gestión del conocimiento inexacto y aproximado. Cuando se intenta integrar bases de conocimiento obtenidas de diferentes fuentes es frecuente encontrar algunas reglas contradictorias e incompatibles entre sí, pudiendo incluso aparecer también este problema cuando se obtiene el conocimiento de un único experto. Además, los sistemas expertos de primera generación suelen utilizar únicamente entradas y salidas binarias, lo cual origina cierta dificultad para manejar información aproximada. Todas estas limitaciones están relacionadas con el hecho de que el razonamiento humano que se pretende modelizar se caracteriza por ser esencialmente incompleto, inexacto y aproximado.

La segunda y actual generación de sistemas expertos se ha optimizado para superar, al menos en parte, los dos problemas mencionados: principalmente se les ha dotado de herramientas de adquisición automática de conocimiento (*machine learning tools*) que minimizan el citado cuello de botella, incorporando también algunas características y técnicas que posibilitan a estos sistemas razonar bajo condiciones de incertidumbre.

Las herramientas de aprendizaje automático se emplean en el área de sistemas expertos para adquirir automáticamente el conocimiento de otras fuentes distintas al experto humano [Mitchell 1997], y su uso permite mejorar la base de conocimiento posibilitando el aprendizaje a partir de todos los datos disponibles sobre un problema específico (por ejemplo, en diagnosis médica se podría obtener información tanto de los especialistas u otro personal sanitario como de los registros médicos de los hospitales). Se propusieron así algunos algoritmos de aprendizaje automático que tratan de perfeccionar la etapa de adquisición de conocimiento por medio del estudio de casos o ejemplos reales, como son los sistemas de inducción de árboles de decisión [Quinlan 1993], las redes de neuronas artificiales [Arbib 2002], los algoritmos genéticos [Davis 1991] o el razonamiento basado en casos [Hüllermeier 2007].

Con el propósito de gestionar la incertidumbre propia de las aplicaciones prácticas del mundo actual e incrementar al mismo tiempo la representación del conocimiento en los sistemas expertos, se propusieron en esta segunda generación algunas extensiones a los sistemas simbólicos tradicionales. Estos sistemas expertos evolucionados tratan de acoger algunos conceptos de la teoría clásica de probabilidad para razonar bajo condiciones de incertidumbre, incorporando factores de certeza que se desarrollaron originalmente para el sistema MYCIN [Shortliffe 1975], teoría de la evidencia o teoría Dempster-Shafer [Shafer 1976], razonamiento aproximativo mediante lógica difusa [Zadeh 1983], inferencia bayesiana [Pearl 1988], cadenas Markov [Neal 1993] o redes Petri difusas [Peterson 1981]. Aunque estos métodos solucionan algunos de los problemas relacionados con la representación y manipulación del conocimiento aproximado, inexacto e incierto, dependen en gran medida

del acierto en la especificación de la cantidad de incertidumbre, confianza, posibilidad, probabilidad, creencia o no creencia en los hechos y reglas de la base de conocimiento.

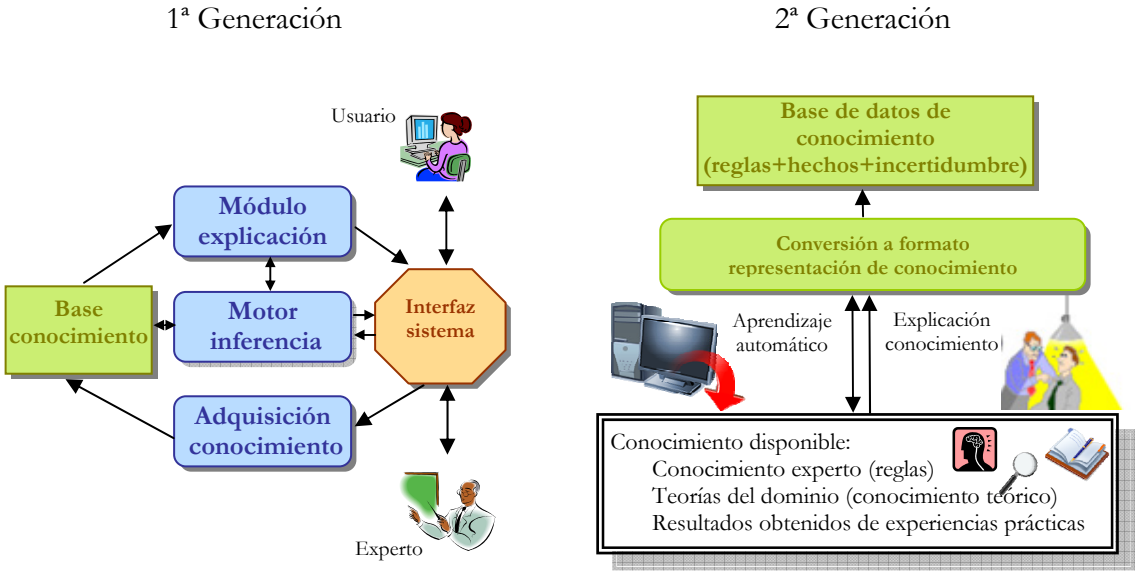


Figura 37. Modelos estructurales de los sistemas expertos de primera y segunda generación

Los sistemas híbridos constituyen un modo idóneo de integrar diferentes enfoques en un único sistema robusto, de forma que se puedan combinar diversos métodos de representación del conocimiento junto a sus estrategias de razonamiento asociadas [Medsker 1994]. Estos sistemas pueden diseñarse tanto para adquirir conocimiento de distintas fuentes (conocimiento experto, casos prácticos, etc.) reuniendo más de una herramienta automática de aprendizaje, como para operar al mismo tiempo con diferentes formalismos de representación del conocimiento (difuso, bayesiano, neuronal, etcétera). En este sentido, los sistemas híbridos serían, por consiguiente, la forma natural de implementar los sistemas expertos de segunda generación, los cuales se caracterizan fundamentalmente por la adquisición de conocimiento de las explicaciones de los expertos, la extracción automática de conocimiento a través de herramientas de aprendizaje, la verificación y validación de la base de conocimiento, la inferencia tradicional (motores de inferencia con encadenamiento hacia atrás y hacia delante), la representación de conocimiento inexacto e incierto (extendiendo el razonamiento y la inferencia por medio de la propagación de la incertidumbre, el razonamiento aproximado, la inferencia difusa, etc.), el refinamiento y mantenimiento automático de la base de conocimiento (incluyendo el ajuste de parámetros de incertidumbre) y la explicación de las respuestas del sistema. Los esquemas de la estructura básica de los sistemas expertos tradicionales (primera generación) y modernos (segunda generación) se muestran en la figura 37.

El primer sistema experto diseñado en nuestro grupo para asistir a los astrofísicos en el tratamiento de datos astronómicos consistió en un elemental sistema específico para obtener el tipo espectral MK en estrellas post-AGB (estrellas de masa intermedia que se encuentran en las últimas fases evolutivas) [Suárez 2001]. La experiencia de este primer desarrollo nos permitió evaluar las diferentes opciones disponibles y seleccionar aquellas que obtuvieron un mayor rendimiento para finalmente diseñar un clasificador estelar no supervisado más eficiente y apto para procesar estrellas de diferentes poblaciones.

Así, basándonos en la experimentación previa, en este primer enfoque automático propuesto se han combinado reglas de producción tradicionales con factores de certeza y lógica difusa, con el objetivo de gestionar la incertidumbre e imprecisión que caracterizan el razonamiento humano en este campo: se aplica la metodología tradicional de diseño de sistemas expertos basados en reglas [Shortliffe 1984] para llevar a cabo una evolución por medio de factores de certidumbre asociados a las reglas, conjuntos difusos y funciones de pertenencia contextualizadas para cada nivel de clasificación MK.

El sistema desarrollado hace uso de la parametrización de los espectros, obtenida anteriormente con los algoritmos de análisis morfológico (v. sec. 3.2), para razonar sobre los índices de clasificación y alcanzar una conclusión acerca del tipo/subtipo espectral y clase de luminosidad de cada estrella. Las clasificaciones MK obtenidas de este modo, junto con el grado de confianza en las mismas, se proporcionan a la interfaz del módulo de análisis, la cual se encargará de trasladárselas al usuario; se contempla asimismo la posibilidad de explicar todo el proceso de razonamiento seguido para alcanzar una conclusión concreta. El sistema experto diseñado se implementó en OPS/R2 [Forgy 1995a], integrándose con el módulo de análisis morfológico por medio de librerías dinámicas (DLLs).

El desarrollo de un sistema experto, a menudo conocido como ingeniería del conocimiento, sigue un proceso similar al de cualquier otro producto de software. No obstante, en este campo la terminología e incluso la naturaleza del proceso de desarrollo difieren de las empleadas en los sistemas de información tradicionales, ya que durante la creación de un sistema experto el mayor esfuerzo se dedica generalmente al diseño y desarrollo de la base de conocimiento (reglas, hechos, factores de credibilidad, etcétera). De hecho, uno de los problemas clásicos del diseño de sistemas basados en el conocimiento es la ausencia de una metodología formal, entendida esta como una estrategia que permita medir con precisión el rendimiento del sistema de forma similar a como se lleva a cabo en otros desarrollos convencionales.

Actualmente el desarrollo de sistemas expertos suele apoyarse en el uso de alguna metodología de prototipado rápido (evolutivo o incremental), que consiste en un proceso iterativo en el que se obtienen sucesivos modelos funcionales del sistema propuesto, los

cuales son fácilmente modificables y extensibles y que, si bien no son necesariamente representativos del sistema completo, proporcionan al usuario una representación física de las partes esenciales del mismo antes de su implementación final [Connel 1989]. Aunque utilizando este tipo de metodologías se dispone de una herramienta muy útil para resolver los problemas de decisión que surgen durante el diseño (pequeños sistemas productivos incrementales), la técnica del prototipado rápido para el desarrollo de SBC es a menudo desestructurada y ad hoc, especialmente en lo que concierne a la fase de verificación y evaluación del sistema; así, el uso exclusivo de esta metodología podría conducir al desarrollo de un sistema experto que sea ineficiente y que contenga numerosos errores potenciales.

A lo largo de los años se han propuesto varios paradigmas para el diseño e implementación de los sistemas basados en el conocimiento. Probablemente, el mejor conocido de todos ellos sea el proceso de desarrollo en cinco etapas formulado por Buchanan et ál. Estas fases, i. e. identificación, conceptualización, formalización, implementación y pruebas, se corresponderían aproximadamente con las ocho etapas del modelo clásico de desarrollo de software en cascada [Pressman 2009]. Los autores señalan que el proceso de desarrollo de un sistema experto ha de ser iterativo y, de esta forma, el desarrollador y los expertos podrán revisitar cualquiera de las etapas previas para una revisión adicional o para refinar los conceptos y/o relaciones dentro del dominio del problema [Buchanan 1983]. Por otra parte, Dereck Partridge describe una metodología para la construcción de programas basados en Inteligencia Artificial a través de un proceso conocido como RUDE (*Run, Understand, Debug, Edit*) que se basa en el prototipado rápido y en la abstracción sucesiva del problema en cada etapa del proceso de desarrollo. Se considera aquí al sistema experto como una función parcialmente especificada, ya que modela el comportamiento humano y, como tal, no puede declararse formalmente de la misma forma que se hace con el software convencional, concluyendo que la única manera de desarrollar un SBC de manera apropiada será a través de un proceso repetitivo del tipo ensayo-error [Partridge 1986]. Además de estos dos puntos de vista propuestos originariamente, en las últimas décadas se han formulado varios métodos diferentes para abordar el desarrollo de este tipo de sistemas, los cuales han alcanzado diferentes grados de aceptación [Waterman 1986] [Golshani 1990].

En el caso concreto del desarrollo del sistema experto de clasificación estelar automática que nos ocupa, se adoptó la metodología comúnmente conocida como DICE (*Design*, *Implementation*, *Critique*, *Editing*) [Pomykalski 1996], enfoque que aúna en cuatro etapas las filosofías propuestas anteriormente por Buchanan y Partridge. Esta metodología, que enfatiza la fase de pruebas y el análisis de fiabilidad, usa el prototipado rápido evolutivo creando al mismo tiempo un sistema de control en el que los resultados de las pruebas de verificación/validación mejoran la fiabilidad y rendimiento del sistema.

No obstante, independientemente de la metodología escogida para desarrollar un sistema experto, hay algunas actividades clave que es necesario llevar a cabo dentro del ciclo de vida de desarrollo de tal sistema: adquisición del conocimiento, representación del conocimiento, implementación, pruebas (verificación, validación, evaluación) y perfeccionamiento. A continuación se tratan las peculiaridades de cada una de estas tareas efectuadas para desarrollar el sistema experto de clasificación de espectros estelares.

4.4.1 Adquisición del conocimiento

Para trasladar a una aplicación informática el conocimiento sobre un dominio específico es necesario, obviamente, obtenerlo con anterioridad. Existen dos fuentes principales para adquirir el conocimiento que se utiliza en el desarrollo de un sistema experto: los propios especialistas en el área en cuestión y las diferentes fuentes bibliográficas disponibles (textos científicos, informes, documentación electrónica, etcétera). Los expertos humanos suelen poseer un rango más amplio de conocimientos y estar más actualizados que los documentos, además pueden responder a preguntas específicas y proporcionar diferentes conjuntos de casos prácticos. Sin embargo, su tiempo es costoso y, a no ser que colaboren estrechamente con el proyecto, podrían trabajar incluso en contra de los objetivos de desarrollo del sistema experto. Los documentos son generalmente más baratos de adquirir y fáciles de utilizar, pero incluyen a menudo información muy limitada que no siempre es completamente relevante.

En la adquisición del conocimiento de los expertos destacan dos vertientes metodológicas diferentes: las técnicas adquisicionales, que describen el proceso de interacción con el experto para obtener la información, y los métodos analíticos que puntualizan la forma en que se usa dicha información para derivar las reglas de razonamiento. De igual forma, los métodos adquisicionales pueden presentar bien un enfoque observacional, en el que se contempla al experto resolver problemas reales o simulados, o bien un enfoque introspectivo, en el que se le hace describir en detalle su solución a ejemplos proporcionados por el ingeniero del conocimiento al mismo tiempo que la está obteniendo. Evidentemente, estos dos tipos de técnicas no son mutuamente excluyentes sino que se suelen combinar con el objetivo de obtener la información necesaria para emprender el desarrollo del sistema experto.

Una vez adquirida la información de los expertos, esta debe convertirse en reglas de razonamiento. En este punto se puede recurrir a diferentes métodos, como por ejemplo el del trazado del proceso (*process tracing*) o el análisis de protocolos. El trazado del proceso se basa en un análisis de la transcripción de las sesiones con los expertos buscando caminos manifiestos desde los datos de entrada hasta las decisiones adoptadas. El análisis de proto-

colos consiste en un estudio más detallado de dichas transcripciones, considerando al mismo tiempo otra información relevante sobre el contexto de resolución de problemas; para desarrollar protocolos se observan las entradas de la toma de decisiones, el conocimiento de base y los datos no verbales significativos. En cierto sentido, el análisis de protocolos podría comenzar con un trazado del proceso y luego expandirse hasta adquirir la suficiente información adicional. En algunos casos los citados métodos de análisis permiten obtener directamente sentencias condicionales del tipo IF-THEN que son fácilmente interpretables, pero en otros es necesaria una labor adicional que suele apoyarse en el uso de diferentes herramientas (como por ejemplo la rejilla de repertorio) que asisten a los ingenieros de conocimiento en el proceso de conversión de la información del protocolo en reglas útiles [Gaines 1990].

Debido a que la etapa de adquisición de conocimiento es el principal cuello de botella en el desarrollo de un sistema experto, en los últimos años los esfuerzos de investigación en esta área se han centrado fundamentalmente en el desarrollo de sistemas que automaticen en la medida de lo posible dicha tarea, ayudando esencialmente a los ingenieros de conocimiento a trasladar el conocimiento experto directamente a reglas implementables, de forma que estos puedan dedicarse a otras labores más prioritarias, como puede ser la estructuración y organización del mismo [Mitchell 1997] [Jackson 1998].

Con el fin de llevar a cabo una recopilación lo más completa posible de los criterios que rigen la clasificación espectral de las estrellas, antes de iniciar el desarrollo del sistema basado en el conocimiento, se efectuaron varias rondas de entrevistas con diferentes astrofísicos expertos en dicha área, en las que se estudió cuidadosamente (mediante métodos observacionales e introspectivos) el proceso de razonamiento que siguen para llegar a una conclusión sobre el tipo espectral/clase de luminosidad del objeto que pretenden clasificar. Durante este análisis se explicitaron los principios esenciales que rigen la clasificación espectral, poniéndose de manifiesto que entre los astrónomos versados en clasificación es una práctica común la comparación visual de la intensidad de algunas características de los espectros con los valores típicos registrados para las estrellas de los catálogos guía.

En la técnica manual de clasificación MK los expertos examinan visualmente los espectros y analizan sus diferentes rasgos característicos, obteniendo en la mayoría de los casos una clasificación preliminar de cada estrella que a menudo incluye una primera aproximación global de la temperatura de su superficie (temprana, intermedia, tardía), siendo incluso en algunas ocasiones capaces de especificar ya el tipo espectral y el nivel de luminosidad. A continuación superponen cada espectro con los del catálogo de referencia que corresponden a su mismo tipo (clase global o tipo espectral, según se haya conseguido afinar en la etapa previa), resolviendo con mayor o menor precisión el subtipo espectral y la clase de luminosidad. Los criterios que utilizan los espectroscopistas en este método ma-

nual hacen referencia generalmente a un conjunto determinado de características (índices) presentes o ausentes en determinadas regiones espectrales (bandas moleculares, líneas de absorción, etc.); aunque existen principios generales, las reglas de clasificación específicas son individuales y subjetivas, producto de la experiencia personal que ha adquirido cada experto a lo largo de los años dedicados a la clasificación estelar.

En esta fase de adquisición del conocimiento se recopiló un conjunto muy extenso de criterios de clasificación, procedentes tanto del análisis de las sesiones con los expertos como del estudio minucioso de la documentación disponible sobre el particular [Jaschek 1991] [Worthey 1994] [Gray 2009]. Por medio de la técnica de análisis de protocolos, se llevó a cabo una selección inicial de características morfológicas que influyen en la obtención de la clasificación MK y que son, por tanto, susceptibles de ser incluidas como índices de clasificación en el sistema experto.

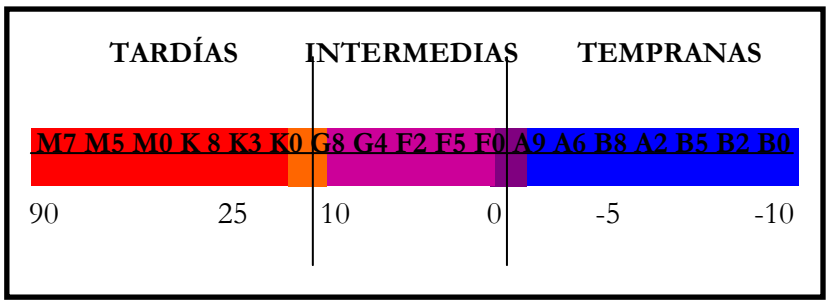


Figura 38. Tipos espectrales que discrimina el índice de clasificación TiO 6225

El procedimiento de cotejo que se desarrolla en la técnica de clasificación tradicional se ha intentado trasladar al sistema automático a través de la estimación y análisis de estos parámetros espectrales seleccionados, delimitándose sus valores característicos en los espectros de referencia. En esta fase de análisis de sensibilidad, previa al diseño del módulo de clasificación, algunos índices considerados a priori pertinentes se descartaron debido a su pobre capacidad real de discriminación y, sin embargo, se incluyeron otros que no se contemplan en el método manual, al menos de forma expresa. Del conjunto original de características morfológicas resultaron adecuados para sintetizar los espectros un total de 25 índices de clasificación (v. tab. 4), quedando totalmente delimitados los distintos tipos, subtipos espectrales y clases de luminosidad que cada uno de ellos es capaz de diferenciar (véase sección 4.3 para más detalles).

A modo de ejemplo ilustrativo de este proceso, en la figura 38 se incluyen las zonas espectrales que discrimina la banda molecular de óxido de titanio situada en la longitud de onda 6225 Å. Como puede observarse, los criterios (reglas) basados en este índice espectral pueden utilizarse para determinar el tipo espectral en estrellas GKM, pues es capaz de

ordenar correctamente estos tipos para las estrellas de los catálogos de referencia; por el contrario, no sería útil en tipos tempranos puesto que algunos de ellos no aparecen en el orden normal, por ejemplo el subtipo B8 aparece después del A2 cuando el orden real en el sistema MK es justamente el contrario. En la figura se han resaltado en naranja y violeta las zonas espectrales intermedias entre tipos globales. En estas zonas el sistema no sería capaz de decidir utilizando esta banda molecular, sino que tendría que apoyarse en otros índices para alcanzar una conclusión concreta.

Una vez establecidos los índices de espectrales idóneos para su inclusión en el sistema experto, las reglas de clasificación resultantes se sometieron de nuevo al escrutinio de los expertos con el objetivo de que estos expresasen su grado de confianza en las mismas. En el proceso tradicional de clasificación estelar ocurre con cierta frecuencia que es necesario tomar decisiones y deducir nuevos hechos a partir de información parcial, incierta, imprecisa o incluso contradictoria; los expertos razonan a veces bajo condiciones de incertidumbre y alcanzan, por tanto, conclusiones condicionadas que incluyen una medida de su credibilidad. Así a los hechos y reglas obtenidos en la fase de adquisición del conocimiento se les incorporó un factor de certeza (*certainty factor*) que expresa cómo de preciso, verídico o fidedigno consideran los expertos un predicado.

Como se verá a continuación, los resultados de este primer proceso de verificación de los criterios de clasificación efectuado sobre los catálogos de referencia, condicionarán en gran medida la definición de las diferentes variables difusas, conjuntos difusos y funciones de pertenencia del sistema experto de clasificación espectral.

4.4.2 Representación del conocimiento

Dado que los sistemas expertos resuelven problemas que típicamente requieren de la pericia humana, sus inferencias tienen que basarse necesariamente en conocimiento experto, bien proporcionado por los especialistas o bien extraído de experiencias previas con casos reales. Desde este punto de vista, pueden tratarse por tanto como sistemas basados en el conocimiento y, de acuerdo a esta definición, incluirían dos componentes principales: la base de conocimiento, que contiene el conocimiento específico del dominio (reglas, hechos, factores de certeza, etc.) y el motor de inferencia o metodología para razonar, que es el que lleva a cabo las deducciones.

La base de conocimiento aloja la totalidad de los hechos, reglas y procedimientos específicos que son fundamentales para la solución de los problemas relativos al campo del saber modelizado; esta información se formaliza en un lenguaje específico de representación del conocimiento, en el cual el experto puede definir su propio vocabulario técnico. Al

contrario de lo que ocurre en los métodos computacionales clásicos, en la base de conocimiento la información se procesa tal como llega al sistema, pues el orden no influye en los resultados obtenidos: cada elemento de conocimiento es comprensible por sí mismo considerado de forma aislada y, por consiguiente, no será necesario hacer alusión al contexto en el cual está inserto. Una base de conocimiento ideal debería ser coherente, rápida, modular, fácil de desarrollar y de mantener.

La base de hechos constituye la sección de la base de conocimiento en la que se albergan los datos propios correspondientes a los problemas que se desea tratar con la ayuda del sistema experto. Los hechos representan la estructura dinámica del conocimiento debido a que su número puede verse incrementado a medida que se van relacionando las diferentes reglas de razonamiento; al principio del ciclo de una ejecución típica del sistema, la base de hechos dispone únicamente de los datos iniciales introducidos por los usuarios, pero a medida que va actuando el motor de inferencia esta contendrá las cadenas de inducciones y deducciones que el sistema vaya originando al aplicar las reglas necesarias para alcanzar las conclusiones solicitadas. Por lo tanto, aparte de ser la memoria de trabajo del sistema, la base de hechos puede desempeñar también un papel de memoria auxiliar. La memoria de trabajo retiene todos los resultados intermedios permitiendo conservar el rastro de los razonamientos llevados a cabo, por lo que podría emplearse para explicar el origen de las informaciones deducidas en el transcurso de una sesión de trabajo o para realizar incluso la descripción del comportamiento del propio sistema experto. Hay algunos autores que consideran la base de hechos de forma independiente de la base de conocimiento, agrupando en ella únicamente el conjunto de información invariable de una a otra resolución [Russel 2002].

El diseño de la base de conocimiento debe seguir una sintaxis y una semántica que sean apropiadas para el motor de inferencia que se haya seleccionado. En otras palabras, es necesario expresar de manera formal el conocimiento adquirido en la etapa anterior de modo que sea inteligible para el sistema experto. Es imprescindible que esta codificación del conocimiento sea sencilla, independiente, fácil de modificar, transparente (justificación de soluciones y explicación de los procesos), relacional y potente (con poder expresivo y eficiencia de cálculo). En el contexto del área de Inteligencia Artificial, las redes semánticas, las *frames* y las reglas de producción constituyen posibles paradigmas válidos para representar el conocimiento [Winston 1992].

En la base de hechos del sistema experto formalizado para efectuar la clasificación estelar MK no supervisada, se almacena y estructura todo el cocimiento descriptivo referente a los espectros, así como la información necesaria para iniciar el proceso de razonamiento. Estas propiedades características de cada espectro (nombre HD de la estrella, fuente de la que se ha obtenido, valor de los índices espectrales, etc.) se representan formalmen-

te por medio de *frames* [Brachman 2004], es decir, objetos y propiedades estructurados por niveles.

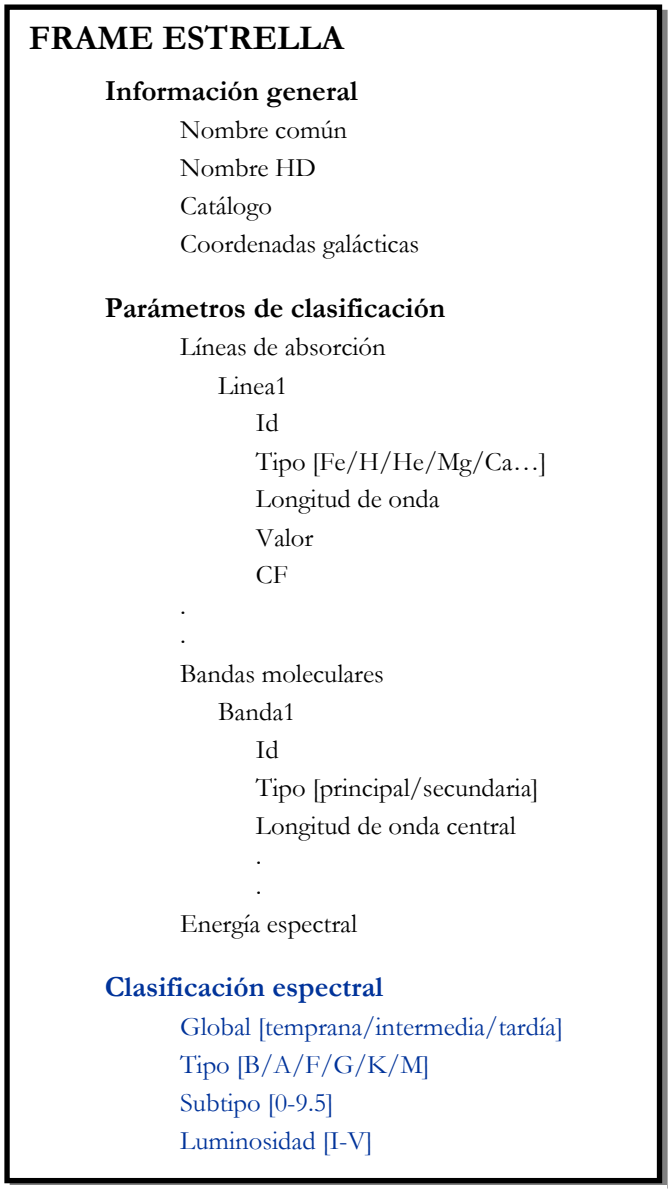


Figura 39. Representación formal del conocimiento descriptivo de la clasificación espectral por medio de *frames*

El creciente uso en los últimos años de metodologías orientadas a objetos en el desarrollo de software ha tenido su repercusión también en el campo de los sistemas expertos; la información en estos sistemas puede representarse usando el concepto de objeto para capturar tanto el conocimiento declarativo como el procedimental de un dominio determinado. En el área de desarrollo de sistemas expertos, la técnica que emplea la tecnología de objetos se denomina *frames*, y se ha convertido rápidamente en un método popular y asequible de representación del conocimiento, pues estas proporcionan varios de los bene-

ficios que típicamente se les han atribuido a los sistemas orientados a objetos: herencia, facilidad de mantenimiento, reutilización, agilidad en el desarrollo, etc. [Durkin 1994].

Este modelo de representación se eligió para la clasificación estelar automática no solamente por ser el más sencillo, conveniente y adecuado para trasladar los resultados del análisis morfológico de los espectros al sistema experto de clasificación, sino porque al mismo tiempo permite establecer en cierto modo una equivalencia entre datos de análisis y conocimiento. La información sobre el espectro así codificada puede dividirse en dos categorías genéricas:

- Información general: todas las características de los espectros que se conocen previamente a la realización del análisis morfológico de los mismos. Como ejemplo se puede citar el nombre común de la estrella a la que pertenecen, las coordenadas galácticas de la misma, el catálogo del que se han obtenido, la clasificación MK que se les asigna en dicho catálogo, etc.
- Índices de clasificación: valores de los distintos parámetros de clasificación (bandas moleculares, líneas de absorción, etcétera), calculados en el módulo de análisis morfológico a través de los algoritmos implementados para tal fin.

Las propiedades genéricas de los espectros se obtienen la mayoría de las veces consultando la cabecera del fichero en formato FITS que suele contener los datos de los mismos, aunque en determinadas ocasiones esta información se recupera de las diferentes bases de datos estelares disponibles *online* (SIMBAD, ADS, etcétera). El valor de los distintos índices de clasificación ya se ha estimado en el módulo de análisis (v. sec. 3.2), con lo cual únicamente será necesario almacenar dicha información en la base de conocimiento para iniciar el proceso de razonamiento y obtener una primera clasificación del espectro, de forma similar a como lo haría manualmente un astrónomo versado en clasificación.

En la figura 39 se muestra un ejemplo de una de las *frames* utilizadas para representar el conocimiento en la base de hechos del sistema experto de clasificación MK. En negro se indica el conocimiento disponible al comienzo del proceso de clasificación, mientras que en azul se ha resaltado la información que estará almacenada en la memoria de trabajo solamente cuando concluya el proceso de razonamiento.

Además de propiedades, las *frames* pueden contener procedimientos (métodos, en la terminología de orientación a objetos) asociados a cada una de ellas que les permiten actuar sobre los datos que incluyen para realizar cambios y/o actualizaciones cuando sean necesarios, dando cabida de este modo al conocimiento de tipo procedimental. Sin embargo en muchas ocasiones, como es el caso que nos ocupa, en la representación del conocimiento

las *frames* meramente declarativas se combinan con reglas de producción clásicas con el objetivo de capturar toda la complejidad del domino de aplicación.

Un aspecto fundamental a la hora de diseñar un sistema basado en conocimiento es el de la representación de la información relativa a los procesos que se llevan a cabo en el área de aplicación del mismo (conocimiento procedimental). En este sentido, y dadas las características del proceso a implementar (fruto de la experiencia, con reglas heurísticas de clasificación, donde se trabaja con información contextual, en el que conviven datos numéricos y simbólicos, no existen modelos deterministas, etc.), se ha considerado que la representación basada en reglas de producción podría ser la más adecuada para integrar todo el conocimiento que se ha obtenido de los expertos astrofísicos concerniente a la técnica de clasificación estelar.

Las reglas de producción constituyen uno de los métodos más acreditados y extensamente utilizados para construir bases de conocimiento en los sistemas expertos. Una regla es una estructura condicional o implicación lógica que relaciona información contenida en la parte del antecedente (causas, condiciones) con otra información incluida en la parte del consecuente (efectos, consecuencias). El conocimiento relativo al proceso de toma de decisiones se transcribe en forma de construcciones simples del tipo IF-THEN. Cuando todas las cláusulas de la parte IF (antecedente) se satisfacen, la regla se dispara y se añade el consecuente (cláusulas de la parte THEN) al conocimiento existente en la memoria de trabajo del sistema (a veces a este mecanismo se le denomina instanciación de la regla). Formalmente, una regla se dispara si y sólo si el antecedente es verdadero y el consecuente se instancia [Ignizio 1990].

La gran popularidad alcanzada por las reglas de producción como modo de representación del conocimiento ha devenido principalmente por sus múltiples ventajas. En primer lugar cabe destacar su modularidad, ya que cada regla de la base de reglas se mantiene de forma separada a las demás; de este modo, la adición o supresión de reglas puede realizarse de manera sencilla y sin excesivo coste, aunque es preciso efectuar estas modificaciones con precaución ya que la lógica del proceso de razonamiento podría verse alterada. Una segunda ventaja del uso de reglas es su estructura uniforme, pues todas presentan la misma forma: uno o varios antecedentes unidos con operadores lógicos (AND/OR/NOT) y uno o más consecuentes. Además, los sistemas basados en reglas proporcionan un estilo natural de representar el conocimiento, cercano a los mecanismos de razonamiento humano: muchos expertos resuelven los problemas basándose en la combinación de fragmentos de evidencia o hechos conocidos (antecedente de las reglas), cuya unión les conduce a inferir otros nuevos (i. e. el consecuente de las reglas); por lo tanto, el tiempo requerido para aprender a desarrollar bases de reglas puede reducirse al mínimo. A todo lo anterior habría que añadir que en la actualidad se dispone de muchos paquetes de desarrollo de sistemas

expertos (denominados *shells*) que emplean las reglas de producción como método básico de representación del conocimiento [Jackson 1998].

Aunque, como se ha enunciado, las reglas de producción ofrecen ciertas ventajas sobre las otras formas de representación del conocimiento, también presentan algunos inconvenientes que es necesario tener en cuenta. Una base de reglas puede volverse rápidamente inmanejable si no se implementa adecuadamente, por eso es preciso mantener una documentación escrupulosa, detallada y actualizada tanto de las reglas individuales como de la interacción entre ellas. Asimismo, en dominios muy complejos este modelo de representación podría producir sistemas ineficientes, pues el motor de inferencia puede ralentizar el procesamiento debido a las búsquedas exhaustivas que lleva a cabo en la base de reglas para encontrar aquellas que podrían satisfacerse dado el estado de conocimiento del sistema. Finalmente cabe mencionar que, aunque las reglas de producción siguen siendo el método de representación del conocimiento más difundido, la construcción de reglas apropiadas es todavía hoy más un arte que una ciencia, si bien se han desarrollado técnicas estructuradas que pretenden facilitar dicha tarea [Pedersen 1989] [Souza 2002] [Ligeza 2006].

La base de reglas del sistema experto de clasificación estelar no supervisada está formada por la implementación de las reglas de producción que rigen el proceso de razonamiento en el campo de la clasificación espectral MK, y en ella el conocimiento procedimental se representa de forma objetiva mediante relaciones jerárquicas entre diferentes índices espectrales cuyo valor es fácilmente medible en los espectros. En esta área de la Astrofísica, los expertos espectroscopistas siguen un razonamiento basado en el encadenamiento sucesivo (*forward reasoning*) de diferentes criterios de clasificación para obtener clasificaciones MK a partir del análisis de los espectros estelares. Por ejemplo, una línea típica de razonamiento podría ser: "si la banda molecular de TiO situada en la zona de 7100 Å es ancha y muy profunda entonces la estrella podría pertenecer a tipos espectrales tardíos, y en concreto al tipo M, pero tendríamos que estudiar la profundidad de la banda molecular en 6225 Å para asegurarnos y además, sería útil comprobar también la ausencia de líneas metálicas". Así, esta clase de razonamientos y especulaciones se pueden trasladar al sistema experto en forma de reglas de tipo IF-THEN, cuyas condiciones harán referencia a los valores de los índices espectrales disponibles en la memoria de trabajo, mientras que las conclusiones aludirán a los diferentes niveles de clasificación espectral considerados: global (tempranas, intermedias, tardías), tipo espectral (B, A, F, G, K, M), subtipo espectral (0-9) y clase de luminosidad (I-V).

En este punto es preciso indicar que el tipo de razonamiento no sería categórico, sino que parece más adecuado dotar a las reglas de producción de la posibilidad de propagar un factor de certeza. La incertidumbre es un elemento importante a tener en cuenta en la modelización de las técnicas de resolución de problemas, pues muy pocos casos reales

pueden solventarse utilizando estrategias de razonamiento que operen bajo condiciones de absoluta certeza; es más, ni siquiera los expertos con mayor destreza son capaces de adoptar siempre decisiones con total precisión.

Las reglas de razonamiento pueden encapsular relaciones no totalmente ciertas, pues la mayoría no son más que una representación aproximada de una realidad compleja y, por lo tanto, conllevan cierto error asociado a la correspondencia de sus entradas con sus salidas. Una segunda fuente habitual de incertidumbre en este tipo de sistemas es la concerniente a la evidencia en los antecedentes de las reglas, pues estos pueden proceder de mediciones que propaguen cierto error o incluso de interpretaciones subjetivas de la realidad, por lo que aun cuando la regla en sí misma no incorpore demasiada incertidumbre, la evidencia podría ser altamente incierta. Finalmente, a veces los términos lingüísticos utilizados en la propia regla de razonamiento tienen un significado impreciso, solamente interpretable en toda su extensión por los expertos del área. Para ilustrar lo anterior con un ejemplo consideremos el dominio de diagnosis médica, en el que frecuentemente se toman decisiones basadas en reglas de razonamiento del tipo "si el paciente tiene una temperatura corporal elevada y además presenta cefalea severa y dolores musculares, entonces es muy probable que tenga un virus gripal". En primer lugar, la propia regla en sí misma oculta una implicación no totalmente verdadera, ya que un paciente que se haya quedado dormido bajo el sol en una postura incómoda presentará, además de quemaduras, síntomas similares a los anteriores pero asociados a la insolación (fiebre alta, dolor de cabeza, etcétera). Por otro lado, la evidencia relativa a la cefalea severa puede no ser del todo cierta, ya que su diagnóstico podría proceder de un aprendiz poco experimentado; más aún, diferentes profesionales sanitarios con suficiente experiencia podrían diferir a la hora de realizar inferencias subjetivas como estas. Para finalizar, los términos en los que está redactada la regla de conocimiento ("elevada", "severa", "muy probable") pueden ser interpretados de forma muy diferente en función del experto que esté analizando el caso médico.

Las técnicas computacionales, y entre ellas los sistemas expertos, requieren métodos algorítmicos para ser capaces de gestionar la incertidumbre presente en las sentencias del lenguaje natural. A pesar de la considerable actividad de investigación desarrollada en este campo en años recientes, el razonamiento bajo condiciones de incertidumbre continúa siendo actualmente una tarea difícil, sobre todo por la necesidad de aplicar métodos rigurosos y al mismo tiempo fáciles de implementar. Desafortunadamente, estos dos objetivos tienden a entrar en conflicto en el dominio de la gestión de la incertidumbre: los métodos más rigurosos y justificables son también los más difíciles de implementar y, por otra parte, las técnicas que se aplican con mayor frecuencia tienen poco o ningún fundamento teórico. Consecuentemente, en el diseño de sistemas expertos se deben evaluar cuidadosamente las características relativas a la situación particular de desarrollo así como los objetivos perse-

guidos en el diseño del sistema, de modo que finalmente se opte por un método de gestión de la incertidumbre acorde a los mismos.

En el área de la clasificación MK de las estrellas, la incertidumbre puede proceder de diferentes fuentes: pérdida de información relevante en los espectros, errores instrumentales o inclusión de ruido en las medidas científicas, subjetividad observacional, incertidumbre en los juicios emitidos, no completitud de la teoría del dominio, eventos aleatorios, etc. Los expertos suelen hacer asunciones sobre la información cuando ésta no está completamente disponible, adoptando frecuentemente decisiones que se encuentran sesgadas por factores de incertidumbre y situaciones de razonamiento parcial sobre información inexacta o incompleta. Por ejemplo, los espectros pueden no presentar el rango completo de longitudes de onda deseable para obtener clasificaciones MK, los instrumentos de medida o los efectos de la atmósfera pueden provocar un desplazamiento de las características espectrales, la resolución espectral puede no ser la más adecuada para obtener estimaciones correctas de los índices de clasificación, etc.

Después de analizar las características y aportaciones de las distintas técnicas que han demostrado su eficiencia práctica en la gestión de la incertidumbre (inferencia bayesiana, teoría Dempster-Shafer, factores de certeza, redes Petri, etc.), para el sistema experto de clasificación estelar se ha optado por utilizar la metodología de reglas de producción clásica incorporando además los factores de certidumbre que propusieron originalmente los autores [Shortliffe 1984], asociándose estos tanto a los índices espectrales (o evidencias de las reglas) como a los propios criterios de clasificación; así, junto a cada regla de clasificación, se almacenará también en la base de reglas del sistema experto el grado de veracidad de los consecuentes que se obtienen como resultado de la aplicación o instanciación de dicha regla de producción.

En el diseño de uno de los sistemas expertos pioneros (MYCIN), E. H. Shortliffe y B. G. Buchanan adoptaron los factores de certeza como esquema teórico para gestionar la incertidumbre, inspirándose en la teoría de la confirmación de Carnap [Carnap 1967]. Su objetivo original consistía en el desarrollo de un método fácilmente trasladable a un ordenador con el que manejar la incertidumbre inherente a la selección de tratamientos recomendados a pacientes con infecciones bacterianas; pretendían conseguir una técnica que al mismo tiempo permitiese realizar estimaciones rápidas y sencillas de la incertidumbre y facilitase las modificaciones necesarias cuando se incorporasen nuevas reglas a la base de conocimiento. Posteriormente, como ocurre en el enfoque basado en la teoría de la evidencia, se interesaron también por la descripción de situaciones que comprendiesen un conjunto incompleto de hipótesis. Siguiendo entonces la formulación original de los autores, el factor de certeza CF (h, e) para la hipótesis h una vez que ocurre la evidencia e, vendrá definido por la diferencia entre la medida de la confianza (o aumento de la creencia) en la

hipótesis h dada la evidencia e, MB (h, e) y la medida de la desconfianza (o disminución de la creencia) en la hipótesis h dada dicha evidencia, MD (h, e). Estas dos medidas son relativas y pueden definirse en términos de probabilidades condicionales como sigue:

$$MB(h,e) = \begin{cases} 1 & \text{si } P(h) = 1 \\ \max\left\{0, \dfrac{P(h|e) - P(h)}{1 - P(h)}\right\} & \text{en cualquier otro caso} \end{cases}$$

$$MD(h,e) = \begin{cases} 1 & \text{si } P(h) = 0 \\ \max\left\{0, \dfrac{P(h) - P(h|e)}{P(h)}\right\} & \text{en cualquier otro caso} \end{cases}$$

Y finalmente:

$$CF(h,e) = MB(h,e) - MD(h,e)$$

De estas definiciones se deduce que ambas variables pueden tomar valores en el intervalo [0, 1]; MB (*Measure of Belief*) será 0 cuando la evidencia niegue totalmente la hipótesis y, consecuentemente, MD (*Measure of Disbelief*) será 0 cuando la confirme. Puesto que el factor de certeza resulta de la diferencia de las dos medidas anteriores, su valor estará comprendido en el intervalo [-1, 1], y con él se expresará el grado en que la evidencia e refuerza (si es positivo) o debilita (negativo) la creencia en la hipótesis h. Así un factor de certeza de +1 sería indicativo de una creencia absoluta en la hipótesis, mientras que un factor de certeza de -1 significaría total incredulidad; de la misma forma, un valor alrededor de 0 sugeriría que la evidencia no tiene demasiada influencia en la confirmación o negación de la hipótesis.

Es preciso indicar también que, debido a que las reglas de producción suelen estar formadas por varios antecedentes (hechos o evidencias) unidos mediante operadores lógicos (AND/OR), la metodología de Shortliffe y Buchanan incluye una técnica en la que se combinan los factores de certeza asociados a cada condición con el objetivo de obtener un factor de certidumbre para la premisa completa. Esto es:

$$CF(h1 \text{ and } h2, e) = \min\{CF(h1,e), CF(h2,e)\}$$
$$CF(h1 \text{ or } h2, e) = \max\{CF(h1,e), CF(h2,e)\}$$

Una vez que se ha estimado el factor de certeza de los diferentes antecedentes de una regla de producción, este valor se multiplicará por el CF de la regla (si se hubiese especificado) para obtener el CF final de la conclusión.

En el sistema experto MYCIN, Shortliffe y Buchanan diseñaron también un mecanismo para combinar los factores de certeza de las diferentes reglas. Considerando la situación típica en la que dos reglas distintas proporcionan evidencias para una misma hipótesis simple, h y denotando la evidencia de cada regla como e_1 y e_2, entonces las medidas de confianza y desconfianza resultantes de combinar ambos fragmentos de evidencia serían:

$$MB(h, e1 \infty e2) = \begin{cases} 0 & \text{si } MD(h, e1 \infty e2) = 1 \\ MB(h, e1) + MB(h, e2) \cdot (1 - MB(h, e1)) & \text{en cualquier otro caso} \end{cases}$$

$$MD(h, e1 \infty e2) = \begin{cases} 0 & \text{si } MB(h, e1 \infty e2) = 1 \\ MD(h, e1) + MD(h, e2) \cdot (1 - MD(h, e1)) & \text{en cualquier otro caso} \end{cases}$$

Y finalmente el factor de certeza de la combinación de ambas evidencias se calcularía como sigue:

$$CF(h, e1 \infty e2) = MB(h, e1 \infty e2) - MD(h, e1 \infty e2)$$

Aunque este modelo de gestión de la incertidumbre ha persistido en muchos sistemas expertos, a lo largo de los años se han hecho algunas revisiones y observaciones. El cambio más relevante ha consistido en la modificación de estas funciones de combinación, realizado por W. Van Melle quien las incorporó en EMYCIN, la herramienta prototípica de construcción de sistemas expertos. Esta redefinición se llevó a cabo principalmente para contrarrestar el efecto de descompensación que se produce cuando, utilizando la ecuación de combinación de reglas original, una única evidencia negativa con un MD elevado neutraliza el valor total de MB resultante de la acumulación de varias evidencias positivas (y viceversa). Es decir, considerando por ejemplo un conjunto de varias reglas que refuercen significativamente la misma hipótesis (con MB individuales en el intervalo [0.7, 0.9]), el valor de MB total para la combinación de estas reglas tendería a 0.99; si existiese una sola regla que debilitase la hipótesis mencionada con un MD de 0.8, entonces el valor final del factor de certidumbre para la hipótesis mencionada sería CF = MB-MD = 0.999-0.8 = 0.199, o sea, inusitadamente bajo. Obviamente este comportamiento es poco intuitivo e incluso ocasionalmente puede conducir al sistema experto a realizar inferencias incorrectas, pues una única evidencia negativa podría negar la evidencia positiva de cualquier número de reglas que la confirmen. Por todo ello, para suavizar el efecto descrito, se modificó tanto la

definición de factor de certidumbre como las funciones utilizadas para combinar las diferentes reglas, quedando finalmente como sigue:

$$CF(h, e) = \frac{MB(h, e) - MD(h, e)}{1 - \min\{MB(h, e), MD(h, e)\}}$$

$$CF(h, e1 \infty e2) = \begin{cases} CF(h, e1) + CF(h, e2) - CF(h, e1) \cdot CF(h, e2) & \text{si } CF(h, ei) > 0, i = 1, 2 \\ CF(h, e1) + CF(h, e2) + CF(h, e1) \cdot CF(h, e2) & \text{si } CF(h, ei) < 0, i = 1, 2 \\ \dfrac{CF(h, e1) + CF(h, e2)}{1 - \min\{|CF(h, e1)|, |CF(h, e2)|\}} & \text{si } CF(h, e1) \cdot CF(h, e2) \leq 0 \end{cases}$$

Con estas nuevas definiciones, el factor de certeza es más robusto, puesto que no es tan sensible a la variación con una única evidencia. Además, la función de combinación es la misma cuando los factores de certeza de las diferentes reglas son del mismo signo; será únicamente cuando se combinen dos factores de certeza de diferente signo cuando se apreciará el cambio. En el ejemplo anterior, el factor de certeza final sería ahora CF = (0.99-0.8)/(1-0.8) = 0.19/0.2 = 0.95, lo cual es mucho más consistente e intuitivo. Otra de las ventajas de este cambio en la combinación de los factores de certeza de diferentes reglas es que preserva la conmutatividad sin necesidad de separar las evidencias negativas y las positivas para poder evaluarlas posteriormente; es decir, el orden en el que se activen las reglas no afectará al cómputo final del factor de certeza. Así, en los sistemas expertos modernos que utilizan factores de certeza como método de gestión de la incertidumbre, en vez de almacenar las dos medidas de confianza y desconfianza se guarda únicamente el valor del factor de certeza acumulativo para cada hipótesis, y se combina este con las nuevas evidencias que van surgiendo a medida que se van ejecutando las diferentes reglas de la base de conocimiento [Giarratano 2004].

Tomando como ejemplo el dominio de la clasificación espectral para ilustrar todo lo anterior, tres reglas significativas que se podrían incluir en la base de conocimiento para tratar de determinar el tipo espectral de una estrella serían:

```
R1: IF   ((banda TiO 7100 muy profunda) AND (no existe Hβ 4861))
    OR   (suma bandas>100)
    THEN (estrella tardía [CF=0.8]) AND (subtipo M79 [CF=0.6])

R2: IF   (estrella tardía) AND (banda TiO 6225 profunda)
    THEN (tipo M [CF=0.8])

R3: IF   (profundidad banda TiO 4950>=20)
    THEN (tipo M [CF=0.9])
```

Asumiendo que en una ejecución normal del sistema experto en un instante determinado se produjeran las evidencias: `E1=banda 7100 muy profunda (CF=0.5)`, `E2=no existe H 4861 (CF=0.6)`, `E3=suma bandas>100 (CF=0.9)`, `E4=banda 6225 profunda (CF=0.7)`, `E5=profundidad banda 4950 >=20 (CF=-0.9)`. Entonces, el cómputo final del factor de certeza para las diferentes hipótesis referidas en las reglas anteriores (`H1=estrella tardía`, `H2=subtipo M79`, `H3=tipo M`) sería:

`R1`:

CF (E1 and E2) = min {0.5, 0.6} = 0.5
CF (A1) = CF ((E1 and E2) or E3) = max {0.5, 0.9} = 0.9
CF (H1) = CF (A1) · 0.8 = 0.9 · 0.8 = 0.72
CF (H2) = CF (A1) · 0.6 = 0.9 · 0.6 = 0.54

`R2`:

CF (A2) = CF (H1 and E4) = min {0.72, 0.7} = 0.7
CF_1 (H3) = CF (A2) · 0.8 = 0.7 · 0.8 = 0.56

`R3`:

CF (A3) = CF (E5) = -0.9
CF_2 (H3) = CF (A3) · 0.9 = -0.9 · 0.9 =-0.81

$CF_{final}(H3)=(CF_1+CF_2)/(1-\min\{|CF_1|,|CF_2|\})=(0.56-0.81)/(1-0.56)=-0.568$

Como se ha indicado, los factores de certeza se utilizan para expresar el grado de precisión, veracidad o fiabilidad que los expertos otorgan a los predicados implicados en sus procesos de razonamiento y, por lo tanto, no son más que juicios personales sobre la relevancia de una evidencia determinada. No representan ni una probabilidad (porque, por ejemplo, pueden tomar valores negativos) ni un valor de verdad, sino que sirven para contextos en los que un experto puede querer expresar que un dato proporciona una evidencia para una conclusión, pero no es definitiva. Como se ha visto, pueden aplicarse tanto a los hechos o evidencias como a las propias reglas completas e incluso a las conclusiones de dichas reglas. Además, suelen estimarse ad hoc para cada sistema experto diseñado, ajustándose mediante un proceso de ensayo y error.

Los factores de certeza constituyen un método conveniente para modelizar la incertidumbre en el sistema experto diseñado para automatizar la clasificación MK de las estrellas, pues gracias a ellos se logra simular con bastante exactitud el tipo de diagnósticos que elaboran los expertos en este campo. En la implementación de tal sistema, se ajustó el valor de los factores de certeza de cada regla mediante algoritmos de aprendizaje y técnicas del tipo ensayo-error. En primer lugar, se calcularon los valores de certeza de cada regla de clasificación seleccionada utilizando el método *sleeping-experts* para combinar adecuadamente las estimaciones subjetivas obtenidas de los diferentes expertos astrofísicos [Blum 1992]

[Freund 1997]. Estos valores iniciales se fueron actualizando dinámicamente a medida que se estudiaban los resultados del sistema sobre los diferentes espectros de prueba, empleando para ello primeramente un algoritmo de aprendizaje basado en el análisis de las conclusiones del sistema experto similar al propuesto por W. Qu y K. Shirai para categorizar fragmentos de texto [Qu 2003]; finalmente, en fases más avanzadas del desarrollo del sistema híbrido de clasificación, se diseñó un algoritmo ad hoc para ajustar definitivamente el valor de los diferentes factores de certeza, el cual reutiliza los pesos de salida de las redes de neuronas artificiales implementadas para la clasificación y cuyos detalles se expondrán subsiguientemente (v. sec. 4.4.5).

En los albores del diseño de sistemas expertos se propusieron diferentes esquemas para la representación y manejo del conocimiento afectado de incertidumbre. Los modelos pioneros como el descrito fueron rápidamente superados por métodos con una base matemática más sólida. No obstante, la gestión de la incertidumbre mediante factores de certeza continua vigente hoy en día pues corrige algunos de los muchos problemas observados en otros métodos posteriores (como por ejemplo el basado en la inferencia bayesiana [Pearl 1988]). En particular, los factores de certeza facilitan soluciones rápidamente trasladables a un ordenador a través de un conjunto sencillo de reglas de combinación como el que se ha descrito; debido a que se asocian a las reglas, se separan por tanto de los métodos utilizados para combinar la evidencia, proporcionando una forma fácil de extender la base de conocimiento. Además, todo el esfuerzo de cálculo se reduce drásticamente a la estimación de un valor por cada proposición de cada regla, lo cual es claramente más manejable que el gran número de estimaciones que es necesario realizar en la inferencia bayesiana [Pearl 1988] o el crecimiento exponencial de las estimaciones en el enfoque de Dempster-Shafer [Shafer 1976]. Sin embargo, el mayor inconveniente de este método sigue siendo la falta de una base teórica o formal, pues a pesar de que pueden expresarse en términos de probabilidades condicionales, la definición de los factores de certeza por sí mismos no conduce a un valor interpretable y su uso podría en ocasiones llevar al sistema a alcanzar resultados extraños e ininteligibles. Recientemente, algunos estudios han mostrado que en los modelos prácticos de redes bayesianas aparecen con frecuencia estructuras de tipo similar a los factores de certeza como asunciones independientes y, de esta forma, los teóricos partidarios de las redes bayesianas han introducido de nuevo de manera involuntaria este modelo de gestión de la incertidumbre [Lucas 2001].

El razonamiento humano, además de incertidumbre, puede manejar de forma apropiada conceptos vagos, inexactos o imprecisos. La lógica difusa proporciona un marco adecuado para modelizar la imprecisión que caracteriza el proceso de percepción y el pensamiento humano. En el área de sistemas expertos, los conjuntos difusos se propusieron más con el objetivo de tratar la imprecisión que de gestionar la incertidumbre, pues muchos

sistemas usan reglas basadas en expresiones de lenguaje natural que son altamente imprecisas en lugar de inciertas, como ocurría con las expresiones "elevada" o "severa" del ejemplo anterior de diagnosis médica; de esta forma, es posible utilizar los conjuntos difusos en los sistemas expertos como un enfoque para cuantificar la imprecisión en las premisas de dichas reglas.

En el sistema experto propuesto para realizar la clasificación no supervisada de las estrellas, además de factores de certeza, se han incorporado a la base de conocimiento variables difusas, conjuntos difusos y funciones de pertenencia contextualizadas para cada tipo espectral/clase de luminosidad, con el objetivo de gestionar la imprecisión latente en los criterios de clasificación sobre los que se fundamenta la implementación de la base de reglas del sistema.

Los conjuntos difusos fueron propuestos originariamente por Lofti Zadeh como un enfoque para modificar la noción de pertenencia estricta a los conjuntos clásicos. En las matemáticas tradicionales, un conjunto contiene o no un elemento específico, por ejemplo el conjunto de enteros contiene claramente el número 8 pero no el 8.5. Al proponer la teoría difusa, el profesor Zadeh argumentó que algunos conjuntos no son tan concisos como lo es el de los números enteros y, consecuentemente, determinar la pertenencia de algunos elementos a dichos conjuntos no es tan trivial [Zadeh 1965]. Por ejemplo, sin duda el jugador de baloncesto Kobe Bryant (1.98 m) pertenecerá al conjunto de personas altas, sin embargo la pertenencia del jugador de fútbol Lionel Messi (1.69 m) a este mismo conjunto podría suscitar discusión: las discrepancias se centrarían claramente en la definición del concepto "persona alta", pues por sí mismo este término no admite una interpretación precisa.

Un conjunto en el universo U es, desde un punto de vista intuitivo, una colección de objetos tal que es posible decidir categóricamente cuando un objeto del universo está o no en dicha colección. Abstrayendo la noción de conjunto, se puede considerar que es exactamente una función del universo U en el conjunto de valores [0, 1] que asocia precisamente el valor 1 a los objetos que están en el conjunto y el valor 0 a los que no pertenecen al mismo. Siguiendo esta definición, un conjunto difuso C será también una función que asocia a cada objeto del universo un valor en el intervalo [0, 1], de tal forma que si x es un objeto en el universo e y = C(x) es el valor asociado a x, se dice que y es el grado de pertenencia del objeto x al conjunto difuso C.

Formalmente, sea X un espacio genérico de objetos y $x \in X$ un elemento genérico de X, entonces un conjunto difuso, $C \subseteq X$, se define como un conjunto de pares ordenados de la forma $C = \{(x, mf_C(x)) \mid x \in X\}$, donde $mf_C(x)$ sería la función de pertenencia (*membership function*) para el conjunto difuso C. Un valor $mf_C(x) = 0$ indicaría que el elemento x

no es un miembro del conjunto mientras que un valor $mf_C(x) = 1$ señalaría su pertenencia absoluta al mismo; los valores intermedios muestran el grado en que cada elemento x pertenece al conjunto difuso considerado. Obviamente, la definición anterior es una simple extensión de un conjunto clásico en el que la función característica puede presentar cualquier valor en el intervalo [0, 1], así pues, todo conjunto en el sentido usual será también un conjunto difuso.

Un conjunto difuso queda entonces completamente caracterizado por su función de pertenencia (*membership function*, $mf_C(x)$) [Zadeh 1965]. Algunas de las funciones de transferencia que se emplean más habitualmente para expresar el grado de pertenencia de los diferentes elementos a un conjunto difuso determinado son:

- Función de transferencia triangular: se define por tres parámetros ($a \le b \le c$) que determinan los valores de x para los tres vértices de un triángulo de la función de pertenencia. Esto es:

$$\text{trimf}(x; a, b, c) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \le a \\ \dfrac{x-a}{b-a} & \text{si } a \le x \le b \\ \dfrac{c-x}{c-b} & \text{si } b \le x \le c \\ 0 & \text{si } c \le x \end{cases}$$

- Función de transferencia trapezoidal: se especifica mediante cuatro parámetros ($a \le b \le c \le d$) que se corresponden con los valores de x para los cuatro vértices de un trapecio. Matemáticamente:

$$\text{trapmf}(x; a, b, c, d) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \le a \\ \dfrac{x-a}{b-a} & \text{si } a \le x \le b \\ 1 & \text{si } b \le x \le c \\ \dfrac{d-x}{d-c} & \text{si } c \le x \le d \\ 0 & \text{si } d \le x \end{cases}$$

Las funciones de pertenencia triangular y trapezoidal se han utilizado extensamente, especialmente en aplicaciones de tiempo real, debido sobre todo a la sencillez de sus fórmulas y a su eficiencia computacional. Sin embargo, ambas funciones son bastante abruptas en los vértices especificados por los parámetros, por lo que se han definido funciones no lineales, con una variación más gradual, como las que se detallan a continuación:

- Función de transferencia gaussiana: se define mediante dos parámetros (c, σ) y presenta la forma de una campana en la que c se refiere al centro y σ representa su anchura. Esto es:

$$\text{gaussmf}(x; c, \sigma) = e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-c}{\sigma}\right)^2}$$

- Función de transferencia de Cauchy o campana generalizada: se especifica a través de tres parámetros (a, b, c) y presenta también la forma de una campana donde a y c determinan el ancho y el centro, respectivamente, mientras que b especifica las pendientes en los puntos de cruce. Este último parámetro suele ser positivo, no obstante un valor negativo generaría una función de pertenencia con forma de campana invertida. Esta función es una generalización directa de la función de distribución de probabilidad de Cauchy, esto es:

$$\text{gbellmf}(x; a, b, c) = \frac{1}{1 + \left|\frac{x-c}{a}\right|^{2b}}$$

- Función de transferencia sigmoidal: se define mediante dos parámetros (c, a), de forma que a determina la pendiente en el punto de cruce c; mediante la diferencia o producto de funciones sigmoidales se pueden especificar funciones de pertenencia asimétricas. Así, una función de transferencia sigmoidal se expresaría matemáticamente como sigue:

$$\text{sigmf}(x; a, c) = \frac{1}{1 + e^{-a(x-c)}}$$

Tomando como ejemplo la altura de una persona, los conjuntos difusos relacionados con esta característica puede denotarse utilizando diferentes términos lingüísticos como "bajo", "normal" o "alto"; estos conjuntos difusos quedan completamente caracterizados por sus funciones grado de pertenencia $mf_{BAJO}(x)$, $mf_{NORMAL}(x)$ y $mf_{ALTO}(x)$, respectivamente. La altura en este caso sería una variable difusa, cuyos valores (lingüísticos) se corresponden con palabras o frases en lenguaje natural (alto, bajo, normal, mediano, etc.) [Zadeh 1975]. En la figura 40 se muestran las tres funciones de pertenencia para los conjuntos difusos relacionados con la variable lingüística `altura`; tal y como puede observarse, las funciones $mf_{BAJO}(x)$ y $mf_{ALTO}(x)$ son sigmoidales, mientras que $mf_{NORMAL}(x)$ se define mediante una función de transferencia de Cauchy.

Al igual que ocurría con los factores de certeza, la teoría de conjuntos difusos también proporciona reglas de agregación, de modo que se pueda obtener de forma sencilla la función de pertenencia equivalente a la combinación de varios conjuntos difusos. Así, la intersección de dos conjuntos difusos A y B se especifica por una función T: [0, 1] x [0, 1] → [0, 1] que permitirá agregar los grados de pertenencia de ambos en la forma:

$$mf_{A\cap B}(x) = T(mf_A(x), mf_B(x)) = mf_A(x) \otimes mf_B(x),$$

donde ⊗ se corresponde con uno de los operadores de intersección (operador mínimo, producto algebraico, producto drástico, etcétera), los cuales se denominan generalmente operadores T-norma [Jang 1997]. Del mismo modo que la intersección, la unión de dos conjuntos difusos se especifica en general por la función S: [0, 1] x [0, 1] → [0, 1] que agrega dos grados de pertenencia como sigue:

$$mf_{A\cup B}(x) = S(mf_A(x), mf_B(x)) = mf_A(x) \oplus mf_B(x),$$

donde ⊕ es ahora un operador de unión difuso (operador máximo, suma algebraica, suma drástica, etc.), conocidos usualmente como operadores T-conorma o S-norma.

Ambos, los operadores de unión e intersección, retienen algunas propiedades de sus homólogos de la teoría de conjuntos clásicos, en particular son asociativos y conmutativos. Aunque en el campo de los conjuntos difusos se han explorado una amplia variedad de reglas de combinación de conjuntos y son varios los autores que han formulado operadores T-norma y T-conorma [Sugeno 1977] [Dubois 1980] [Yager 1994], los propuestos inicialmente por Zadeh ($T_{min} = \min\{mf_A(x), mf_B(x)\} = mf_A(x) \wedge mf_B(x)$; $T_{max} = \max\{mf_A(x), mf_B(x)\} = mf_A(x) \vee mf_B(x)$) siguen siendo las más populares [Zadeh 1965].

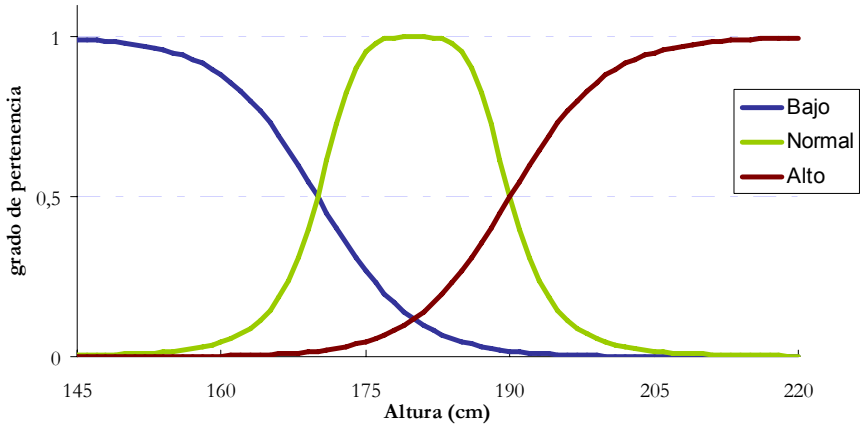


Figura 40. Funciones de pertenencia para los conjuntos difusos relacionados con la variable *altura* de una persona

Un sistema experto difuso será simplemente un sistema de inferencia que utiliza, en lugar de lógica binaria, una colección de conjuntos difusos, funciones de pertenencia y reglas difusas para razonar sobre los datos [Schneider 1996]. Las reglas de razonamiento difusas son generalmente expresiones de la forma `IF (x es A) and (y es B) THEN z es C`, donde A, B y C son conjuntos difusos definidos sobre las variables de entrada x e y, y sobre la variable de salida z, respectivamente; el antecedente o premisa de la regla describe hasta qué grado se aplica la misma, mientras que los consecuentes asignarán una función de pertenencia a las variables de salida. La figura 41 muestra la arquitectura básica de un sistema experto difuso, cuyos componentes principales son: una interfaz de codificación *(fuzzification)* o conversión de las entradas concretas o expresadas mediante etiquetas lingüísticas en difusas; una base de conocimiento que, en este caso, comprende una base de hechos en la que se definen los conjuntos difusos y una base de reglas compuesta por reglas de razonamiento difusas; un motor de inferencia (lógica de toma de decisiones) responsable de ejecutar las reglas de razonamiento sobre los conjuntos difusos resultantes del proceso previo de conversión de las entradas; y una interfaz de decodificación (*defuzzification*) en la que se lleva a cabo el proceso de conversión inverso, transformando la salida difusa del sistema en una salida interpretable por el usuario.

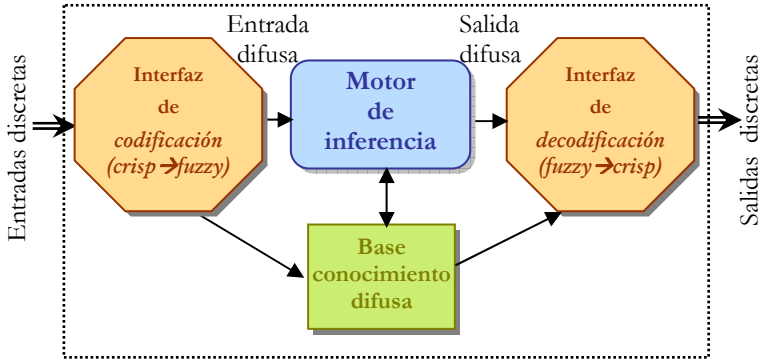


Figura 41. Arquitectura básica de un sistema experto difuso

La base de reglas de estos sistemas se caracteriza por presentar reglas del tipo IF-THEN cuyos antecedentes y consecuentes se refieren habitualmente a variables lingüísticas. Las variables de entrada del sistema experto se convierten en difusas aplicando a sus valores reales las funciones de pertenencia definidas sobre cada una de ellas, con el objetivo de determinar el grado de verdad de cada antecedente de cada regla.

A través de un procedimiento adecuado de inferencia, denominado comúnmente método de implicación, para cada regla difusa se computa el valor de verdad de sus premisas y se aplica a la parte consecuente, obteniendo como resultado un subconjunto difuso que se asignará a cada variable de salida implicada (al tratarse de lógica multivaluada, para

llevar a cabo la combinación de antecedentes es necesario emplear alguno de los operadores T-norma o T-conorma mencionados). Utilizando de nuevo un procedimiento apropiado de agregación, todos los subconjuntos difusos asociados a cada variable de salida se combinan para formar un único conjunto difuso para cada una de ellas. Los métodos más extendidos de inferencia en este tipo de sistemas son el MAX-MIN, en el que la implicación en cada regla se resuelve mediante el operador T-norma mínimo (T_{min}) y el conjunto difuso final para cada variable se obtiene agregando sus subconjuntos difusos asociados mediante máximos; y MAX-PRODUCT, que realiza la implicación a través del operador T-norma producto aritmético y la agregación también mediante máximos [Zadeh 1983].

Finalmente, para realizar la decodificación se extrae la salida discreta que mejor representa al conjunto difuso asociado a cada variable de salida; un sistema básico de inferencia difusa puede manejar correctamente entradas tanto concretas como difusas, pero el resultado de su razonamiento se expresará siempre mediante conjuntos difusos.

Existen varios tipos de sistemas de inferencia difusos que difieren principalmente en el tipo de reglas que manejan y, por tanto, en los procedimientos que utilizan tanto para aplicar el resultado de la combinación de los antecedentes a los consecuentes (mecanismo de implicación) como para combinar los diferentes consecuentes (mecanismo de agregación) y obtener una salida discreta (técnica de *defuzzification*). Los modelos de razonamiento que se han utilizado más habitualmente en la implementación real de sistemas expertos y de sistemas de control difusos, son el esquema de inferencia difusa propuesto E. H. Mamdani y S. Assilian [Mamdani 1975] y el sistema de razonamiento difuso basado en funciones formulado por T. Takagi y M. Sugeno [Takagi 1985].

De acuerdo al sistema de inferencia difusa Mamdani-Assilian, tanto los antecedentes como los consecuentes de las reglas de razonamiento se definen a través de conjuntos difusos y son del tipo `IF (x es A) and (y es B) THEN z=C`, donde A, B y C representan los diferentes conjuntos difusos definidos sobre las variables de entrada x e y, y sobre la variable de salida z; en este tipo de sistemas se puede recurrir a cualquiera de los operadores T-norma y T-conorma descritos para combinar los antecedentes de las diferentes reglas, aunque los más utilizados son los ya mencionados T_{min} y T_{max}; para realizar la conversión de la salida a un valor concreto se contemplan varias técnicas (centro de gravedad, valor máximo del conjunto difuso, etc.), si bien la más extendida es el método del centroide del área agregada (centro de gravedad). Esto es:

$$\mathrm{CofA}_Z = \frac{\int_Z \mathrm{mf}_\infty(z)\, z\, \mathrm{d}z}{\int_Z \mathrm{mf}_\infty(z)\, \mathrm{d}z}$$

donde $mf_{\infty}(z)$ es la función de pertenencia de salida, resultante de la agregación de las diferentes funciones de pertenencia de entrada, y $CofA_Z$ representa el centroide del área especificada por dicha función de transferencia de salida.

Takagi y Sugeno proponen en cambio un esquema de inferencia en el que los consecuentes de las reglas difusas no se refieren a conjuntos difusos, sino que están constituidos por funciones de las entradas discretas; las reglas tienen pues una estructura del tipo `IF (x es A) and (y es B) THEN z=`f_r`(x,y)`, que en el caso particular de combinaciones lineales podría reescribirse como `IF (x es A) and (y es B) THEN z=`$p_1x+q_1y+\gamma_1$ donde p_1, q_1 y γ_1 son parámetros lineales. Los sistemas difusos basados en este segundo esquema necesitan habitualmente un número menor de reglas, debido a que su salida es ya una función de las entradas en vez de un conjunto difuso constante y, por lo tanto, no requieren un proceso de conversión adicional (*defuzzification*).

En la figura 42 se muestran estos dos esquemas de razonamiento ilustrando su funcionamiento sobre dos reglas del tipo descrito anteriormente. Como puede observarse, en el esquema Mamdani se ha utilizado inferencia del tipo MIN-MAX, aplicando el método del centroide del área para obtener una salida discreta; en el sistema Takagi-Sugeno, la salida de cada regla difusa es una función de las propias variables de entrada de la regla, y la salida discreta final del proceso de razonamiento se obtiene directamente a través de la media ponderada de las variables de salida de las distintas reglas; en este caso se utiliza de nuevo el operador T_{min} para seleccionar los distintos pesos del vector de salidas (w_1, w_2), que indican el grado de relevancia de cada regla.

No existe ninguna demostración teórica de que un sistema de inferencia difuso sea más eficiente que otro, así que la elección dependerá principalmente de las preferencias del usuario y de las características de la aplicación. Por ejemplo, cuando se utiliza un esquema de inferencia difuso en un sistema de control en tiempo real es indispensable que la velocidad de cómputo sea elevada, lo cual implica que los sistemas de tipo Mamdani-Assilian no serían del todo apropiados, a menos que se disponga de hardware específico [Sibigroth 1992].

En el sistema experto diseñado para la clasificación MK, debido en parte al tipo de reglas de inferencia en las que las variables de salida (tipos espectrales y/o niveles de luminosidad) dependen del valor de las variables de entrada (índices espectrales), se adoptó el modelo Takagi-Sugeno, si bien se introdujeron algunas modificaciones para adaptarlo convenientemente al campo de aplicación considerado; para integrar los antecedentes de las diferentes reglas difusas se utilizaron los operadores T_{min}(AND) y T_{max}(OR) como T-norma y T-conorma, respectivamente; como método de inferencia se añadió a la obtención de conclusiones parciales mediante las diferentes funciones asociadas a cada regla de clasifica-

ción, una versión propia del método MAX-MIN que traslada mediante el *operador mínimo* el resultado de la combinación de las premisas a las conclusiones, obteniendo el grado de relevancia de cada regla, para después agregar la influencia de todas las reglas activas mediante el *operador máximo* y producir de este modo una única respuesta final que, como ya se ha mencionado, no es necesario decodificar pues se halla ya en un formato inteligible para los usuarios del sistema.

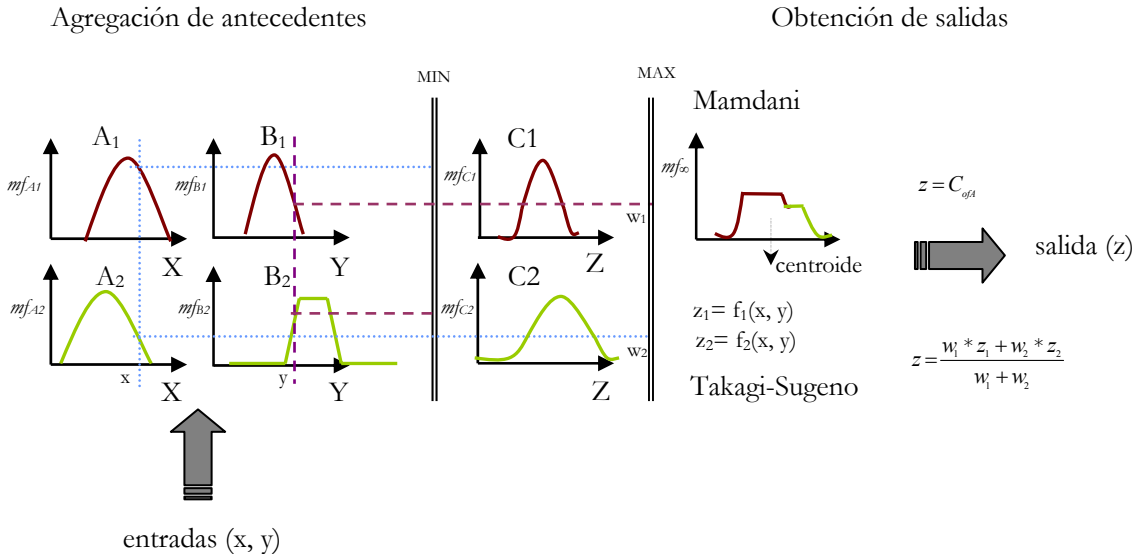


Figura 42. Ejemplo de los dos tipos principales de mecanismos de inferencia difusos (Mamdani-Assilian y Takagi-Sugeno), suponiendo que en las premisas de las reglas se emplea el operador AND

En la figura 43, se muestra un ejemplo sencillo del funcionamiento del esquema de razonamiento difuso propuesto para abordar la clasificación MK. Considerando que en un instante determinado en la base de conocimiento difusa se encuentren activas las tres reglas indicadas en gris, y que se produzcan entonces las evidencias `E1=valor de la profundidad de las bandas TiO de 75`, `E2=cuantificación de la profusión de líneas metálicas en 0.27`, el primer paso consistiría en la codificación de las entradas discretas (E1 = 75, E2 = 0.27) transformándolas en entradas difusas de modo que puedan ser interpretadas por el sistema para realizar las correspondencias necesarias con los antecedentes de las reglas, es decir, por ejemplo para las bandas de TiO será necesario traducir el valor 75 correspondiente a la medida de su profundidad a los términos que manejan las reglas disponibles ("profundas", "significativas", etcétera); esta codificación se realiza mediante las funciones de pertenencia a los diferentes conjuntos difusos disponibles para cada una de las variables de entrada, que en este caso serían $mf_{SIGNIFICATIVA}$, $mf_{DÉBIL}$, $mf_{PROFUNDA}$ para las bandas TiO (resaltados en azul en la figura) y $mf_{DÉBIL}$, $mf_{INTENSA}$ para las líneas metálicas (indicados en violeta). Seguidamente se realiza la conjunción y disyunción de premisas, combinando las funciones de pertenencia de los diferentes antecedentes de cada una de las reglas activas mediante los operadores T_{min} y T_{max}, para entonces aplicar el método MIN

y obtener el grado de relevancia o peso de cada regla activa (w_1, w_2 y w_3); para cada variable de salida implicada, en este caso únicamente la variable `clasificación global`, se aplican las funciones de transferencia correspondientes a cada regla (en verde en la figura) y se obtiene una conclusión (temprana, intermedia) con un grado de confianza que será función de los valores de las distintas variables de entrada. El paso siguiente consiste en combinar las conclusiones que se refieren a las mismas variables mediante una media ponderada utilizando los grados de relevancia de cada regla obtenidos anteriormente. Finalmente, la respuesta del sistema vendrá determinada por la conclusión con un grado de confianza mayor (método MAX), y se formulará como la probabilidad de una clasificación expresada en términos lingüísticos, es decir, en este caso el sistema podría concluir que dada la evidencia disponible la estrella es intermedia con una probabilidad del 34%.

Por cuestiones de claridad en el ejemplo anterior se han obviado los factores de certeza, los cuales se incluirían también en las funciones aplicadas en cada regla difusa y cuyo cómputo se realizaría tal y como se ha descrito anteriormente en esta sección; así, las salidas finales del sistema, i. e. la clasificación MK de la estrella, se verán apoyadas por una probabilidad (factor de certidumbre final de cada conclusión combinado con el grado de confianza de la misma) que indica en cierto modo la confianza del sistema en sus propias inferencias.

En la base de conocimiento del sistema experto automático de clasificación se almacenarán las reglas difusas (que serán del mismo tipo que las del ejemplo precedente), junto a sus factores de certidumbre, las funciones de pertenencia de cada uno de los conjuntos difusos asociados a sus antecedentes (variables de entrada referidas a índices espectrales) y las funciones para obtener sus consecuentes (variables de salida indicativas del nivel de clasificación: global, tipo espectral, subtipo espectral, luminosidad). Si bien los diferentes conjuntos difusos y sus funciones de pertenencia asociadas se definieron también en la fase de diseño del sistema, el procedimiento para obtenerlos difiere significativamente del empleado para determinar los factores de certeza que, como ya se indicó, fueron estimados inicialmente por el grupo de astrofísicos expertos en clasificación, y su valor se ajustó posteriormente mediante diversos algoritmos de aprendizaje; de hecho, en este caso la estimación se basa casi completamente en el análisis de los espectros de los catálogos de referencia.

Durante la fase de adquisición de conocimiento, anterior al diseño del sistema experto, se realizó un estudio de sensibilidad de los índices espectrales recopilados, con el objetivo de validar los criterios de clasificación seleccionados para su implementación en forma de reglas. En este análisis se extrajeron y midieron, por medio de los algoritmos de procesado morfológico implementados, los índices espectrales seleccionados para las estrellas de los catálogos de referencia (Silva 1992, Pickles 1998, Jacoby 1984), lo cual permitió

determinar la resolución real de cada parámetro de clasificación, es decir, los diferentes tipos/subtipos espectrales y clases de luminosidad sobre los que efectivamente tiene influencia (véase sección 4.3 para más detalles).

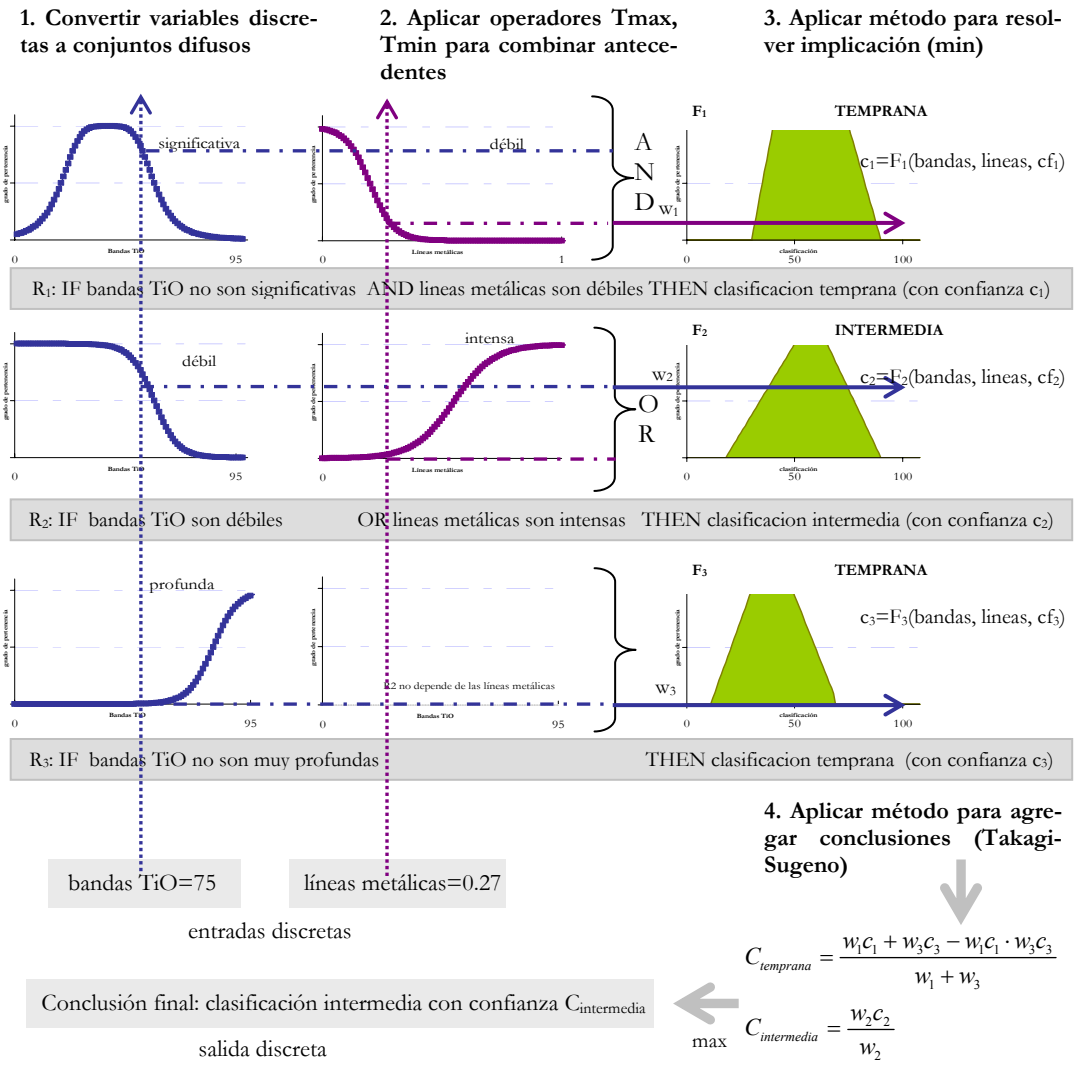


Figura 43. Ejemplo completo del proceso de inferencia difusa sobre tres reglas del sistema experto diseñado para la clasificación automática de espectros estelares en el sistema MK

Del conjunto original de características morfológicas susceptibles de formar parte de los criterios de clasificación, después del análisis de sensibilidad solamente resultaron adecuadas un total de 25, que constituirán los parámetros reales de clasificación y servirán para definir las variables difusas de entrada del sistema experto; de la misma forma, en esta fase previa se definieron tantas variables de salida como niveles de clasificación (global, tipo, subtipo, luminosidad). Los conjuntos difusos para cada una de estas variables se establecieron en base a las etiquetas lingüísticas utilizadas por los expertos en los criterios de

clasificación seleccionados. Las funciones para estimar las variables de salida se contextualizaron para cada tipo espectral y nivel de luminosidad mediante la determinación, sobre un subconjunto selecto de espectros de referencia, de los valores limítrofes entre diferentes grupos de estrellas (tempranas, intermedias, tardías, OB, AF, GKM, etc.), permitiendo la superposición entre ellos; las funciones de pertenencia para los conjuntos difusos definidos sobre las variables de entrada (índices de clasificación) vendrán determinadas también por los valores estimados para cada índice en los espectros del catálogo guía, aunque en este caso será necesaria una verificación posterior por parte de los expertos con el fin de establecer una correcta correspondencia entre valores numéricos y etiquetas lingüísticas.

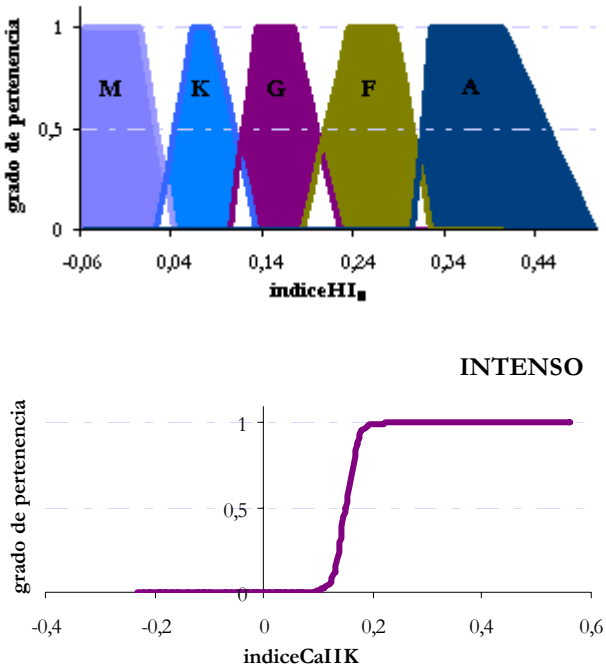


Figura 44. Funciones asociadas a la variable de salida *tipo espectral* y al conjunto difuso *intenso* definido sobre la variable de entrada *índiceCaIIK*

Por ejemplo, para el índice 10 (línea de calcio en 3933 Å) se define la variable difusa de entrada `indiceCaIIK` y los conjuntos difusos `intenso`, `débil`, `significativo`, pues los expertos manejan reglas de clasificación del tipo "si la línea de CaII (K) es significativa, débil, muy intensa, etc. entonces…". Las funciones de pertenencia a estos conjuntos difusos vendrán determinadas por los valores estimados para este índice en los espectros de los catálogos guía, después de someterlos al juicio de los expertos; es decir, serán estos los que finalmente decidan cuál es el valor numérico a partir del que se puede considerar que este índice es intenso, débil o significativo, siempre en base a los valores obtenidos para las estrellas de referencia. Sin embargo, para las variables de salida (como por ejemplo el tipo espectral) las funciones para cada conclusión (O, B, A, F, G, K, M, OBA, FG, KM, etc.),

quedarán totalmente especificadas por las medidas de los diferentes índices de las estrellas de referencia. En la figura 44 se muestran las dos variables indicadas, i. e. el índice de clasificación CaII (K) en 3933 Å y el nivel de clasificación tipo espectral. Para el índice de calcio se ha seleccionado el conjunto difuso `intenso`, que se muestra junto a la función de pertenencia que se ha obtenido después de medir la intensidad de esta línea en una selección de espectros procedentes de los catálogos de referencia y someter posteriormente los resultados obtenidos al examen de los expertos, quienes dictaminaron que a partir de un valor de aproximadamente 0.2 este índice podría considerarse intenso; esta función de pertenencia es la que se utilizará para convertir los valores numéricos medidos para este índice en estimaciones sobre su intensidad (proceso de codificación *crisp-fuzzy*). Para la variable `tipo espectral`, al ser de salida, existirán tantas funciones como reglas de clasificación la contengan en sus conclusiones; en concreto, en la figura se muestran las funciones de transferencia que habría que aplicar en el que caso de que se consideren reglas que hagan referencia a la variable de entrada `indiceHI`$_\beta$ y cuyas conclusiones aludan a los tipos espectrales `A`, `F`, `G`, `K`, y `M`.

Cuando los expertos en clasificación están analizando una estrella siguiendo el método tradicional, llevan a cabo una observación directa de sus rasgos espectrales más relevantes y posteriormente comparan, mediante superposición, su espectro con los espectros de referencia similares; durante este proceso, ocurre con cierta frecuencia que no les es posible precisar con total exactitud el tipo o subtipo espectral de la estrella en cuestión y, no pudiendo obtener una clasificación inequívoca, optan en estas ocasiones por una solución de compromiso que incluye dos o más tipos/subtipos contiguos (por ejemplo, cuando no son capaces de decidir si una estrella es de tipo A9 ó F0, se inclinan por asignarle la clasificación A9F0). Con el objetivo de reproducir esta peculiaridad, y al mismo tiempo no incluir demasiado determinismo en el sistema experto diseñado, se decidió dejar entre cada dos tipos espectrales (o clases de luminosidad) consecutivos unas zonas de incertidumbre en las que el sistema no puede afirmar con un grado de confianza significativo que la estrella problema pertenece a uno u otro tipo. En la figura 44 se han resaltado en color blanco estas zonas de indecisión entre los diferentes valores que puede tomar la variable `tipo espectral`; si durante el análisis morfológico se estimase para el índice H I$_\beta$ un valor dentro de alguno de estos intervalos ([-0.02-0.04], [0.10-0.13], [0.18-0.22], [0.3-0.32]), a la variable `tipo espectral` se le asignaría entonces una probabilidad de pertenencia a dos tipos espectrales consecutivos no muy elevada, y el sistema trataría de resolver dicho nivel de clasificación a través de otras reglas activas.

Desde su formulación en 1965 la lógica difusa ha adquirido gran relevancia, pues proporciona un vehículo adecuado para razonar con extensiones difusas al cálculo proposicional y al cálculo de predicados de primer orden. Además se ha aplicado con éxito en una

gran variedad de áreas, entre las que cabría destacar la construcción de aparatos electrónicos de entretenimiento y domésticos, el diseño de dispositivos de control de procesos industriales complejos o la implementación de sistemas de diagnóstico [Zadeh 1996] [Zimmermann 2001].

En el área de diseño de sistemas basados en el conocimiento, los conjuntos difusos presentan varias de las ventajas de las que gozaba el método de gestión de la incertidumbre mediante factores de certeza, tales como la facilidad de estimación y la manejabilidad computacional; sin embargo, al no haber sido formulados originariamente para trabajar con sistemas expertos, producen en ocasiones resultados poco intuitivos cuando se aplican para tratar la incertidumbre en dichos sistemas. Al igual que los factores de certeza, las funciones de pertenencia a los conjuntos difusos proporcionan un valor numérico para las variables de entrada que no posee una interpretación sencilla. Esta carencia es evidente cuando se considera la pertenencia a la unión de dos conjuntos difusos complementarios: si se presenta al sistema de clasificación un espectro al que, después de estimar sus índices, se le asigna un valor de 0.7 en la pertenencia al conjunto difuso `líneas metálicas intensas`, automáticamente su valor de pertenencia al conjunto `no líneas metálicas intensas` sería de 0.3; ahora bien, siguiendo la regla de combinación de funciones de pertenencia descrita, $T_{max}(mf_A(x), mf_B(x)) = \max\{mf_A(x), mf_B(x)\}$, el grado de pertenencia de dicho espectro a la unión de ambos conjuntos difusos sería el valor máximo, es decir 0.7 y no 1 como era de esperar.

Tomando en consideración las ventajas e inconvenientes expuestos, en el sistema automático de clasificación estelar se optó definitivamente por combinar ambos métodos descritos (factores de certeza y lógica difusa), y tratar así de modelizar adecuadamente la incertidumbre e imprecisión características de los procesos de razonamiento empleados comúnmente en esta área del saber humano. A continuación se recogen los detalles específicos de la implementación del sistema experto diseñado para automatizar la clasificación MK de las estrellas basada en el análisis de su espectro óptico.

4.4.3 Implementación del sistema experto

La implementación de un sistema experto consiste en el proceso de trasladar todo el conocimiento que se ha adquirido y representado en las etapas previas de diseño (reglas, *frames*, etc.) a un formato inteligible para un ordenador; es decir, se trata de especificar el conocimiento en algún código computacional utilizando bien un lenguaje convencional de programación, un lenguaje diseñado específicamente para el diseño de programas de Inteligencia Artificial, o bien un entorno específico de desarrollo de sistemas basados en el conocimiento (*shell*).

Aunque para el desarrollo de sistemas expertos se puede recurrir a lenguajes de programación clásicos (BASIC, Pascal, C/C++, Java, etc.), existen lenguajes que se han diseñado específicamente para programación en Inteligencia Artificial, como por ejemplo el lenguaje PROLOG (*PROgrammation en LOGique*) que es una implementación computacional de la lógica de predicados y, por lo tanto, un entorno natural en el que representar el conocimiento de un dominio [Colmerauer 1996]; o el lenguaje LISP (*LISt Processor*) desarrollado por John McCarthy para escribir todo tipo de programas en el área de Inteligencia Artificial, incluyendo sistemas expertos [McCarthy 1960]. El inconveniente principal que presentan estos lenguajes de programación a la hora de implementar sistemas expertos es que no solamente es necesario construir la base de conocimiento del dominio considerado, sino que se precisa crear todos los componentes estructurales adicionales dentro del propio lenguaje de programación que se está utilizando (estrategia de razonamiento, algoritmo de resolución de conflictos, cálculo de factores de certeza, etc.), lo cual añadiría complejidad y un esfuerzo adicional (e innecesario) en la fase de desarrollo.

Sin duda alguna, gran parte de la popularidad alcanzada por los sistemas expertos puede atribuirse a la creación de entornos de desarrollo específicos (*shells*) que separan la base de conocimiento de los procedimientos facilitados para gestionar dicho conocimiento, y que permiten a usuarios no especialmente duchos en programación implementar aplicaciones basadas en sistemas expertos de una manera rápida y racional. Este tipo de herramientas fueron introducidas por primera vez por los desarrolladores del sistema experto MYCIN, quienes se percataron de la cantidad de recursos y tiempo que consumía la tarea de implementar un sistema experto, por lo que tras finalizar su desarrollo vaciaron la base de conocimiento de MYCIN dejándola disponible de forma general como EMYCIN (*Empty MYCIN*); de esta forma fue posible para los sistemas posteriores concentrar los esfuerzos en el diseño de la base de conocimiento específica de cada problema, pues esta podría posteriormente implementarse de manera sencilla y rápida dentro del entorno general proporcionado. Desde el primitivo EMYCIN se han producido múltiples avances en los entornos de desarrollo de sistemas expertos, de forma que existen en la actualidad numerosos proveedores de software que ofertan *shells* comerciales, algunos de los cuales son esencialmente entornos de desarrollo basados en reglas (OPS/R2, EXSYS, etc.), mientras que otros proporcionan medios más sofisticados de representación del conocimiento como pueden ser el paradigma de desarrollo orientado a objetos o la evolución actual hacia herramientas disponibles a través de la Red (Jess, CLIPS, Corticon, etcétera).

El sistema experto diseñado para abordar la clasificación MK automática de los espectros estelares se desarrolló utilizando el *shell* OPS/R2 [Forgy 1995a], integrándose con la aplicación de análisis morfológico mediante librerías de enlace dinámico. OPS/R2 es un entorno de desarrollo de sistemas expertos dotado de un lenguaje de definición de reglas de

producción muy completo que, a través de una interfaz gráfica, permite especificar y revisar la base de conocimiento, trazar la ejecución de las reglas, modificar interactivamente los datos del sistema, grabar y restaurar el estado de ejecución, revisar información histórica, etc.; esta herramienta se puede utilizar para construir sistemas expertos independientes o, como en nuestro caso, para crear de forma sencilla y eficiente módulos de reglas que se enlacen con aplicaciones existentes desarrolladas en C/C++.

OPS/R2 pertenece a la familia de lenguajes OPS (*Official Production System*), los cuales comenzaron a desarrollarse en la década de los años 70 en la Universidad Carnegie-Mellon con el objetivo de obtener un esquema sencillo y eficiente para construir reglas de producción de la forma IF-THEN; sus antecesores más notables fueron el OPS5, primer lenguaje utilizado en un sistema experto célebre (el R1/XCON para la configuración de computadores VAX), y el OPS83, pionero en la integración de sistemas de reglas en la programación estructurada (lenguaje C) [Forgy 1995b]. Además de mantener algunas de las características más importantes de sus predecesores (encadenamiento hacia delante, diferentes estrategias de resolución de conflictos, etc.), este entorno de desarrollo permite la implementación de reglas orientadas a objetos (incluyendo una funcionalidad análoga al mecanismo de herencia de atributos y métodos de la programación orientada a objetos convencional) y ofrece la posibilidad de que el usuario defina su propia estrategia de control (no se fuerza a las aplicaciones a utilizar la estrategia de inferencia estándar proporcionada con el entorno, sino que esta se puede modificar, siendo incluso posible crear estrategias de razonamiento específicas para cada aplicación concreta); asimismo, OPS/R2 incluye el algoritmo Rete II, que es una versión más compleja y eficiente del algoritmo básico Rete para el emparejamiento de datos y condiciones [Forgy 1982], con el que se posibilita la utilización de una estrategia de razonamiento guiada por los objetivos en lugar de por los datos (encadenamiento hacia atrás o *backward chaining*).

En la figura 45 se muestran las diferentes partes que forman el sistema desarrollado para clasificar los espectros ópticos de las estrellas. Como cualquier sistema experto clásico, este sistema automático de clasificación se compone principalmente de una base de conocimiento, en la que se especifica el conocimiento propio del dominio que se está modelizando (hechos, reglas, factores de certeza y conjuntos difusos relativos al área de la clasificación espectral), y un motor de inferencia, que contiene la lógica necesaria para razonar sobre el conocimiento disponible y que puede aplicarse de forma general a una gran variedad de problemas distintos en diversos campos. Este último elemento, el motor de inferencia, es un programa supervisor situado entre la base de conocimiento y el usuario final que se ocupa de extraer conclusiones y nuevos hechos sobre el problema planteado, partiendo de los datos simbólicos que se hallan almacenados en cada instante en la base de conocimiento (memoria activa o de trabajo); esta unidad lógica determina, por tanto, las acciones

que tendrán lugar y el orden y modo en el que se ejecutarán entre las diferentes partes del sistema experto implicadas, supervisando asimismo el diálogo con el usuario. El motor de inferencia se caracteriza por el lenguaje en el que ha sido programado (C, Java, etc.), su velocidad de procesamiento (número de inferencias por segundo), las estrategias de búsqueda de soluciones que implementa (heurística, encadenamiento hacia delante, encadenamiento hacia atrás, etc.), el tipo de lógica que se emplea en el razonamiento (binaria o booleana, difusa, etc.), el algoritmo de emparejamiento de hechos y reglas (Rete, Treat, etc.), las estrategias de resolución de conflictos (MEA, LEX, etc.), los métodos que ofrece para gestionar el conocimiento incompleto o incierto (probabilístico, aproximado, difuso, etc.) y la posibilidad de incorporar metaconocimiento [Giarratano 2004].

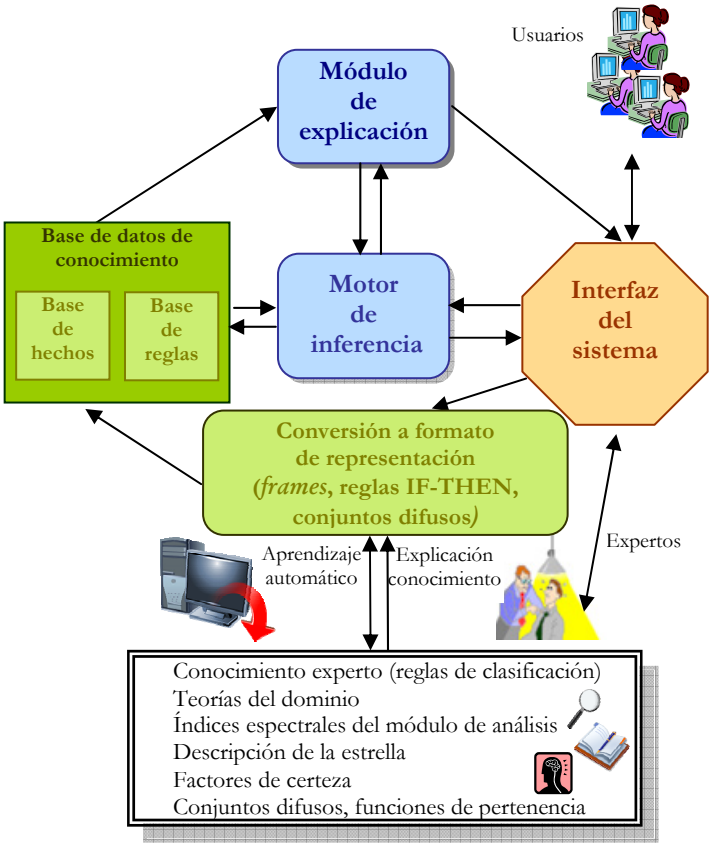


Figura 45. Componentes principales del sistema basado en el conocimiento diseñado para obtener clasificaciones MK de las estrellas

En los sistemas basados en reglas de producción, como es el caso del sistema experto de clasificación espectral que nos ocupa, el motor de inferencia tiene como tarea principal validar, seleccionar y activar las reglas que deben procesarse (dispararse) en cada momento; es decir, podría considerarse como un tipo de máquina de estado finito con un ciclo consistente en tres acciones-estado: emparejar los antecedentes (o consecuentes, dependiendo de la estrategia de razonamiento) de las reglas con los elementos disponibles en

la memoria de trabajo, seleccionar las reglas que han de dispararse (resolución de conflictos) y ejecutar las reglas seleccionadas (lo cual típicamente involucrará cambios en la memoria de trabajo).

El ciclo de razonamiento comienza en el primer estado, i. e. emparejamiento de reglas, en el que el motor de inferencia busca todas las reglas que pueden satisfacerse con la información actual almacenada (cuando las reglas se encuentran en la típica forma condicional, esto significa contrastar las condiciones con los datos iniciales disponibles en la memoria de trabajo). En aplicaciones donde se utilizan grandes volúmenes de datos y/o cuando las consideraciones de rendimiento temporal son críticas, la obtención de este conjunto de reglas candidatas para la activación (*conflict set*) no es un problema trivial; de hecho, muchos de los trabajos de investigación iniciales sobre motores de inferencia se centraron principalmente en el desarrollo de algoritmos para optimizar el proceso de emparejamiento de reglas, como por ejemplo el algoritmo Rete, diseñado por C. Forgy y utilizado en la serie de lenguajes de producción OPS, que se basa fundamentalmente en el almacenamiento de los emparejamientos parciales entre los diferentes tipos de hechos, evitando así la reevaluación completa de todas las condiciones cada vez que se producen actualizaciones en la memoria de trabajo, ya que el sistema solamente necesitará procesar los cambios acontecidos [Forgy 1982].

El entorno elegido para el desarrollo del sistema experto de clasificación, OPS/R2, utiliza una versión mejorada del algoritmo Rete original (Rete II) que, junto con la característica de compilación directa de las reglas a código máquina (la mayor parte de los sistemas basados en reglas las traducen a una representación intermedia y las interpretan en tiempo de ejecución), constituye un mecanismo muy eficiente de emparejamiento de reglas, proporcionando un alto rendimiento, sobre todo en sistemas complejos formados por un gran número de reglas compuestas.

Una vez generado el conjunto de reglas susceptibles de ser ejecutadas, el motor de inferencia pasa al estado de selección de la regla que debe activarse. Se aplica entonces alguna estrategia de resolución de conflictos o heurística para determinar cual de las posibles reglas será la que se ejecute realmente, evitando así que el proceso sea exponencial. Para seleccionar un elemento del conjunto de reglas candidatas, los criterios más populares se basan en la preferencia de reglas que utilizan datos que se han incorporado más recientemente a la memoria de trabajo, en la elección de reglas con mayor complejidad en las condiciones y en no permitir que una misma regla se instancie dos veces consecutivas con los mismos datos. Todas estas estrategias de elección de reglas son globales o independientes del domino de aplicación, pero pueden también considerarse estrategias locales de resolución de conflictos adaptadas al problema específico que se pretende resolver, como por ejemplo el uso de diferentes contextos, el establecimiento de orden y prioridades en las

reglas siguiendo criterios propios, o incluso la implementación de reglas que razonen sobre las propias reglas a ejecutar (meta-reglas). Las estrategias de selección pueden codificarse integradas en el motor de inferencia o, por el contrario, pueden especificarse como parte del modelo.

OPS/R2 hereda de sus predecesores dos mecanismos diferentes para seleccionar reglas: las estrategias LEX y MEA [Newell 1963], las cuales se basan fundamentalmente en el tiempo de instanciación de los datos para determinar la siguiente regla a disparar y resolver así el conflicto. El método LEX consta de tres criterios de selección:

- Reglas no disparadas (*refraction*): el término procede de la neurobiología y se refiere a los periodos refractarios que sufre una neurona durante los que no es capaz de activarse inmediatamente sin antes pasar por un proceso de relajación. De forma similar, no se permitirá instanciar dos veces consecutivas la misma regla con los mismos datos, previniendo así que el motor de inferencia entre en un bucle infinito.

- Reglas más recientes (*recency*): se seleccionan aquellas reglas cuyos datos (condiciones) sean más recientes, es decir, que hayan entrado posteriormente en la memoria de trabajo, lo cual es útil para dar al sistema un sentido de linealidad en el razonamiento mientras trabaja en un problema, pues se asume que los hechos que acaban de producirse se usarán con mayor probabilidad en otra regla en un futuro inmediato.

- Reglas más específicas (*specificity*): cuando la instanciación de las reglas sea igual de reciente se seleccionarán las más específicas, esto es, las que presentan un mayor número de condiciones en su parte izquierda y que son, por lo tanto, más restrictivas y difíciles de disparar; este criterio asegura que las reglas más generales se disparen con posterioridad a las que cubren los casos más concretos.

Si después de la aplicación de estos criterios todavía existiesen múltiples reglas que pueden aplicarse, el motor de inferencia de OPS/R2 elegirá una de ellas aleatoriamente. La otra estrategia implementada, MEA, es muy similar a la anterior pero incluye un filtro adicional: después de descartar las reglas ya disparadas, se selecciona aquella que presente una instanciación más reciente de su primera condición, es decir, se elige la regla en la que los hechos relativos a su primera condición hayan entrado posteriormente en la memoria de trabajo; si hay más de una regla que cumpla esta norma, se resuelve el conflicto utilizando los dos criterios siguientes del método LEX (*recency* y *specificity*) para seleccionar la regla que se debe disparar. Aunque a priori este método parezca arbitrario, se diseñó para que los programas dirigidos por objetivos (que parten de las metas que se desea alcanzar y evolucionan hacia los datos) fuesen más sencillos de implementar en OPS, que utiliza habitual-

mente una estrategia estándar de razonamiento hacia delante o guiado por los datos. En un sistema de encadenamiento hacia delante es práctica habitual dirigir el flujo de control introduciendo hechos referidos a los objetivos en la memoria de trabajo, de forma que las reglas incluyan información en sus condiciones que asegure que solamente se dispararán cuando se esté persiguiendo un objetivo determinado. Utilizando la estrategia de resolución de conflictos MEA y estableciendo que la premisa referente a los objetivos forme la primera condición de la parte izquierda de cada regla, se puede forzar al sistema a perseguir objetivos de una manera específica; de hecho, con esta técnica es posible construir sistemas de encadenamiento hacia atrás utilizando una herramienta típica de encadenamiento hacia delante.

Cuando se ha resuelto el conflicto y se ha determinado la regla que va a dispararse, el motor de inferencia transita al tercer estado, esto es, la ejecución de la regla seleccionada con los datos de instanciación como parámetros. Generalmente las acciones recogidas en la parte derecha de las reglas modifican el estado del sistema, pues actualizan los datos almacenados en la memoria de trabajo, pero también pueden iniciar procesos externos al motor de inferencia (interacción con los usuarios a través de una interfaz gráfica, llamadas a procedimientos locales o remotos, etcétera).

Una vez que las acciones asociadas a la regla disparada se llevan a cabo, el motor de inferencia regresa de nuevo al estado inicial y se prepara para comenzar de nuevo todo el proceso (la actualización de los elementos residentes en la memoria de trabajo posibilita que un conjunto diferente de reglas se instancie en el ciclo siguiente). El motor de inferencia se detendrá después de un número predeterminado de ciclos, cuando se llegue a un estado tal que con los datos disponibles ninguna regla pueda aplicarse o bien cuando se ejecute alguna regla de finalización del razonamiento.

Este mecanismo de control de tres estados se conoce como ciclo *recognize-act* o MSE (*Match-Select-Execute*) y, como se ha visto, no se basa en una estructura estática de control del flujo del programa como ocurre en los métodos tradicionales de control procedimental, sino en la comprobación periódica del estado de los datos almacenados; las reglas se comunican entre sí por medio de los datos y, al contrario que las instrucciones en los lenguajes clásicos, no se ejecutan secuencialmente, de forma que no siempre es posible determinar mediante la inspección de un conjunto de reglas cuál se ejecutará primero o cuál causará que el motor de inferencia termine el proceso de razonamiento. Este tipo de inferencias permite una separación más completa entre el conocimiento (reglas y hechos) y el control del razonamiento (motor de inferencia), en contraste con la computación procedimental en la que generalmente el conocimiento sobre el dominio del problema se mezcla con las instrucciones de control de flujo [Jackson 1998].

Así, la base de conocimiento y el motor de inferencia constituyen subsistemas independientes y, de hecho, existen numerosas herramientas que llevan incorporado ya el motor de inferencia (*shells*) y que para resolver un problema particular únicamente necesitan la implementación del conocimiento específico del domino y, si procede, la configuración personalizada de las opciones del motor de inferencia (estrategia de resolución de conflictos, tipo de encadenamiento, etc.); tal es el caso del *shell* OPS/R2 que se ha seleccionado para implementar el sistema experto de clasificación estelar automática.

A la hora de ejecutar el ciclo MSE existen varios algoritmos de búsqueda a lo largo de las reglas para obtener conclusiones a partir del conocimiento disponible, es decir, diferentes estrategias de razonamiento que dan lugar a distintos mecanismos globales de inferencia, entre los que destacan el encadenamiento hacia delante o razonamiento deductivo guiado por los datos (*forward chaining/data driven/event driven/bottom-up*) y el encadenamiento hacia atrás o razonamiento inductivo guiado por los objetivos (*backward chaining/goal driven/expectation driven/top-down*) [Ligeza 2006].

La técnica conocida como encadenamiento hacia adelante consiste en aplicar sobre la base de reglas de producción el esquema de inferencia *modus ponens* ($[p \wedge (p \rightarrow q)] \rightarrow q$). A partir del conocimiento presente en el instante inicial se van enlazando los datos disponibles con los antecedentes de las reglas, satisfaciéndose de este modo las condiciones y ejecutándose las acciones correspondientes a sus consecuentes, que suelen implicar la creación de nuevos hechos; se sigue así una línea de razonamiento progresivo, dirigido por los datos, en la que los consecuentes de unas reglas se encadenan con los antecedentes de otras hasta que se alcanza un objetivo. Las reglas se aplican en paralelo, es decir, en cualquier iteración una regla asume los datos tal como eran al principio del ciclo, independientemente de si otra regla anterior los ha modificado previamente, por lo tanto los resultados del razonamiento no dependen del orden en el que se definen, almacenan o aplican las reglas. Esta técnica suele utilizarse cuando el propósito final es deducir toda la información posible de un conjunto de hechos ciertos, y es muy eficaz en problemas en los que la explosión combinatoria crea un número aparentemente infinito de posibles respuestas correctas (sistemas de configuración, monitorización inteligente, etcétera). Una de las grandes ventajas del encadenamiento hacia delante es que la recepción de nuevos datos puede disparar nuevos procesos de razonamiento, lo que causa que el motor de inferencia se adapte mejor a situaciones dinámicas en las que es más probable que los hechos cambien rápidamente.

La estrategia de razonamiento denominada encadenamiento hacia atrás consiste en tratar de demostrar la veracidad de un dato (o hipótesis) engarzándolo en las reglas disponibles con el esquema de inferencia *modus ponens*. Considerando las metas u objetivos que se desea alcanzar como consecuentes, se busca en la base de conocimiento los antecedentes correspondientes para satisfacer las condiciones necesarias para llegar a ellos; el razona-

miento sigue así una línea regresiva, dirigida por los objetivos, que va encadenando hacia atrás los consecuentes con los antecedentes para comprobar si existen datos disponibles que los satisfagan. Es preciso resaltar que, aunque se buscan primero, los objetivos siempre se corresponden con los consecuentes de las reglas, es decir, se utiliza siempre el esquema *modus ponens* y no *modus tollens* ($[(p \rightarrow q) \wedge \neg q] \rightarrow \neg p$) como podría suponerse. Esta técnica suele utilizarse en problemas para los que existe un número razonable de posibles respuestas, como puede ser el caso de los sistemas de identificación o de diagnóstico, en los que se trata de confirmar o negar metódicamente cada una de las posibles soluciones, recogiendo la información necesaria a medida que se va avanzando en el proceso de razonamiento.

Estos dos mecanismos de inferencia se corresponden con los dos métodos lógicos clásicos conocidos como estrategia resolutiva/compositiva o método de análisis/síntesis [Russel 2002]. Si bien la distinción entre ambos se basa en la relación direccional entre objetivos y datos, y aunque se denomine dirigido por los objetivos al encadenamiento hacia atrás y dirigido por los datos al encadenamiento hacia delante, es igualmente posible proceder de metas hacia hechos con encadenamiento hacia delante y viceversa; una cosa es la estrategia o técnica de razonamiento (emparejar lados izquierdos o derechos de las reglas) y otra bien distinta es la dirección del proceso de razonamiento (de hechos a objetivos o viceversa). Se puede incluso implementar estrategias oportunistas que combinen ambas formas de razonamiento, por ejemplo cabe partir de un supuesto inicial, inferir una conclusión mediante un razonamiento hacia adelante y luego establecer un encadenamiento hacia atrás hasta encontrar los datos que confirmen dicha conclusión.

OPS/R2, el *shell* seleccionado para el desarrollo del sistema experto de clasificación estelar, soporta ambos tipos de razonamiento. Como descendiente de OPS5/OPS83, incluye soporte completo para la técnica de encadenamiento hacia delante, con potentes capacidades de emparejamiento de patrones, múltiples estrategias de disparo de reglas y facilidades de depuración. Los programas que eligen este tipo de razonamiento se ejecutan mediante el rastreo de los elementos de la memoria de trabajo, buscando emparejamientos con las reglas disponibles en la base de conocimiento (o memoria de producción); las reglas conllevan acciones que pueden modificar o eliminar el elemento seleccionado, crear nuevos hechos o incluso realizar operaciones laterales tales como la comunicación con el usuario. No existen estructuras de control adicionales en el lenguaje, las instrucciones clásicas de control secuencial, condicional y repetitivo se reemplazan por el algoritmo *Match-Select-Execute* descrito anteriormente. Este entorno dispone también de encadenamiento hacia atrás del tipo utilizado en el sistema experto MYCIN, esto es, las reglas inductivas en OPS/R2 utilizan factores de certeza, siendo posible asimismo el establecimiento de prioridades sobre las mismas. Adicionalmente, en este *shell* se incluye también una variante recursiva de la técnica de encadenamiento hacia delante (*recursive forward chaining*). Estas tres estra-

tegias de encadenamiento de reglas están totalmente integradas en OPS/R2, de forma que se puede fácilmente cambiar de una a otra en cualquier momento: no es más complicado para una regla de encadenamiento hacia delante invocar un conjunto de reglas de encadenamiento hacia atrás que para esa misma regla invocar reglas de encadenamiento hacia delante [Forgy 1995a].

Con el objetivo de trasladar el conocimiento específico del dominio de la clasificación espectral recopilado en las fases previas de adquisición, en la implementación en OPS/R2 del sistema experto diseñado se crearon dos módulos diferentes: el primero se corresponde con la base de hechos y en él se recoge en forma de objetos (*frames*) tanto la información descriptiva de la estrella (nombre HD, catálogo, posición en el cielo, etc.) como los valores de las diferentes características espectrales que se han estimado en la etapa de análisis morfológico; en el segundo módulo se implementa la base de reglas, en la que se reproducen los criterios de clasificación empleados por los expertos humanos mediante reglas difusas que hacen referencia a los índices de clasificación seleccionados y a sus valores limítrofes entre tipos espectrales y clases de luminosidad.

En cuanto al motor de inferencia, se utilizó el básico que proporciona OPS/R2 aunque seleccionando las opciones más apropiadas e introduciendo las modificaciones necesarias para obtener estrategias acordes con las pautas de razonamiento seguidas habitualmente en las técnicas manuales de clasificación MK de las estrellas a través del análisis de su espectro óptico. Así, las reglas de producción se encadenarán unas con otras utilizando razonamiento hacia delante (*forward chaining*), pero con una estrategia guiada por los objetivos que se desean alcanzar, i. e. los distintos niveles de clasificación sucesivos (global, tipo espectral, subtipo espectral y luminosidad). Esta técnica de razonamiento determinista, que tiene sus fundamentos en la metodología clásica de Shortliffe y Buchanan [Shortliffe 1984], se combina con el método descrito en la sección anterior basado en factores de certeza e inferencia difusa, para dar cabida a la imprecisión e incertidumbre propias de los procesos de razonamiento en este campo.

El conocimiento almacenado inicialmente en la memoria de trabajo, que no es más que una vista de los objetos de la base de conocimiento en un instante determinado, será el que dé comienzo al proceso de razonamiento. Es decir, una vez que se carguen en la memoria activa los atributos descriptivos de cada estrella y los valores de los diferentes índices espectrales calculados, empezará la ejecución tratando de emparejar dichos elementos iniciales con las condiciones de las reglas de inferencia disponibles; en general el sistema experto para llegar a una conclusión sigue el mencionado ciclo *Match-Select-Execute*, esto es, explora repetidamente la memoria de trabajo en busca de la información necesaria para ejecutar las reglas de la base de reglas. Por tanto, la base de conocimiento se comunica acti-

vamente con la base de reglas y, junto con el motor de inferencia, dirige todo el proceso de clasificación espectral.

La base de reglas de este sistema experto de clasificación está formada por reglas de razonamiento difusas donde la parte IF, o lado izquierdo de la regla (LHS, *left-hand side*), especifica un conjunto de patrones de datos que se refieren bien a los distintos conjuntos difusos que se han definido sobre las variables de entrada, es decir, los índices espectrales estimados en el módulo de análisis, o bien a los diferentes niveles de clasificación que explicitan los objetivos concretos que se persiguen en ese punto del razonamiento (estrategia de encadenamiento hacia delante pero guiada por los objetivos); durante la etapa *Match* del ciclo de ejecución, estos antecedentes se deben emparejar de forma consistente con alguna porción del conjunto de datos que residen en la memoria de trabajo (en OPS/R2 este proceso se realiza de forma transparente al usuario por medio del algoritmo ReteII). La parte THEN, o lado derecho de la regla (RHS, *right-hand side*), indica el conjunto de acciones (creación de nuevos objetivos de clasificación, modificación de los datos de la memoria de trabajo, cálculo del grado de confianza asociado a cada conclusión, interacción con el usuario del sistema, etc.) que es preciso llevar a cabo cuando se satisfacen las condiciones LHS. Al mismo tiempo, las reglas llevan asociado un factor de certeza que expresa numéricamente la fiabilidad que los expertos atribuyen a los criterios de clasificación implícitos en cada una de ellas; además, junto con las conclusiones referidas a la clasificación MK, en la base de reglas se incluyen también las funciones de transferencia necesarias para estimar el grado de confianza de las mismas.

En la figura 46 se muestra un ejemplo de una regla típica implementada en la base de reglas del sistema experto de clasificación MK; en concreto esta sería una de las que se encargarán de determinar si una estrella, para la que a través de reglas anteriores se ha deducido que es tardía (con una probabilidad significativa), pertenece al tipo espectral M o al tipo espectral K. Los antecedentes de la regla hacen alusión por una parte al objetivo perseguido en ese preciso momento del razonamiento, i. e. determinar el tipo espectral, y por otra a los valores de los índices espectrales implicados, es decir, la banda de TiO situada en 6262 Å; de esta forma, la regla sólo se ejecutará cuando realmente se esté tratando de deducir el tipo espectral para estrellas clasificadas previamente como tardías con una probabilidad superior al umbral μ_{TARDIA}, para las que además se haya obtenido en el módulo de análisis morfológico un valor significativo de la profundidad de la banda de TiO 6262 Å y este se incluya en el intervalo [15, 25]. Los consecuentes de la regla determinan la serie de acciones que se llevarán a cabo una vez se active la misma, que en este caso particular implicarían la asignación de un tipo espectral (K, M) a la estrella con una probabilidad calculada en función del valor de la banda molecular, del factor de certeza de la regla (0.8) y de la probabilidad de que la estrella sea tardía (que se arrastra de la cadena de inferencias anterior

a la activación de esta regla); asimismo, mediante la inclusión en la memoria activa de un nuevo objetivo se guía nuevamente el razonamiento, indicándole al sistema experto que la siguiente meta a perseguir es la determinación del subtipo espectral. Como se observa, cada regla incluye su propio factor de certidumbre y las diferentes funciones para obtener las conclusiones siguiendo, como ya se ha descrito en la sección anterior, el método de inferencia difusa propuesto por Takagi-Sugeno [Takagi 1985].

```
REGLA_TIPOESPECTRAL_KM

IF
   (Objetivo=clasificacionTipo)
   AND
   ((Estrella.clasificacionGlobal=Tardia) AND (probTardia>μ_TARDIA))
   AND
   (Existe Estrella.Banda6262)
   AND
   (15<=(Estrella.Banda6262)<=25)

THEN [cf=0.8]
   (Estrella.clasificacionTipo=M) AND
   (Estrella.probM= F_M(Estrella.Banda6262, cf, Estrella.probTardia))
   AND
   (Estrella.clasificacionTipo=K) AND
   (Estrella.probK= F_K(Estrella.Banda6262, cf, Estrella.probTardia))
   AND
   (Objetivo=clasificacionSubtipo)
```

Figura 46. Pseudocódigo de una de las reglas implementadas para obtener el tipo espectral en estrellas tardías

Después de que se lleve a cabo el emparejamiento de los antecedentes con los hechos presentes en la memoria de trabajo, el sistema experto debe decidir cuál de las posibles reglas cuyas condiciones han sido satisfechas se activará en primer lugar, es decir, tiene que establecer un orden de ejecución siguiendo una estrategia determinada de selección de reglas. En nuestro caso, de las posibles heurísticas que proporciona OPS/R2, se ha elegido la estrategia MEA [Newel 1963] consistente en seleccionar de entre todas las reglas que aún no se han ejecutado aquella cuyo primer antecedente se ha incorporado más recientemente a la memoria de trabajo (en caso de conflicto persistente se utilizarán los criterios *recency* y *specificity* descritos en la sección precedente); esta estrategia combinada con la implementación realizada, que incluye el objetivo de clasificación espectral perseguido como primer antecedente de cada regla, posibilita el razonamiento guiado por objetivos en un entorno diseñado específicamente para utilizar la técnica de encadenamiento hacia delante, y condu-

ce al sistema experto a la identificación y observancia de una sucesión de metas parciales o subobjetivos al tiempo que persigue satisfacer el objetivo global, que no es otro que determinar la clasificación MK de las estrellas [Forgy 1981] [Hayes-Roth 1983].

En la tercera fase del ciclo (*Execute*), una vez se ha seleccionado la siguiente regla que se va a ejecutar, el sistema experto lleva a cabo las acciones definidas en la parte derecha de la misma, las cuales generalmente implican la asignación de un tipo/subtipo espectral o clase de luminosidad concreta, dependiendo del objetivo actual de clasificación que se esté tratando de satisfacer, y el cómputo de la confianza en dicha conclusión basándose en el factor de certeza de la regla, en las funciones de transferencia específicas de los consecuentes y en el grado de confianza estimado para los niveles anteriores de clasificación, si los hubiera; además de actualizar los datos almacenados en la memoria de trabajo, en concreto los referentes a la clasificación de la estrella, es frecuente que las acciones RHS de las reglas de clasificación impliquen operaciones de interacción con los usuarios finales del sistema experto, así como un cierto control del proceso de razonamiento mediante la inclusión de nuevos objetivos de clasificación en la memoria activa.

Finalmente, cuando se han llevado a cabo todas las acciones indicadas por la regla activa, el sistema experto retorna a la primera etapa (*Match*) para dar comienzo a un nuevo ciclo de ejecución hasta que finalice todo el proceso y se pueda alcanzar una conclusión final que se acompañará de una estimación de la confianza en la misma.

El esquema de razonamiento difuso en nuestro sistema experto se implementó tomando como punto de partida el modelo de Takagi-Sugeno [Takagi 1985], adaptando apropiadamente el método de inferencia MAX-MIN para incluir las singularidades del proceso de análisis y clasificación espectral. Como ya se indicó en la sección precedente, la respuesta del sistema se corresponderá con la conclusión que presente un mayor grado de confianza final después de que se haya combinado la influencia de todas las reglas que se refieren a las mismas conclusiones mediante el cálculo de una media de los grados de confianza parcial de cada una de ellas (obtenidos aplicando las funciones de transferencia adecuadas), ponderada con los pesos o grados de relevancia (determinados trasladando a los consecuentes el resultado de la agregación de los antecedentes de cada regla por medio de los operadores difusos T_{min} y T_{max}). Así, denotando la base de reglas del sistema como $B = \{R_i\}$ y considerando que una regla particular está formada por p premisas y c conclusiones, es decir, $R_i = \{P_j, C_k\ 1 \leq j \leq p;\ 1 \leq k \leq c\}$ entonces el grado de confianza parcial de cada conclusión se calcularía como sigue:

$$GC_i(C_k) = F_{ik}(Indice_{i1}, Indice_{i2}, ..., Indice_{in}, CF_i, GC_{ant}),$$

donde F_{ik} es la función de transferencia asociada a la conclusión C_k mediante la regla R_i, cuyos parámetros estarán constituidos por los n índices de clasificación a los que hacen alusión las p premisas de la regla, i. e. $Indice_{il}$ $(1 \leq l \leq p)$; CF_i es el factor de certeza que se ha asignado a la regla R_i y, finalmente, GC_{ant} se corresponde con el grado de confianza estimado previamente para las reglas pertinentes del nivel de clasificación anterior del que depende la inferencia de la regla actual. Tal y como puede deducirse fácilmente de la ecuación anterior, las funciones de transferencia están contextualizadas para cada tipo/subtipo espectral o clase de luminosidad (conclusiones), además su definición concreta así como las zonas de indecisión (aquellas en las que el sistema no puede clasificar la estrella con un grado de confianza suficientemente significativo) se establecieron a través de los espectros de los catálogos guía, bajo la supervisión de los expertos en espectroscopia que han colaborado en el diseño del sistema de clasificación estelar automática propuesto.

Después de determinar los distintos grados de confianza parcial para cada conclusión, el valor real de la confianza final del sistema en dicha conclusión se obtiene combinando la influencia de todas las reglas que hacen referencia a la misma en sus consecuentes; esto es, sean R_i y R_j dos reglas diferentes que aluden a la misma conclusión C_k, entonces el grado de confianza final de dicha conclusión se obtendría mediante la siguiente ecuación:

$$GC_{final}(C_k) = \frac{w_i\, GC_i(C_k) + w_j\, GC_j(C_k) - w_i\, GC_i(C_k) \cdot w_j\, GC_j(C_k)}{w_i + w_j},$$

donde w_i y w_j se corresponden con los grados de relevancia (o influencia) de las reglas R_i y R_j, respectivamente, los cuales se obtienen aplicando el método MIN para resolver la implicación de cada regla y trasladar a los consecuentes el resultado de la combinación de los antecedentes. El sistema experto designará como respuesta final del proceso de razonamiento difuso aquella conclusión para la que se haya obtenido, mediante las ecuaciones anteriores, un grado de confianza mayor. Esto es:

$$C_{final} = \left\{ C_m \mid GC_{final}(C_m) = \max_i \{GC_{final}(C_i)\} \right\}$$

Los árboles de decisión del sistema experto de clasificación automática se muestran en la figura 47, en la que se han resaltado en diferentes colores los dos mecanismos fundamentales de razonamiento que se incluyen en el mismo. En un ejemplo típico de razonamiento, las reglas se van ejecutando de forma determinista encadenándose hacia delante (*forward chaining*) según los distintos objetivos parciales de clasificación que es preciso ir satisfaciendo, hasta que se alcance un resultado concluyente; este tipo de razonamiento se muestra en trazo negro en la figura. Sin embargo, también es posible que las reglas se ejecu-

ten primeramente siguiendo la estrategia anterior (encadenamiento hacia delante guiado por los objetivos de clasificación) hasta que llegue un momento en el que se obtenga un resultado ambiguo (denotado en la figura con la etiqueta IND), lo cual significa que a través de las reglas activas el sistema no es capaz de discriminar entre dos grupos consecutivos. Esto se debe principalmente a que los valores de los índices de clasificación se hallan dentro de las zonas límite entre tipos (zonas de incertidumbre) que se establecieron en el proceso de definición de las funciones de transferencia de las distintas conclusiones. Para resolver esta situación, se ejecutarán todas las reglas del siguiente nivel de clasificación que afecten a los tipos implicados; esta segunda posibilidad es la que se ha destacado en azul en la figura 47.

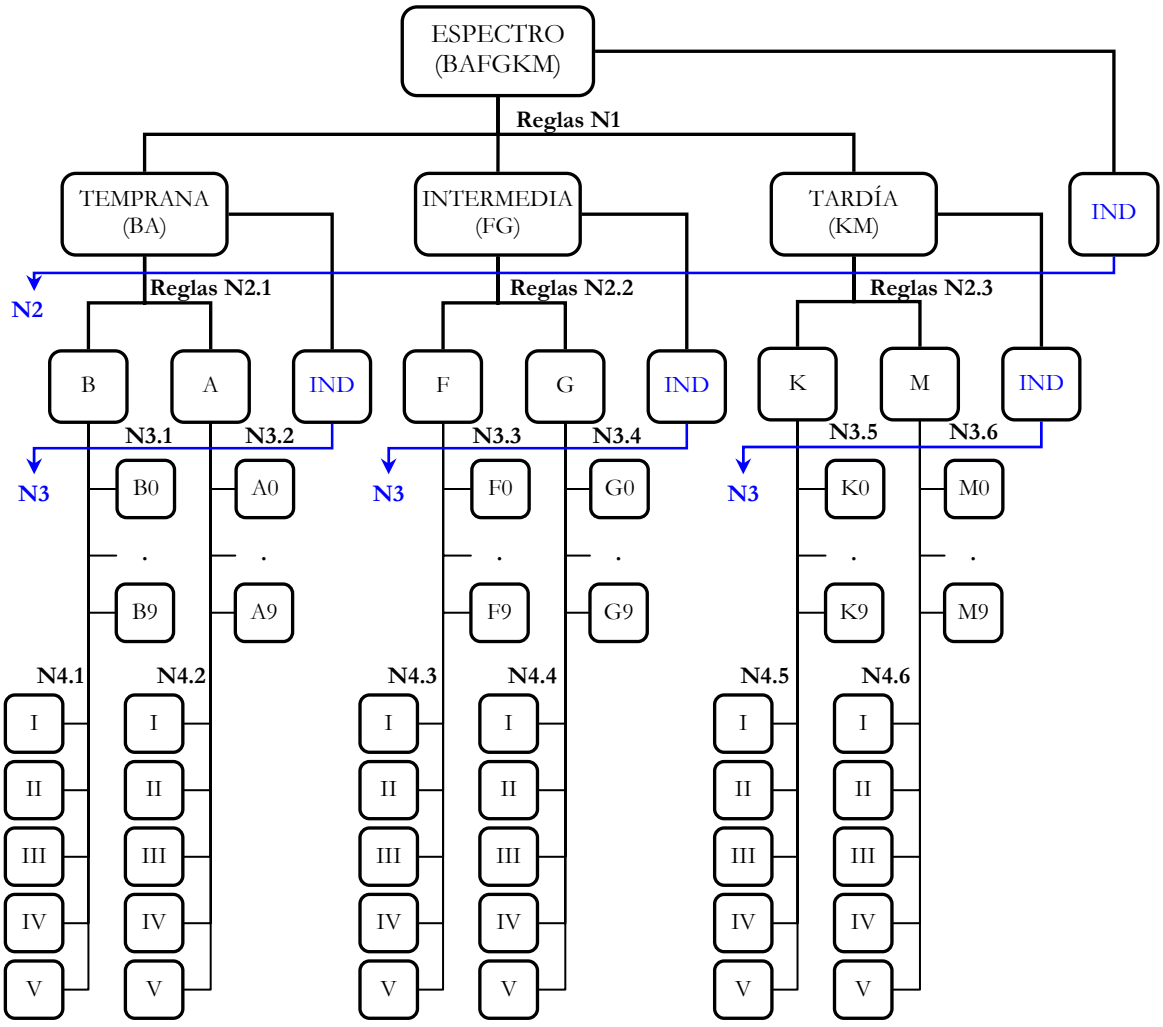


Figura 47. Esquema en forma de árbol del proceso de razonamiento del sistema experto de clasificación

Tal y como puede observarse en el árbol anterior, la luminosidad de la estrella se determina siempre una vez que se ha inferido su tipo espectral (reglas del nivel 4), puesto que en el análisis de sensibilidad previo al diseño del sistema experto se hizo patente que la

mayoría de los índices espectrales de clasificación considerados son capaces de discriminar más certeramente la clase de luminosidad para unos tipos espectrales específicos, con lo que finalmente se optó por dirigir el proceso de razonamiento de forma que el nivel de luminosidad se deduzca invariablemente después de haberse establecido el tipo espectral. Aunque esta es la opción de ejecución habitual, se implementó también una versión del sistema experto con reglas específicas e independientes para obtener la luminosidad, si bien el rendimiento obtenido con esta alternativa no ha sido plenamente satisfactorio.

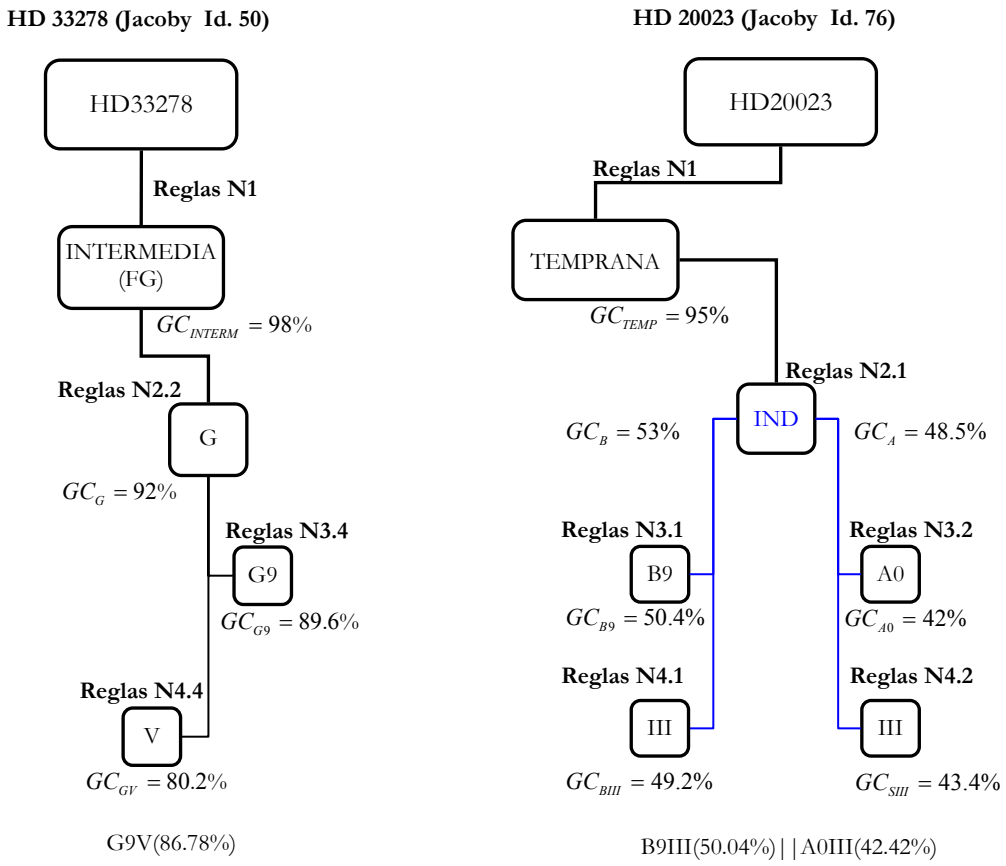


Figura 48a-b. Razonamiento del sistema experto para las estrellas HD 33278 y HD 20023 del catálogo de Jacoby 1984, indicando la clasificación y el grado de confianza de la misma

Con cualquiera de las dos líneas de razonamiento descritas se debería llegar al final a una conclusión que incluya la clasificación global de la estrella (temprana, intermedia o tardía), el tipo espectral (BAFGKM), el subtipo espectral (0-9) y la clase de luminosidad de la misma (I-V), así como el grado de confianza final correspondiente, estimado tal y como se ha indicado en las ecuaciones precedentes. Adicionalmente, el sistema experto aportará una clasificación alternativa a la principal cuando se haya obtenido una primera clasificación con un valor significativamente pequeño de confianza (concretamente menor del 54%), con el objetivo de emular el comportamiento que siguen los astrofísicos experimentados en

aquellas situaciones en las que no son capaces de decidir entre dos clasificaciones consecutivas, optando entonces por una clasificación mixta (p. ej. A9F0 III, G8 III-IV, etcétera). Esta característica resalta otra de las capacidades del sistema experto, que consiste en la obtención de diagnósticos más exactos que los que obtendrían los principiantes sobre los mismos objetos en entornos del mundo real caracterizados por información incierta.

La figura 48 ilustra el razonamiento seguido por el sistema automático para determinar la clasificación MK de dos estrellas pertenecientes al catálogo de Jacoby [Jacoby 1984]. En el primer ejemplo, el sistema experto concluye que la estrella HD 33278 (espectro con id. 50 del catálogo) presenta tipo G9V con un valor de confianza bastante significativo (86.78%). Para llegar a este resultado se ejecutan inicialmente todas las reglas correspondientes al primer nivel, es decir, aquellas que tratan de establecer la clasificación global de la estrella (temprana, intermedia, tardía), obteniéndose que esta es intermedia (FG) con un grado de confianza elevado (98%), pues así lo indican las medidas de las líneas de Ca II e H I principalmente; a continuación, siguiendo la estrategia de encadenamiento hacia delante, se tratará de determinar el tipo espectral sabiendo ya que la estrella es intermedia, para lo cual se aplican todas las reglas del nivel 2.2 y se obtiene, de nuevo con un grado de confianza notable (92%), que la estrella pertenece al tipo espectral G; en este punto se ejecutan por un lado las reglas implementadas para establecer el subtipo espectral de las estrellas de tipo G (nivel 3.4) y, por otro, las que tratan de resolver la clase de luminosidad (nivel 4.4); combinando ambas deducciones finales, se llega a la conclusión única de que la clasificación MK de la estrella en cuestión sería G9V.

En el segundo ejemplo de la figura 48 se muestra la otra vía de razonamiento para la estrella HD 20023 (id. 76 del catálogo). Al igual que en el caso anterior, primeramente se aplican todas las reglas que tratan de determinar la clasificación global, obteniéndose que la estrella es incuestionablemente temprana (grado de confianza 95%); seguidamente el sistema experto aplicará todas las reglas oportunas para discriminar entre los tipos B y A (nivel 2.1), sin embargo en esta ocasión no será capaz de obtener una respuesta precisa ya que existen varias evidencias que apoyan ambas hipótesis con unos grados de confianza similares y no muy elevados (alrededor del 50%); por lo tanto, el sistema se verá forzado a seguir ambas ramas del árbol de decisión, es decir, ejecutará todas las reglas de los niveles 3.1 y 3.2. Así finalmente se obtendrán dos respuestas diferentes: por una de las ramas se llegará a la conclusión de que la estrella es B9III, mientras que por la otra se deduce que es A0III; como los grados de confianza finales son relativamente bajos (inferiores al 54%), se presentará como respuesta una clasificación MK principal (B9III, por presentar un valor mayor de confianza) acompañada de una alternativa potencialmente posible (A0III).

La estrategia mixta de razonamiento descrita, unida a la combinación de reglas de producción clásicas con factores de certeza e inferencia difusa, nos ha permitido alcanzar

una notable adaptación al proceso de razonamiento humano que siguen los expertos para determinar la clasificación MK de las estrellas, posibilitando asimismo la gestión eficiente de la imprecisión e incertidumbre implícitas en los mecanismos deductivos que se utilizan frecuentemente en este campo. En la figura 49 se muestra un cuadro comparativo de ambos procesos, el automático llevado a cabo por el sistema experto desarrollado, y el manual que habitualmente emplean los expertos para abordar la clasificación.

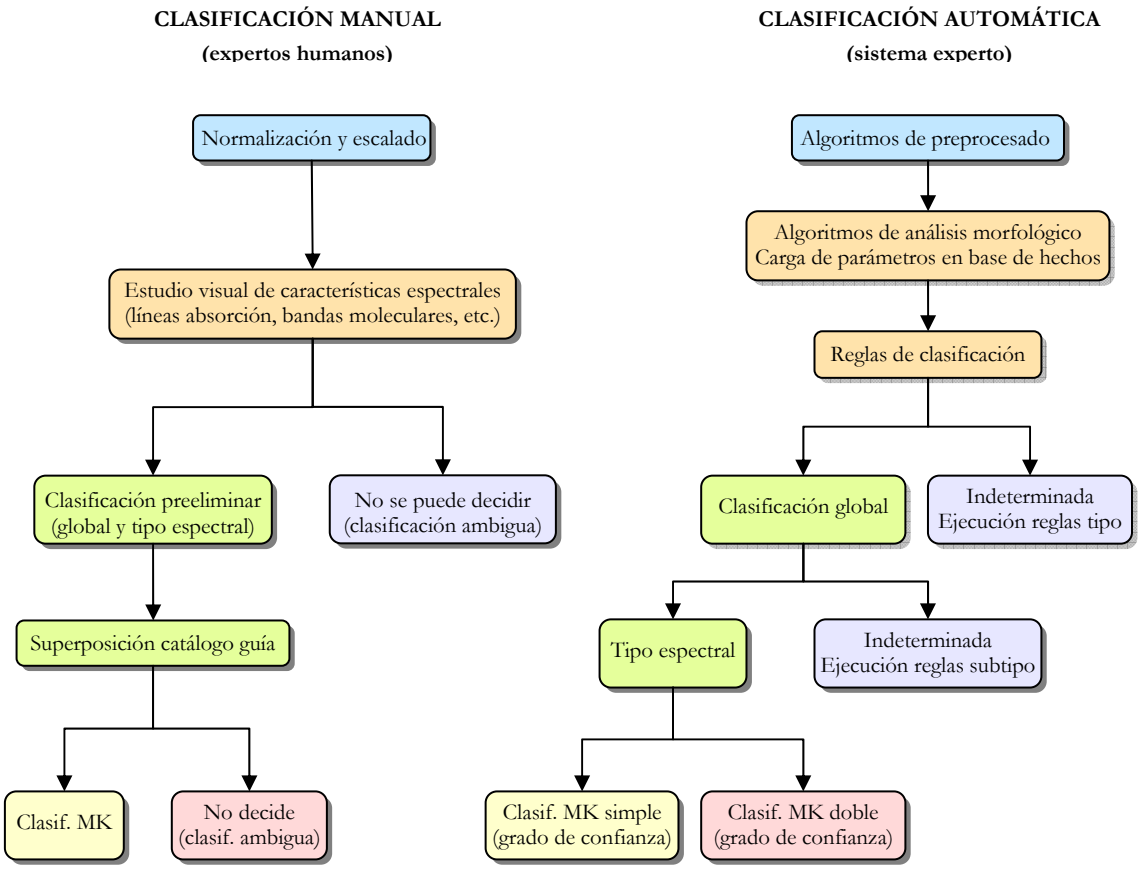


Figura 49. Comparación de las fases de la técnica manual de clasificación con el sistema experto diseñado

El *shell* designado para la implementación, OPS/R2, proporciona diferentes esquemas estándares de razonamiento, y admite además las modificaciones necesarias para adaptarlos al dominio correspondiente e incluso la definición completa de una nueva estrategia que se adecue de forma óptima. Para el sistema experto de clasificación espectral se seleccionó la estrategia estándar de encadenamiento hacia delante, si bien se implementó en OPS/R2 un módulo específico en el que se incluyen las funciones de transferencia de las conclusiones, los algoritmos para estimar la confianza parcial y final de las mismas y el mecanismo para posibilitar que el sistema pueda adoptar oportunamente las dos vías de razonamiento expuestas en las figuras precedentes.

Desde el punto de vista del usuario final puede resultar interesante seguir el proceso de razonamiento del sistema de clasificación, con el fin de conocer cómo llega este a sus conclusiones. Para facilitar esta tarea, se dotó al sistema experto de un subsistema de explicación (módulo no presente en la versión original de OPS/R2) que le permite exponer el análisis completo del problema así como justificar las soluciones propuestas. Este mecanismo autoexplicativo se implementó añadiendo la funcionalidad necesaria a los módulos desarrollados para que estos fuesen capaces de transmitir a la aplicación de análisis espectral la secuencia de reglas que se ejecutan hasta alcanzar una conclusión final, con el propósito de mostrarlas posteriormente al usuario de la forma más simple e inteligible posible a través de la interfaz de dicha aplicación, que se convertirá al mismo tiempo en la propia interfaz del sistema experto.

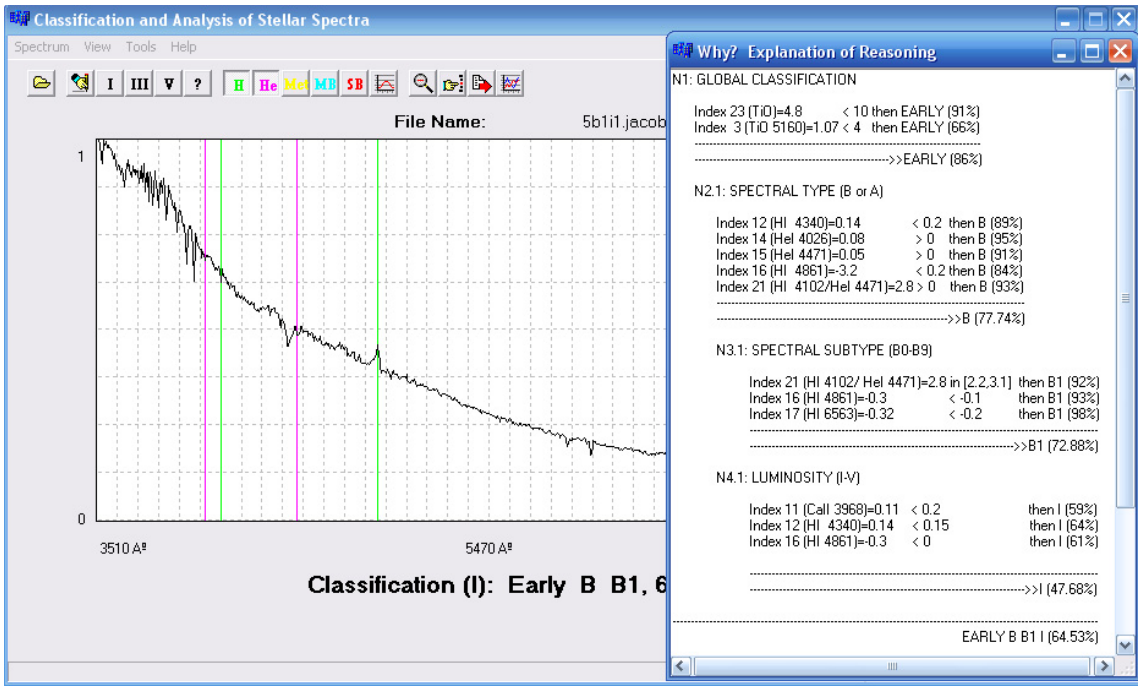


Figura 50. Interfaz del sistema de clasificación con la opción de explicación y justificación de resultados

No es tarea fácil representar mediante un texto todas las relaciones e inferencias que lleva a cabo el sistema en su proceso de búsqueda de soluciones, por lo que en muchos casos se opta por un formato gráfico para representar la sucesión de acciones ejecutadas y los hechos que se han ido coligiendo de las mismas. Como se muestra en la figura 50, en nuestro sistema experto de clasificación la explicación del razonamiento se presenta a los usuarios en un formato de texto claro y sencillo (justificación de la ejecución de las reglas junto con las conclusiones que se siguen de las mismas) dispuesto gráficamente de forma que se puedan distinguir fácilmente las distintas fases de inferencia que han tenido lugar y que se corresponden, evidentemente, con los distintos subobjetivos de clasificación.

La inclusión de la función de autoexplicación en un sistema experto proporciona beneficios tanto a sus usuarios finales, permitiéndoles entender el significado de las respuestas obtenidas y comprobar así la exactitud de los razonamientos, como a los propios diseñadores del mismo, ya que siempre es deseable conocer el grado de progreso en el tratamiento del problema durante la fase de desarrollo, y además estos últimos pueden aprovechar esta característica para detectar prematuramente inexactitudes o errores [Liebowitz 1997].

En el sistema experto de clasificación MK desarrollado, el módulo de explicación adquiere un valor añadido como mecanismo de confirmación, descarte o incluso obtención de nuevas reglas de clasificación, y se convierte además en una herramienta didáctica imprescindible para la formación y entrenamiento de nuevos espectroscopistas.

Los diferentes módulos del sistema experto implementados en lenguaje OPS (base de reglas, base de hechos, estrategia de razonamiento, mecanismo de explicación, etc.) se han enlazado con la aplicación de análisis espectral, desarrollada en C++, a través de librerías dinámicas (DLLs); esta opción que brinda el entorno OPS/R2 permite acceder de forma fácil desde el código C a los elementos de la memoria de trabajo del sistema experto, en concreto a aquellos incluidos en la parte de acción (RHS) de las reglas, ya que la referencia a elementos integrantes de la parte condicional (LHS) podría dar lugar a efectos colaterales no deseados. De esta forma se puedan cargar inicialmente en la memoria de trabajo los resultados de los análisis llevados a cabo sobre las estrellas en las fases previas a la clasificación, posibilitándose asimismo la trasmisión de las salidas del sistema experto a la interfaz de la herramienta de análisis, constituidas estas por la clasificación de los espectros de entrada en cuatro niveles (global, tipo, subtipo y luminosidad) acompañada del grado de confianza del sistema en sus propias conclusiones y de la explicación del razonamiento que se ha seguido para alcanzarlas.

La interfaz del módulo de análisis permite la visualización cómoda y sencilla tanto de los espectros que se desea analizar como de los resultados obtenidos con las diferentes técnicas de clasificación implementadas. En este sentido, admite la posibilidad de visualizar en detalle distintas zonas espectrales, resaltar los índices espectrales de interés, obtener el valor del flujo energético para una longitud de onda determinada, etc. Como se puede apreciar en la figura 50, en la parte superior de la aplicación se incluyen unos menús que permiten al usuario decidir qué operación desea realizar: seleccionar el espectro que se pretende clasificar, convertir su formato, escoger los análisis morfológicos que se quieren efectuar sobre el mismo, visualizar sus características más destacadas (líneas de absorción, bandas moleculares), compararlo con los espectros de los catálogos de referencia, lanzar el sistema experto para determinar la clasificación MK del espectro y obtener al mismo tiempo una explicación del proceso seguido para alcanzar la respuesta ofrecida.

En el anexo IV se recogen los detalles de implementación más relevantes de los módulos desarrollados, así como el pseudocódigo de las reglas incluidas en la base de conocimiento de este primer sistema experto propuesto para llevar a cabo la clasificación no supervisada de las estrellas a través de su espectro óptico.

4.4.4 Verificación, validación y evaluación

En cualquier proyecto de desarrollo de software una de las fases más importantes para garantizar tanto la corrección de las respuestas o salidas del sistema, como la satisfacción del usuario final con el producto desarrollado es el proceso de pruebas, el cual engloba la verificación, validación y evaluación de la solución propuesta. Puesto que los sistemas expertos no son otra cosa que una solución computacional a un problema en un determinado domino de aplicación, no debería minimizarse la importancia de la fase de pruebas en el desarrollo de los mismos. Los sistemas basados en el conocimiento emplean técnicas computacionales que implican realizar conjeturas, tal y como hacen los expertos humanos en sus procesos de razonamiento y, al igual que ellos, estos sistemas se equivocarán en algunas ocasiones, aun cuando su propio diseño no contenga errores. Es probable que el conocimiento sobre el que se sustenta el desarrollo de un sistema experto, incluso aunque sea el mejor disponible, no pueda predecir completamente lo que va a ocurrir en todos los casos; por esta única razón, ya debería ser una tarea crucial comprobar que las recomendaciones o estimaciones proporcionadas por el sistema son correctas y fiables. Además, esta fase de pruebas adquiere especial relevancia cuando los usuarios habituales del sistema van a ser personas con menos pericia que los expertos del campo, puesto que estos no podrán juzgar por sí mismos la exactitud y adecuación de las respuestas del mismo.

Los sistemas expertos contienen únicamente una cantidad de conocimiento concentrado en áreas cuidadosamente definidas, es decir, no existe para ellos una verdad causal a la que recurrir en casos de ambigüedad. Esto significa que, aparte de los desaciertos por falta de conocimiento para realizar estimaciones en todos los casos reales, un sistema que contenga algunos errores u omisiones en su base de conocimiento podría cometer, sin ni siquiera percatarse de ello, equivocaciones que pueden parecer ridículas o absurdas a un humano. Si el propio sistema experto no se da cuenta de su error, y además está siendo utilizado por una persona con habilidad limitada, estos fallos no se detectarán a su debido tiempo pudiendo ocasionar complicaciones no deseadas. Por lo tanto, siempre que el sistema vaya a ser utilizado habitualmente por personal sin experiencia y las decisiones adoptadas puedan producir daños si se toman equivocadamente, se requerirá invertir un esfuerzo mayor y más serio aun en las etapas de verificación, validación y evaluación [Smith 1993].

Uno de los principales impedimentos para que la fase de pruebas de los sistemas expertos tenga pleno éxito es la propia naturaleza de los mismos; como ya se ha mencionado, estos a menudo se emplean para trabajar con información imprecisa o incompleta o en situaciones estructuradas incorrectamente [Giarratano 2004]. Existe además un problema añadido cuando se trata de verificar, validar y evaluar los sistemas expertos de acuerdo a las definiciones que se proporcionaron previamente, ya que las especificaciones de estos sistemas generalmente no facilitan un criterio robusto para llevar a cabo las pruebas; por ejemplo, recoger en las especificaciones que un sistema de reconocimiento de voz debería entender las palabras no define un estándar verificable para el sistema. Obviamente es inevitable incluir cierta vaguedad en las especificaciones de los sistemas expertos, pues si realmente hubiese especificaciones lo suficientemente precisas podría ser más efectivo diseñar un sistema convencional para solventar de forma sencilla el problema planteado.

Durante el desarrollo de MYCIN, uno de los sistemas expertos pioneros, los diseñadores buscaron un método para evaluar los resultados obtenidos por el sistema automático de diagnosis médica; se llevaron a cabo varios estudios, con diferentes casos clínicos, para comprobar el rendimiento del sistema experto a través de la comparación de sus recomendaciones con las dadas por los doctores a partir de cuyo conocimiento se había construido el propio sistema [Shortliffe 1984]. Después de estos experimentos iniciales, los autores se percataron de que era necesario realizar otro tipo de pruebas, pues comprendieron que los resultados de la fase de verificación y validación del sistema experto estaban fuertemente influenciados por el hecho de que los propios evaluadores eran conscientes de que los diagnósticos presentados habían sido generados por un programa de ordenador. Para neutralizar dicha influencia se llevó a cabo un nuevo estudio, pero esta vez ciego: los evaluadores no sabían de antemano si los resultados procedían de un colega o del propio MYCIN [Yu 1984]. Los resultados de este análisis final demostraron que el sistema experto era capaz de producir recomendaciones tan acertadas como las de los expertos en diagnosis médica.

A medida que se han ido implementando más sistemas expertos han surgido diversas técnicas para emprender la fase de pruebas, si bien todas ellas podrían agruparse dentro de dos tendencias generales: en primer lugar, están aquellos autores que intentan aplicar las técnicas tradicionales de ingeniería del software al proceso de validación, verificación y evaluación de los sistemas basados en conocimiento [Finlay 1988] [Bahill 1991] [Coenen 1999]; el segundo grupo lo constituyen quienes consideran que los sistemas expertos son diferentes a los sistemas convencionales y, por lo tanto, concluyen que es preciso que se desarrollen nuevas técnicas de prueba específicas para ellos [O'Leary 1988] [Green 1990] [O'Keefe 1993].

En la ingeniería del software tradicional, las pruebas se consideran una parte integral del proceso de desarrollo. Sin embargo, en el campo de los sistemas expertos existe poco consenso sobre si esta fase es realmente necesaria y, si lo fuera, sobre la técnica más adecuada para llevarla a cabo. Muchos de los métodos que se han propuesto para probar sistemas expertos se diseñaron de forma específica para un dominio particular, y están tan escasamente documentados que es difícil, por no decir imposible, que lleguen a poder reutilizarse por cualquier otro que no sea su propio autor. La complejidad y la incertidumbre relacionadas con esta tarea, así como la falta de un marco formal, la no estandarización de la terminología y, en definitiva, la carencia de entendimiento en esta área, han conducido a una situación caracterizada por la ausencia de una fase de pruebas seria y extensa en el desarrollo de muchos de los sistemas expertos actuales.

El desarrollo de métricas del software es una forma viable, y a menudo la única, de medir el progreso real de un sistema durante su desarrollo; las métricas de diseño son las más prometedoras ya que ayudarían al desarrollador incluso antes de que se haya comenzado a codificar. Sin embargo las métricas para los sistemas expertos están todavía en una fase muy temprana, aun cuando su formalización sería muy deseable para ayudar a la comunidad de ingenieros del conocimiento a producir sistemas más fiables y eficientes. Por ello, hoy en día todavía la gran mayoría de los métodos utilizados para abordar la verificación, validación y evaluación de los sistemas basados en conocimiento se diseñan totalmente ad hoc para cada aplicación específica, o bien se basan en las técnicas generales de prueba del software.

La verificación de un sistema experto, o de cualquier otro sistema de información, consiste en revisar que el sistema se haya implementado de acuerdo a sus especificaciones, esto es, se trata de garantizar que el sistema se ha construido correctamente. En el proceso de verificación se incluyen aspectos como la comprobación de que el sistema refleje adecuadamente los requerimientos, que la codificación refleje exactamente el diseño detallado o que el código sea correcto en relación a la sintaxis del lenguaje de desarrollo, es decir, se verifica que no existen, en definitiva, errores técnicos.

La validación en cambio trata de comprobar que el sistema experto construido es el correcto y que realmente satisface el propósito para el que fue diseñado. De esta forma, se intentará determinar si el sistema realiza todas las funciones recogidas en la especificación de requisitos, así como si este es utilizable para los objetivos que se pretenden. El alcance del conjunto de especificaciones no acostumbra a ser muy preciso, por lo que es prácticamente inviable probar un sistema experto bajo todos los eventos posibles; por lo tanto tampoco será posible tener la garantía absoluta de que un sistema determinado satisface sus especificaciones, solamente se puede estimar en cierta forma la probabilidad de que este sea válido. Los aspectos concernientes a la validación de un sistema experto incluyen la compa-

ración de las inferencias con el conocimiento y las heurísticas de los expertos del campo o con los datos históricos o conocidos; la estimación de la fracción de observaciones pertinentes que puede simular el sistema; o la determinación de la fracción de predicciones del modelo que son empíricamente correctas.

Finalmente, la evaluación de un sistema experto pretende descubrir el grado de aceptación entre los usuarios finales y su rendimiento dentro del campo de aplicación. Es decir, se trata de estimar las probabilidades reales de utilización que tiene el sistema, siempre que sea apropiado su uso, una vez que este se haya instalado. En el proceso de evaluación se determinará la eficiencia, comodidad y sencillez de utilización del sistema, así como si este es válido como herramienta de entrenamiento y si ofrece una ventaja real sobre las prácticas que trata de sustituir.

En otras palabras, se verifica para demostrar que el sistema se ha construido correctamente, se valida para corroborar que se ha construido el sistema correcto, y se evalúa para medir la utilidad real del mismo [Nikolopoulos 1997].

En la práctica, y a falta de un método formal, se puede considerar que un sistema experto es correcto cuando es completo, consistente y satisface los requerimientos de sus especificaciones. La completitud viene definida por la cobertura total del dominio, es decir, se logra cuando el sistema experto proporciona soluciones correctas para la mayoría de las entradas del área de interés; para asegurar la completitud se deben explorar las reglas ausentes, inalcanzables o muertas. Por otro lado, la consistencia se refiere al concepto matemático aplicado a los antecedentes y consecuentes de las reglas, esto es, se consigue cuando el sistema experto proporciona un conjunto consistente de conclusiones para todas las entradas posibles; así para garantizar que la base de conocimiento sea estable y robusta se debe comprobar la existencia de reglas redundantes, circulares, subsumidas (incluidas en otras), condiciones innecesarias en los antecedentes, reglas en conflicto, etc. Bajo estos aspectos de interés, algunos autores han tratado de formular métodos para evaluar la fiabilidad de los sistemas expertos basados en reglas [Brown 1995] [Pomykalski 1996].

El método básico para confirmar cualquiera de las características anteriores consiste en representar la propiedad como una fórmula lógica para luego tratar de verificarla aplicando simplificaciones algebraicas o bien empleando alguna técnica basada en la comprobación caso a caso. Así, para demostrar la completitud se construye una fórmula lógica que representa las condiciones bajo las que el sistema es completo y se intenta demostrar que es verdadera; en cambio para establecer la consistencia se debería componer una fórmula lógica que representase las condiciones bajo las cuales ésta falla y demostrar que es falsa. Por otro lado, para determinar el grado de satisfacción de una especificación se utiliza más habitualmente una medida estadística: la fracción esperada de entradas para las que se satisfará

la especificación, lo cual proporciona una idea aproximada de la fiabilidad del sistema experto. Se puede estimar dicha fracción seleccionando una muestra de datos lo suficientemente amplia, ejecutando el sistema experto sobre ella y analizando los resultados experimentales.

En grandes sistemas expertos reales con cientos de reglas estos aspectos son difíciles de determinar, pues podrían existir miles de caminos computacionales y cada uno de ellos debería tratarse con pruebas formales para establecer plenamente la corrección del sistema. Para reducir el tamaño de las pruebas, un enfoque útil podría consistir en dividir las bases de conocimiento en dos o más subconjuntos interrelacionados que resulten más manejables, y tratar estos como sistemas individuales, ya que en sistemas expertos no excesivamente complejos es posible realizar pruebas directas de completitud, consistencia y satisfacción de las especificaciones.

Siguiendo por tanto una de las tendencias actuales en el área de desarrollo de sistemas expertos, para abordar la fase de pruebas del sistema automático de clasificación espectral MK se ha diseñado un método específico (ad hoc) que combina muchas de las prácticas que se han descrito. En primer lugar se examinó la corrección técnica del sistema experto propuesto, verificando el diseño y codificación del mismo para garantizar la no inclusión de errores en ninguna de las fases del desarrollo. A continuación se llevó a cabo la comprobación de la consistencia y completitud del sistema a través de un algoritmo de búsqueda sistemática en los módulos implementados de reglas inalcanzables, ausentes, redundantes, subsumidas, circulares o contradictorias. Todos los casos ambiguos detectados se estudiaron detenidamente con la ayuda de los expertos que colaboraron en el diseño del sistema, de forma que como resultado de este proceso se refinó la base de reglas siguiendo sus recomendaciones.

Con el fin de comprobar que se ha construido el sistema correcto, es decir, que este cumple con sus especificaciones en cuanto a obtener la clasificación MK de las estrellas, se hace necesario observar su rendimiento sobre un conjunto de espectros de prueba que cubra todos los casos importantes y que contenga ejemplos suficientes para asegurar que los resultados correctos no son anomalías. Para ello será preciso comparar las clasificaciones estimadas con las obtenidas de otras fuentes (catálogos consolidados de clasificación, clasificaciones manuales realizadas por expertos humanos, información recuperada de bases de datos estelares, etcétera). Así, con el objetivo de evaluar el rendimiento del sistema experto diseñado, en este primer acercamiento computacional a la automatización de la clasificación estelar se seleccionó un conjunto de prueba inicial formado por 100 espectros ópticos procedentes de los catálogos principales de referencia (Silva 1992, Pickles 1998 y Jacoby 1984); en concreto se consideraron ahora aquellos espectros que no se habían elegido anteriormente para definir y delimitar los conjuntos difusos y las funciones de transferencia durante

la fase de diseño de la base de conocimiento (para más detalles consúltese en el anexo II la lista completa de espectros seleccionados). Este conjunto de evaluación se proporcionó como entrada al sistema experto, obteniéndose la clasificación MK de los espectros que lo componen acompañada de una estimación de la probabilidad o confianza en que dicha conclusión sea cierta; las clasificaciones que no obtuvieron un grado de confianza lo suficientemente significativo (mayor del 70%) no se contabilizaron como éxitos en el análisis de resultados que se refiere a continuación.

En la tabla 6 se muestra el comportamiento del sistema para el primer nivel de clasificación considerado, i. e. la clasificación o temperatura global; en ella se recoge el número de espectros de cada tipo utilizados para el diseño y la evaluación del sistema experto, así como el número de espectros que este es capaz de clasificar adecuadamente con su correspondiente tasa de éxito. Tal y como reflejan los resultados, el sistema automático determina correctamente la clase global de 95 de los 100 espectros que se le han presentado como conjunto de prueba, destacando el excelente rendimiento para estrellas tardías (tasa de acierto del 100%), que podría deberse a que en la estimación de este nivel de clasificación se emplean mayoritariamente criterios que involucran a las bandas moleculares de TiO, características espectrales éstas típicas de las estrellas más frías.

Clasificación global	**Diseño SE (Nº espectros)**	**Evaluación SE (Nº espectros)**	**Clasificados correctamente**	**Tasa acierto SE (%)**
Tempranas	53	34	32	94.11%
Intermedias	59	38	35	92.10%
Tardías	46	28	28	100%
TOTAL	158	100	95	**95%**

Tabla 6. Resultados del sistema experto para la clasificación global en temperatura

En la tabla 7 se incluye la matriz de confusión [Kohavi 1998] correspondiente al análisis de las respuestas del sistema experto para los tipos espectrales MK; se trata de una herramienta gráfica utilizada frecuentemente en el área de la Inteligencia Artificial para inspeccionar el rendimiento de los sistemas de clasificación supervisados, pues contiene información sobre las clasificaciones reales y las estimadas: las columnas reflejan el número de predicciones de cada tipo espectral, mientras que las filas representan instancias reales de espectros de cada tipo. Uno de los grandes beneficios que aportan las matrices de confusión es que permiten verificar fácilmente si el sistema se equivoca en un par determinado de clases, como en el caso del tipo espectral donde se observa que los errores se dan principalmente entre tipos consecutivos, siendo notable la confusión entre los tipos A y F (3 estrellas de tipo espectral A clasificadas como F y 6 estrellas de tipo F a las que el sistema asigna tipo A). El sistema experto adjudicó a un total de 65 espectros exactamente el mis-

mo tipo espectral que el recogido en sus respectivos catálogos. Esto, en términos de porcentaje de éxito significaría un 65% con un error medio de 0.36 tipos.

Presumiblemente muchos de los errores de clasificación que refleja la matriz anterior podrían estar relacionados con problemas de bordes (límites entre tipos espectrales), pues no coincide la resolución MK del sistema para este nivel de clasificación (tipo espectral) con la de los catálogos (subtipo espectral). De hecho, un análisis minucioso de los resultados obtenidos puso de manifiesto que la mayoría de los desacuerdos suceden en espectros que están clasificados en el catálogo correspondiente como pertenecientes a los subtipos 0 ó 9 (por ejemplo, estrellas G9 que el sistema clasifica como K o estrellas F0 que clasifica como A), es decir, existe realmente una mayor confusión en las zonas divisorias entre tipos espectrales. Para evaluar este peculiar efecto se elaboró una nueva matriz de confusión, donde en caso de discrepancia que afecte solamente a un subtipo espectral, la clasificación del sistema se considera correcta. De esta forma el sistema pasa a asignar a 87 de los espectros de prueba un tipo espectral MK consistente con el que proporciona su propio catálogo, siendo ahora el error medio de 0.14 tipos espectrales. En la tabla 8 se recoge esta nueva matriz en la que se observa que se reduce drásticamente la confusión entre tipos espectrales consecutivos, elevándose la tasa de acierto en más de un 20% sobre la anterior, en la que no se tenía en cuenta este efecto; es preciso mencionar aquí que incluso algunos de los espectros que se incluyen en el conjunto de prueba han sido clasificados por otras fuentes bibliográficas como de subtipos adyacentes a los que provee su propio catálogo, con lo cual admitir este margen de un subtipo en la clasificación estaría plenamente justificado. Además, en muchos de estos casos el propio sistema experto ya proporciona como respuesta una clasificación alternativa que incluye el subtipo espectral contiguo.

Real/Est.	B	A	F	G	K	M
B	15	5	0	0	0	0
A	3	8	3	0	0	0
F	0	6	11	2	0	0
G	0	0	4	12	2	1
K	0	0	0	2	9	3
M	0	0	0	0	4	10

Tabla 7. Matriz de confusión inicial para el tipo espectral MK

Real/Est.	B	A	F	G	K	M
B	18	2	0	0	0	0
A	1	11	2	0	0	0
F	0	2	16	1	0	0
G	0	0	1	17	0	1
K	0	0	0	0	12	2
M	0	0	0	0	1	13

Tabla 8. Matriz de confusión final para el tipo espectral MK

La tabla 9 recoge el rendimiento final del sistema experto de clasificación MK para el tipo espectral. Se puede concluir que, como se sospechaba, las discrepancias principales entre el sistema experto y los catálogos de clasificación son causadas por desacuerdos en los tipos fronterizos debido a la resolución del sistema. Sin embargo, como puede apreciarse en los resultados, persiste todavía una tasa de error alta para el tipo espectral A, y en menor medida para el F. La dificultad que encuentra el sistema en la distinción entre estos dos tipos espectrales podría radicar en la distribución de metalicidades en la muestra de

espectros de tipos intermedios (con un valor medio de metalicidad bastante bajo, [Fe/H] = -2.0]). La degeneración entre la temperatura estelar y el contenido en metales es uno de los problemas clásicos de la clasificación estelar: las estrellas intermedias con un nivel de metalicidad bajo presentan habitualmente espectros que se asemejan a aquellos de estrellas de metalicidad solar pero de tipos más tempranos, lo cual dificulta la distinción entre ellas, incluso para los espectroscopistas más instruidos.

Tipo espectral MK	Diseño SE (Nº espectros)	Evaluación SE (Nº espectros)	Clasificados correctamente	Tasa acierto SE (%)
B	30	20	18	90%
A	23	14	11	78.5%
F	29	19	16	84.2%
G	30	19	17	89.4%
K	23	14	12	85.7%
M	23	14	13	92.8%
TOTAL	158	100	87	**87%**

Tabla 9. Resultados del sistema experto para la clasificación en tipo espectral MK

Subtipo espectral MK	Diseño SE (Nº espectros)	Evaluación SE (Nº espectros)	Clasificados correctamente	Tasa acierto SE (%)
B	30	20	14	70%
A	23	14	8	57.14%
F	29	19	11	57.89%
G	30	19	12	63.15%
K	23	14	8	57.14%
M	23	14	9	64.28%
TOTAL	158	100	62	**62%**

Tabla 10. Resultados del sistema experto para la clasificación en subtipo espectral MK

En la tabla 10 se incluyen los resultados desglosados por subtipo espectral, especificando la tasa global de acierto para cada tipo espectral; el sistema experto determina correctamente el subtipo para un 62% de los espectros de prueba, con un error medio de 0.84 subtipos. Como se pone de manifiesto en la figura 51, de nuevo la mayor parte de los errores de predicción se registran en los subtipos que señalan los límites entre los distintos tipos espectrales (subtipos 0 y 9), lo que origina que la gráfica que compara las clasificaciones proporcionadas por el catálogo con las obtenidas por el sistema experto tenga una tendencia marcadamente diagonal e incluya asimismo algunas discontinuidades que coinciden precisamente con estos saltos entre tipos.

Los resultados obtenidos sobre el conjunto de los 100 espectros de prueba para la otra dimensión del sistema MK, la luminosidad, se recogen en la tabla 11; se ha incluido

tanto la tasa de éxito alcanzado por el sistema experto cuando determina la luminosidad una vez que se ha estimado el tipo espectral de la estrella (opción estándar), como el porcentaje de acierto cuando se obtiene independientemente, es decir, se activan reglas específicas para la clase de luminosidad sin que sea necesario haber establecido una clasificación previa en temperatura. La primera alternativa es la que alcanza un rendimiento más alto (73% de acierto con un error medio de 0.33 clases de luminosidad), pues como se hizo patente ya durante el análisis de sensibilidad de los índices de clasificación, muchos de los parámetros empleados por los expertos astrofísicos para determinar el nivel de luminosidad de una estrella afectan también a su tipo espectral, siendo muy difícil aislar ambas influencias. En los dos enfoques se observa que en las clases de luminosidad II y IV se produce una tasa de error más elevada, cuya causa podría encontrarse en las peculiaridades de los catálogos de referencia, que incluyen pocas estrellas clasificadas dentro de estos grupos (el total de espectros de la clases II y IV no alcanzan a representar ni siquiera un 50% de los etiquetados como clase V); obviamente, cuantos más espectros se estudien para un determinado tipo, más se pueden delimitar las características espectrales para dicho tipo, con lo cual estas discrepancias entre los resultados obtenidos por el sistema para los distintos niveles de luminosidad serían consistentes con el diseño del mismo y, previsiblemente, podrían mejorarse incrementando el número de espectros de las clases de luminosidad afectadas.

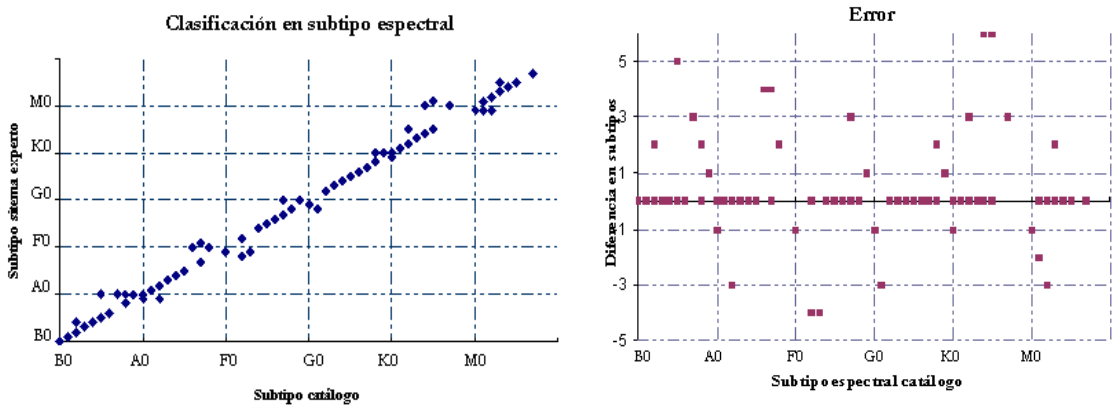


Figura 51. Comparación de la clasificación en subtipo espectral entre los catálogos de referencia y el sistema experto, incluyendo la gráfica de discrepancias (error) entre ambos

Durante todo el proceso de desarrollo del sistema automático de clasificación hemos contado con la colaboración de un grupo de expertos astrofísicos por lo que, aparte de la comparación con la referencia estándar que suponen los catálogos de espectros, también ha sido posible realizar una validación adicional contrastando las estimaciones obtenidas para el conjunto de prueba con las clasificaciones MK manuales de los espectroscopistas. En la figura 52 se incluyen los resultados de este primer estudio en el que se comparan

las clasificaciones MK obtenidas por dos expertos humanos con las proporcionadas por dos versiones diferentes del sistema automático: una sencilla que incorpora solamente reglas de clasificación y factores de certeza, y otra más compleja constituida por el sistema experto final que incluye reglas, factores de certidumbre e inferencia difusa. Como era de esperar, la segunda versión mejora sensiblemente el rendimiento alcanzado con el sistema experto sencillo, aumentando la tasa de éxito entre un 3% y un 8% dependiendo del nivel de clasificación.

Luminosidad MK	Diseño SE (Nº espectros)	Evaluación SE (Nº espectros)	Tasa acierto conociendo tipo MK	Tasa acierto sin conocer tipo MK
I	36	23	73.91%	65.21%
II	11	5	60%	40%
III	47	31	67.74%	61.29%
IV	13	8	62.5%	50%
V	51	33	81.81%	66.66%
TOTAL	158	100	**73%**	**62%**

Tabla 11. Resultados del sistema experto para la clasificación en luminosidad

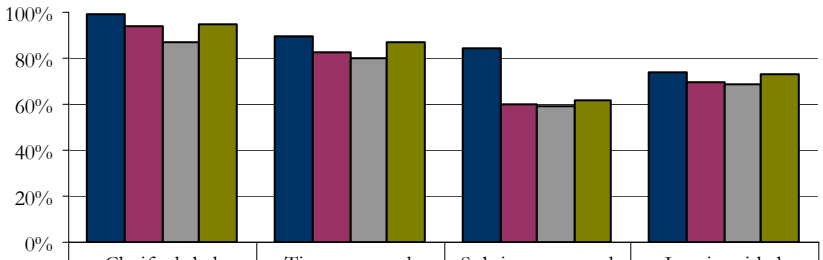
Para concluir la primera fase de pruebas, se llevó a cabo también un estudio ciego similar al que se había diseñado en su momento para evaluar el sistema MYCIN, de forma que a los dos expertos humanos se les presentaron, aleatoriamente, espectros ya clasificados (bien por otro experto o bien por el propio sistema) para que expresasen su acuerdo o desacuerdo con la clasificación propuesta. El porcentaje de acuerdo entre los dos expertos humanos y el sistema difuso final se recoge en la tabla 12. A la vista de los resultados de estos estudios comparativos finales, se podría afirmar que el sistema automático de clasificación emula satisfactoriamente el comportamiento de los expertos humanos, ya que en todos los casos su tasa de acierto es comparable a la de estos: los expertos coinciden en alrededor del 80% de los casos, proporción muy similar al porcentaje de acuerdo que ambos registran con el propio sistema automático.

	Exp. A	Exp. B	Sist. Exp.
Exp. A	100%	78%	82%
Exp. B	87%	100%	85%
Sist. Exp.	82%	75%	100%

Tabla 12. Resultados del estudio realizado para determinar el porcentaje de acuerdo entre los expertos y el sistema experto [Mosqueira 2000]

Después de este proceso de pruebas exhaustivo, se estimó oportuno analizar también el comportamiento del sistema experto sobre espectros que presenten características sensiblemente diferentes a las observadas en aquellos que han servido como referencia para su diseño. Con este objetivo último se seleccionaron tres conjuntos diferentes de espectros: 49 fuentes candidatas a ser consideradas estrellas en fase post-AGB procedentes de campa-

ñas de observación llevadas a cabo en el Instituto Astrofísico de Canarias [Suárez 2006], los 500 espectros que constituyen el catálogo secundario de referencia [Prugniel 2001], y los 78 espectros eliminados inicialmente (por razones diversas como ofrecer elevado porcentaje señal a ruido, metalicidad atípica, ausencia de datos en regiones importantes, etc.) de los catálogos principales de estrellas patrón (Silva 1992, Pickles 1998 y Jacoby 1984). En las tabla 13 y 14 se presenta el análisis de eficiencia del sistema desglosado por la fuente de procedencia de los espectros; para contrastar estos resultados en las estrellas post-AGB se ha utilizado la clasificación manual realizada por los expertos de nuestro grupo de investigación, empleándose la incluida en los propios catálogos para los otros dos conjuntos de espectros, confirmada esta además mediante la consulta de las principales bases de datos estelares.



	Clasif. global	Tipo espectral	Subtipo espectral	Luminosidad
Experto A	99%	90%	84%	74%
Experto B	93,50%	83%	60%	70%
SE simple	87%	80%	59%	69%
SE difuso	95%	87%	62%	73%

Figura 52. Cuadro comparativo entre dos versiones del sistema experto, simple y difuso, y dos expertos humanos para los cuatro niveles de clasificación considerados

El sistema presenta una tasa de error más elevada para la determinación del tipo espectral en estas estrellas que la que se obtenía anteriormente para las procedentes del catálogo de referencia estándar. En el caso de las estrellas que provienen de observaciones directas este aumento de los fallos podría deberse a que los espectros reales (no promediados, sino procedentes de una única estrella) pueden incluir algunas peculiaridades que no se han tenido en cuenta en el diseño del sistema (excesivo ruido, desplazamiento de líneas, emisiones, etc.), debidas fundamentalmente al efecto de la atmósfera y al error introducido por algunos aparatos de medida; en el catálogo de Prugniel, las diferencias se acusan sobre todo en aquellos tipos espectrales (B, A, M) en los que tienen bastante influencia los parámetros que quedan fuera del rango espectral de esta base de datos estelar (4100-6800 Å), es decir, las líneas de calcio alrededor de 3900 Å, algunas líneas de hidrógeno y algunas bandas tardías de óxido de titanio; en cambio, en los espectros atípicos de los catálogos principales de

referencia, los tipos más afectados son los intermedios y tardíos, pues muchos de ellos presentan un nivel de metalicidad inusitadamente bajo, confundiéndose con espectros de tipos más tempranos. En cuanto a la luminosidad, el rendimiento del sistema es muy similar al alcanzado previamente con el conjunto de prueba estándar (las 49 estrellas post-AGB se consideraron todas como de clase I, razón por la que no aparecen en la tabla resultados para otros niveles de luminosidad).

En cualquier caso, la tasa de acierto en torno al 80% para el tipo espectral y al 70% para la luminosidad constituyen un resultado muy aceptable si se tiene en cuenta que no se ha utilizado ningún espectro de estos tipos para la confección del catálogo de referencia y que, por tanto, el sistema no fue específicamente diseñado para tratar las particularidades que pudieran presentar estas estrellas.

Tipo espectral MK	**Espectros post-AGB**	**Espectros catálogo Prugniel 2001**	**Espectros catálogo principal**
B	85.71%	75%	80%
A	81.81%	66.66%	77.7%
F	70%	83.33%	76.9%
G	75%	81.9%	80%
K	88.88%	79.4%	75%
M	75%	71.14%	66.66%
TOTAL	**79.5%**	**81.4%**	**76.92%**

Tabla 13. Resultados del sistema experto para el tipo espectral desglosados por la fuente de procedencia

Luminosidad MK	**Espectros post-AGB**	**Espectros catálogo Prugniel 2001**	**Espectros catálogo principal**
I	72%	60%	60%
II	-	57.4%	50%
III	-	68.53%	65.38%
IV	-	58.97%	62.5%
V	-	72.16%	71.8%
TOTAL	**72%**	**67.2%**	**66.6%**

Tabla 14. Resultados del sistema experto para la luminosidad desglosados por la fuente de procedencia

La etapa final del proceso de pruebas de cualquier sistema experto consiste en la evaluación del mismo, lo cual en nuestro caso significa facilitar el sistema de clasificación estelar a los espectroscopistas para que estos lo usen en la obtención de clasificaciones MK, y poder determinar de este modo el grado de aceptación en su propio campo de aplicación. Aunque se haya comprobado ya que el sistema produce unos resultados satisfactorios en un porcentaje aceptable de los espectros presentados, podría ocurrir que este resultase fi-

nalmente demasiado difícil o engorroso de utilizar, requiriese datos que no estén disponibles permanentemente, no ahorrase ningún esfuerzo real o incluso alcanzase unas conclusiones no aceptadas universalmente, pues es bien sabido que diferentes expertos pueden definir la clasificación de diferentes maneras.

Como consecuencia del proceso de evaluación llevado a cabo por un grupo de expertos en clasificación ajenos al diseño del sistema, pertenecientes en concreto al Instituto Astrofísico de Canarias, se reexaminaron algunos de los hechos asumidos durante las fases de planificación: la frecuencia esperada de uso, la disponibilidad de los datos de entrada, el valor cualitativo de las salidas, la facilidad de manejo, etc. Asimismo, el seguimiento e interacción con los posibles usuarios finales del sistema condujo a la revisión y mejora de la lógica usada en el desarrollo de las reglas, al enriquecimiento de la base de conocimiento mediante el descubrimiento de posibles errores u omisiones, a la creación de una interfaz más sencilla y orientada al usuario y, en definitiva, a la obtención de un sistema mejor y más utilizable.

4.4.5 Perfeccionamiento

En un sistema experto existen frecuentemente diversos parámetros y componentes (base de reglas, factores de certidumbre, funciones de pertenencia, mecanismos de inferencia, etc.) que precisan ser adaptados de acuerdo a las medidas de rendimiento obtenidas durante la fase de pruebas en el entorno del problema que se pretende resolver.

Por supuesto, el aprendizaje representa en todas sus acepciones un método óptimo para mejorar el rendimiento y la adquisición automática de conocimiento en los sistemas expertos. La mayor parte de los procesos de aprendizaje, sea o no automático, operan con alguna forma de retroalimentación: cuando esta procede de un supervisor o profesor se dice que es supervisado; cuando deriva de criterios formulados internamente se denomina no supervisado.

La forma más sencilla de aprendizaje es el denominado aprendizaje por repetición, donde la información que se ha descubierto como resultado del trabajo previo se almacena para ser reutilizada posteriormente; este tipo de aprendizaje es útil porque ahorra tiempo y operaciones computacionales, ya que una vez que se ha alcanzado un estado específico no sería necesario repetir todo el proceso realizado para llegar a él. Muchos sistemas expertos tienen parámetros, como los factores de certidumbre, que se pueden ajustar al mismo tiempo que se va disponiendo de información; el ajuste formal de esos parámetros representa otra forma de aprendizaje que proporciona un mecanismo efectivo para mejorar el rendimiento y que ha sido utilizada en muchos programas de juego automático. El aprendi-

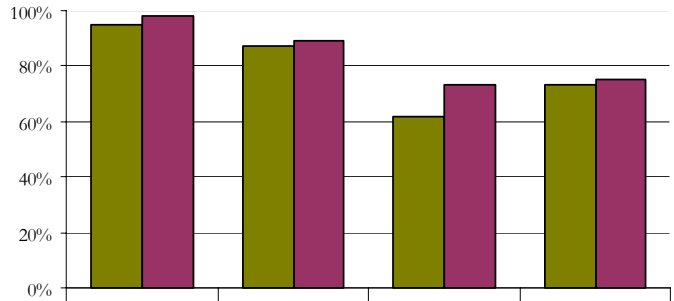
zaje por inducción o generalización a partir de ejemplos, es quizás el enfoque formal más utilizado; dentro de esta variante destacan el aprendizaje simbólico (algoritmo de eliminación, razonamiento basado en casos, etc.), los métodos estadísticos (árboles de regresión y clasificación, análisis de componentes principales, etc.), la optimización (algoritmos genéticos) y las redes de neuronas artificiales (redes de retropropagación, mapas auto-asociativos, etc.) [Holland 1992].

Además de comprobar que un sistema experto sea completo, consistente y satisfaga sus especificaciones, es interesante también revisar lógica y semánticamente el conocimiento sobre el que se ha construido el mismo: si hay errores en la base de conocimiento, estos tienden a propagarse interfiriendo en la correcta actuación del sistema. Como ya se ha mencionado, los expertos podrían haber proporcionado conocimiento incompleto, desactualizado o incluso incorrecto, y los propios desarrolladores podrían también haber cometido errores a la hora de entender correctamente y codificar el conocimiento que han recabado de ellos.

El ajuste y adaptación de todos los componentes de una base de conocimiento es casi siempre inviable. Por esta razón, durante la fase de adquisición de conocimiento es sumamente importante determinar las áreas que crean mayor controversia entre los expertos y aquellas que pueden comprometer la seguridad y fiabilidad del sistema, ya que de esta forma se pueden establecer prioridades para comprobar las suposiciones subyacentes y realizar una validación mejor fundamentada de la base de conocimiento [O'Leary 1996]. Durante el desarrollo del sistema experto de clasificación se llegó a la conclusión de que este refinamiento de la base de conocimiento debería necesariamente incluir la comprobación de los mecanismos de razonamiento sobre los que se sustenta el diseño de las reglas de clasificación, la propia evaluación de las reglas implementadas (sobre todo aquellas que cubren varias entradas o afectan a casos críticos) y la revisión de la consistencia semántica de los factores de certeza.

Los resultados de las pruebas realizadas sobre los diferentes conjuntos de espectros se emplearon para mejorar el diseño de las reglas del sistema; se seleccionó un grupo formado por espectros representativos (la mayoría comunes pero también algunos atípicos) entre los constituyentes de la base de pruebas anterior, para los cuales se estudió detalladamente el comportamiento del sistema registrando las reglas que se fueron disparando en el procesamiento de los datos, y presentándoselas seguidamente para su validación a los expertos de forma sencilla a través del módulo de autoexplicación implementado. De este modo, el análisis cuidadoso de las conclusiones del sistema y del proceso de razonamiento seguido para alcanzarlas, permitió reajustar nuevamente la capacidad de discriminación real de algunos índices de clasificación, lo cual se tradujo en la modificación pertinente de las funciones de transferencia y de los factores de certeza de las reglas vinculadas a estos pa-

rámetros. Finalmente, si bien el sistema experto implementa un gran cantidad de reglas (criterios) de clasificación, estas se encuentran convenientemente priorizadas de forma que en la mayoría de los supuestos estén disponibles únicamente las más probables (factor de certidumbre superior a 0.8) y solamente en casos excepcionales, caracterizados por la ambigüedad en las respuestas del sistema, se tengan en cuenta el resto.



	Clasif. global	Tipo espectral	Subtipo espectral	Luminosidad
SE original	95%	87%	62%	73%
SE perfeccionado	98%	89%	73%	75%

Figura 53. Cuadro comparativo del rendimiento del sistema experto original y la versión mejorada basada en redes de neuronas artificiales

A modo de validación adicional de la base de conocimiento, se realizaron diferentes encuestas (del tipo verdadero/falso) a un grupo de expertos en el campo, en las que se incluyeron preguntas a ciegas entre las que se encontraban las referentes a la confirmación de los criterios de clasificación. El análisis estadístico de los resultados permitió obtener el porcentaje de acuerdo entre expertos para cada regla de clasificación considerada, lo cual unido al referido estudio del rendimiento del sistema y al análisis de sensibilidad previo permitió realizar los ajustes finales necesarios para dar cabida a todo el conocimiento explicitado durante la fase de pruebas.

Los factores de certeza de las reglas de clasificación se obtuvieron directamente de los expertos astrofísicos que colaboraron en la planificación y diseño del sistema, combinándose las diversas estimaciones subjetivas de cada uno de ellos mediante un método apropiado (*sleeping experts* [Freund 1997]). El estudio detallado del proceso de razonamiento seguido por el sistema experto para clasificar los espectros de prueba, permitió modificar los factores de certeza asignados inicialmente por los expertos mediante un algoritmo de aprendizaje semejante al desarrollado por W. Qu y K. Shirai para clasificar texto [Qu 2003]. Sin embargo, finalmente se optó por desarrollar un algoritmo propio y específico para el ajuste dinámico de los factores de certidumbre, el cual utiliza oportunamente los resultados de los mejores modelos de redes neuronales que se propondrán en la sección siguiente. El

análisis sistemático de los pesos de las unidades de la capa de salida permitió descubrir, para cada tipo espectral y nivel de luminosidad, los parámetros de entrada (índices de clasificación) que presentan una influencia mayor; los valores normalizados de los pesos de salida más altos constituirán estimaciones del valor de los factores de certeza de las reglas que se corresponden con los parámetros con más incidencia en cada grupo. La estrategia básica seguida para comprobar la coherencia semántica de los factores de credibilidad y proceder a su corrección consistió en comparar estos valores estimados mediante las redes de neuronas artificiales con los que estaban realmente codificados en la base de conocimiento (determinados por los expertos y reajustados previamente mediante algoritmos de aprendizaje), revisando los coeficientes de credibilidad donde ambas estimaciones difirieron por encima de un límite preestablecido (0.2 en nuestro caso).

En la figura 53 se muestran los resultados obtenidos con la versión perfeccionada del sistema experto y con su versión original, descrita en este capitulo, sobre el conjunto de 100 espectros propuesto. Considerando esta comparativa, se puede afirmar que la modificación de la prioridad de las reglas de razonamiento, la revisión de las funciones de transferencia y el ajuste fino de los factores de certeza mediante redes de neuronas ha resultado en un aumento significativo (en algunos casos superior al 10%) del rendimiento del sistema experto original.

Como se sostenía en la definición de los sistemas basados en el conocimiento, la primera intención de esta tecnología es realizar la integración de la pericia humana en los procesos computacionales, lo cual no solamente ayuda a preservar el conocimiento experto sino que permite a los humanos librarse de realizar las tareas más rutinarias, que podrían asociarse con interacciones con un sistema computacional, para que puedan continuar aprendiendo y avanzando en sus campos y, por lo tanto, se vuelvan más valiosos para las organizaciones. Además, gran parte del éxito de estos sistemas descansa en su capacidad para permitir que personal relativamente inexperto opere casi al mismo nivel que profesionales altamente cualificados, con la enorme ventaja que supone contar con un experto disponible en todo momento. El sistema experto difuso presentado en esta sección integra el conocimiento experto del área de clasificación estelar, alcanzando una tasa de éxito muy aceptable para la clasificación global y el tipo espectral (superior al 88% en ambos casos, para la versión depurada final), si bien parece aconsejable perfeccionarlo con el apoyo de otras técnicas, tales como redes de neuronas artificiales, con el objetivo de obtener una clasificación más acertada sobre todo para el subtipo espectral y el nivel de luminosidad.

4.5 Redes de neuronas artificiales

En la clasificación bidimensional de espectros estelares, como se puso de manifiesto en los apartados dedicados a la revisión histórica de la aplicación de técnicas computacionales en esta área, la mayor parte de las contribuciones realizadas durante los últimos años se basan en el diseño de sistemas inductivos o subsimbólicos, rama esta de la Inteligencia Artificial que se ocupa de las redes de neuronas artificiales o sistemas conexionistas.

En esta sección se recogen las aportaciones de esta tesis doctoral a la aplicación de redes neuronales en la automatización de la clasificación espectral. No se pretende reproducir aquí desarrollos basados en modelos que ya han demostrado sobradamente su eficiencia en este campo (principalmente redes MLP, *Multi-Layer Perceptron*), sino que se llevará a cabo un amplio estudio de las diferentes configuraciones posibles (modelo neuronal, algoritmo de aprendizaje, arquitectura de la red, proceso de entrenamiento, etc.) con el objetivo principal de identificar el tipo de red óptima para dar respuesta a las peculiaridades de cada problema específico del proceso de clasificación estelar.

Las redes neuronales constituyen una técnica idónea para resolver problemas de clasificación debido fundamentalmente a su capacidad de aprendizaje por inducción (generalizando a partir de casos concretos) y a la facultad de descubrir las relaciones intrínsecas que subyacen en los datos que se les presentan durante la fase de aprendizaje o entrenamiento [Arbib 2002]. Este paradigma representa uno de los primeros enfoques del aprendizaje automático, inspirado en el comportamiento del cerebro humano; mientras que por ejemplo los algoritmos genéticos utilizan una analogía con la teoría de la evolución, las redes de neuronas se basan en una analogía con la estructura física del cerebro: en lugar de una única unidad de procesamiento compleja, las redes tratan de emplear muchos procesadores más simples trabajando juntos cooperativamente.

La principal función del sistema nervioso es asegurar, junto con el sistema endocrino, la comunicación y el control en el organismo; se compone fundamentalmente de células gliales, un sistema vascular especializado y las neuronas, que son células excitables conectadas entre sí de manera compleja que están especializadas en la recepción de estímulos y en la propagación del impulso nervioso. Cada neurona consta de un cuerpo celular, denominado soma, que contiene el núcleo; las dendritas, que son unas prolongaciones cortas y habitualmente muy ramificadas del cuerpo neuronal que conducen los impulsos hacia él; y una prolongación más alargada denominada axón, que transmite los impulsos desde el soma neuronal hacia otras neuronas o células adecuadas (musculares, glandulares, etc.) [Crossman 2007].

Las neuronas se organizan en redes y se comunican entre sí a través de enlaces funcionales altamente especializados denominados sinapsis. La mayor parte de estos contactos son de tipo químico, pues utilizan unas moléculas proteínicas (los neurotransmisores) para facilitar la comunicación; la sinapsis comienza con una descarga química que produce un impulso eléctrico en la membrana de la célula emisora (presináptica) que se transmite hasta alcanzar el extremo del axón, donde la propia neurona segrega los neurotransmisores, que se alojan en el espacio intermedio (sináptico) entre neuronas y que son los responsables de excitar o inhibir la acción de la neurona receptora (postsináptica). Así, en las sinapsis químicas el impulso nervioso se transmite siempre en una única dirección, desde la neurona presináptica a la postsináptica, lo que posibilita, entre otras cosas, que se envíen señales dirigidas hacia áreas o puntos específicos del sistema nervioso. En cambio, las sinapsis eléctricas, que se encuentran en muy pequeña proporción, se caracterizan por ser conductos directos que permiten el paso bidireccional de una neurona a la siguiente [Arbib 1997].

Por tanto, tomando en consideración esta analogía biológica, una red neuronal artificial puede definirse como un modelo basado en la conexión masiva de varias unidades de procesamiento simples (neuronas artificiales), diseñado para emular la forma en la que el cerebro humano lleva a cabo una función de interés. Las redes neuronales, en cuanto modelos artificiales del cerebro, adquieren también el conocimiento por medio de un proceso de aprendizaje, almacenándolo para su posterior reutilización en las conexiones entre neuronas (conocidas como pesos sinápticos) [Russel 2002]. Aunque no todos los modelos neuronales presentan las mismas características en cuanto a la estructura interna de las redes, en general, los componentes fundamentales de una red de neuronas artificiales son los siguientes:

- Un conjunto de unidades de procesamiento (neuronas o celdas) distribuidas en capas o niveles (conjunto de neuronas cuyas entradas provienen de la misma fuente y cuyas salidas están dirigidas al mismo destino); habitualmente las redes constan de una capa de entrada, una o varias capas ocultas y una capa de salida.

- Un estado de activación para cada unidad, que equivale al nivel de excitación de la neurona, y que varía en función de las entradas que recibe; de este estado de activación dependerá la salida o respuesta de la neurona.

- Conexiones entre las unidades con un peso asociado, w_{ij}, que cuantifica el efecto que la señal procedente de la neurona i tiene sobre la neurona j.

- Una regla de propagación encargada de determinar la entrada efectiva que llega a la neurona procedente de todas sus entradas externas.

- Una función de activación que determina el nuevo estado de activación basándose en la entrada efectiva y en el nivel de activación actual.

- Un método o regla de aprendizaje que posibilita que las neuronas realicen el proceso de ajuste de sus respuestas, de manera que el comportamiento de la red sea el esperado; generalmente, durante el aprendizaje lo que se modifican son los pesos de las conexiones.

- Una entrada externa (*bias*) para cada neurona, o un umbral de activación de la misma.

En la figura 54 se muestran los elementos básicos de una neurona, unidad de procesamiento fundamental para la operación de una red neuronal artificial, que influyen en la determinación de su salida. Matemáticamente una neurona puede describirse con dos ecuaciones como sigue:

$$u_k = \sum_{j=1}^{p} w_{jk} x_j$$
$$y_k = \varphi (u_k - \theta_k),$$

donde x_1, x_2,...x_p son las señales de entrada a la neurona k y w_{1k}, w_{2k},...w_{pk} se corresponden con los pesos sinápticos de las p conexiones que llegan a la misma; cada entrada x_j se multiplica por el peso de su conexión, w_{jk} (que será positivo si la conexión es excitadora y negativo en caso de ser inhibidora), obteniéndose mediante un sumatorio un valor de salida, u_k, que se modifica mediante un umbral de activación, θ_k, aplicándose seguidamente la función de activación (sigmoidal, en rampa o *piecewise-linear*, umbral o *hard-limiter*, etcétera), φ, para obtener la respuesta final de la neurona, y_k. El umbral que reduce el valor de entrada de la función de activación, θ_k, es un parámetro externo a la neurona, pero se puede incluir en la misma añadiendo una nueva conexión, cuya entrada $x_0 = -1$ y su peso $w_{0k} = \theta_k$; de la misma forma, se puede modelar la neurona con una nueva entrada de valor fijo $x_0 = 1$ y peso w_{0k} = *bias*, valor negativo del umbral.

La arquitectura de una red neuronal hace referencia a la forma en que se estructuran las neuronas artificiales, disposición íntimamente ligada al algoritmo de aprendizaje utilizado durante el entrenamiento. La estructura neuronal más común consiste en la organización de las neuronas en capas. En su forma más simple, la red dispone de una capa de entrada con los nodos conectados directamente a la capa de salida, que son los que realmente realizan el procesado; las memorias asociativas lineales, cuyo objetivo es relacionar cada patrón de salida con uno de entrada, son un ejemplo de esta clase de redes monocapa. Cuando entre las capas de entrada y de salida se intercalan una o varias capas intermedias u

ocultas, la arquitectura neuronal se denomina multicapa y se caracteriza por ser capaz de extraer relaciones de más alto nivel: la red, a pesar de su conectividad local, adquiere una perspectiva global gracias a la gran cantidad de conexiones que existen entre las neuronas de las capas intermedias; las redes *backpropagation* son unas de las redes de arquitectura multicapa más populares, pues se han aplicado con éxito en múltiples problemas de clasificación, predicción u optimización. Otras arquitecturas comunes son las redes recurrentes, que disponen de un enlace de realimentación desde las neuronas de salida hacia las de entrada, y las organizadas en una estructura de malla, que consisten en un vector unidimensional o multidimensional de neuronas de salida conectadas con un conjunto correspondiente de neuronas de entrada (la dimensión de estas estructuras se refiere al número de dimensiones espaciales en que se alinean los nodos).

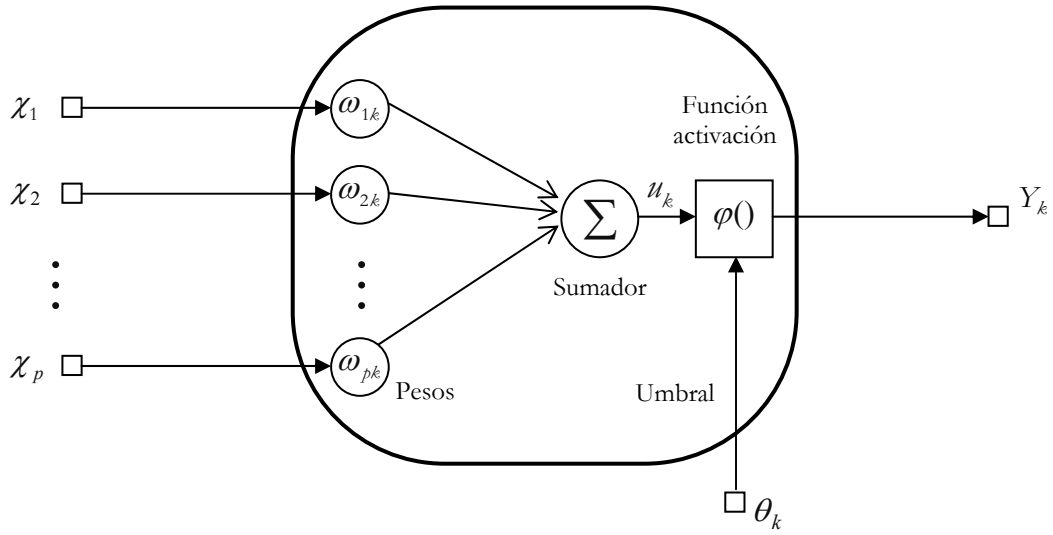


Figura 54. Esquema general de una neurona artificial

Independientemente de cuál sea la arquitectura seleccionada para una red de neuronas artificiales, en su desarrollo existen dos periodos claramente diferenciados: la fase de aprendizaje, en la que se entrena la red para que modifique progresivamente sus respuestas ante las entradas de forma que se vaya adaptando paulatinamente al comportamiento que se considera correcto, y la fase de operación o funcionamiento, durante la cual la red ya es operativa y no se vuelven a modificar sus parámetros.

En el ámbito de las redes de neuronas artificiales se define aprendizaje como el mecanismo a través del cual se adaptan los parámetros libres de una red mediante un proceso continuo de estimulación por el entorno en el que se encuentra inmersa dicha red; el procedimiento utilizado para realizar el proceso de aprendizaje se conoce como regla o algoritmo de aprendizaje, cuya función principal es modificar los parámetros de la red de forma

ordenada para alcanzar los objetivos deseados. En función de la relación de la red con el entorno en el que opera, se pueden distinguir tres paradigmas: aprendizaje supervisado, aprendizaje por refuerzo y aprendizaje no supervisado [Freeman 1991].

La característica principal del aprendizaje supervisado es la existencia de un agente externo (profesor o supervisor) que controla el proceso de aprendizaje. Este supervisor se concreta generalmente en el conocimiento del entorno, representado por medio de un conjunto de ejemplos que se le proporcionan a la red y que consisten en diferentes vectores de entrada acompañados de la salida deseada para cada uno de ellos. En virtud de la comparación entre la respuesta actual de la red y la respuesta esperada para cada patrón de entrada, se produce un proceso iterativo de reajuste interno de los parámetros, que afecta principalmente a los pesos sinápticos de las conexiones entre las neuronas. Cuando se alcanza la condición de finalización (pesos sinápticos estables, error medio por debajo de un determinado umbral, etc.) se puede afirmar que la red ha aprendido y, por tanto, prescindir del profesor pasando a interaccionar directamente con el entorno de forma no supervisada.

El aprendizaje por refuerzo consiste en un proceso *online* en el que se trata de emparejar situaciones y acciones, con el objetivo de maximizar una función denominada señal de refuerzo. Consta de una componente selectiva, que involucra la elección de la mejor acción a ejecutar de entre varias opciones, y una componente asociativa, en el sentido de que las alternativas encontradas se asocian a las situaciones particulares en que se tomaron. En este tipo de aprendizaje no se le indican explícitamente a la red las acciones que debe realizar, sino que esta deberá probar todas las acciones disponibles y descubrir cuáles conducen a una mayor recompensa; es decir, debe aprender a decidir ante una situación determinada cuál es la acción más adecuada para lograr un objetivo específico. Si se realiza una acción de ajuste de la que se deriva un estado satisfactorio, entonces se refuerza la tendencia del sistema a reproducir esa acción particular, en caso contrario se disminuiría consecuentemente dicha tendencia. El aprendizaje por refuerzo suele emplearse cuando no existe un conocimiento a priori del entorno o este es demasiado complejo como para utilizar otros métodos [Sutton 1998].

El aprendizaje no supervisado es aquel en el que la propia red desarrolla reglas generales que organizan o agrupan los datos del conjunto de entrenamiento. En este caso, no existe la figura externa del supervisor que interviene en el proceso de aprendizaje: la red no recibe ninguna información del entorno que le asesore sobre la corrección de sus salidas, es decir, no se le presenta un conjunto de ejemplos específicos que le indiquen la función que debe aprender, sino se le proporcionan solamente grandes cantidades de datos con los que debe construir sus propias asociaciones. Así, las redes con aprendizaje no supervisado optimizan sus parámetros libres con respecto a una función de evaluación interna que compara las distintas agrupaciones de los datos del conjunto de entrenamiento. En algunos casos

la salida de la red representa el grado de similitud entre la información presentada en la capa de entrada y los datos que se le han mostrado anteriormente; en cambio en otros, la red realiza un mapeo de características, obteniendo en las neuronas de salida una disposición geométrica que representa un mapa topográfico de las características de los datos de entrada, de forma que ante datos similares siempre se verán involucradas neuronas de salida cercanas, es decir, pertenecientes a la misma zona del mapa. Por lo tanto, de una forma u otra, una vez que la red ha captado las características de los datos de entrada, las representa internamente y es capaz de crear nuevas agrupaciones automáticamente. En los modelos no supervisados suele ser necesario emplear un conjunto de patrones de entrada bastante amplio para permitir que la red ajuste correctamente sus parámetros y sea, en definitiva, capaz de aprender.

Finalizada la fase de entrenamiento, una red debería ser capaz de generalizar, esto es, ante datos de entrada similares a los suministrados durante el aprendizaje debería producir salidas correctas. Para lograr una generalización óptima de la red neuronal, es conveniente seleccionar un conjunto de entrenamiento que cubra un rango de hechos lo suficientemente amplio, y que sea al mismo tiempo representativo de los distintos tipos de problemas que debe resolver la red.

El cerebro humano ha sido objeto de estudio desde hace cientos de años, sin embargo el hombre no ha sido capaz de emular su estructura y procesos de razonamiento hasta épocas recientes, gracias sobre todo a los avances en campos como la neurología o la electrónica. A finales del siglo XIX, Santiago Ramón y Cajal presentó la idea de las neuronas como elementos estructurales constituyentes del cerebro humano [Ramón y Cajal 2002]; estas células del sistema nervioso se conectan masivamente entre sí (se estima que existen unos 10 billones de neuronas en la corteza cerebral humana con 60 trillones de interconexiones entre ellas) para lograr una estructura enormemente eficiente que convierte al cerebro en una especie de computador paralelo, no lineal y altamente complejo, con una capacidad organizativa tal, que es capaz de realizar ciertas computaciones con mayor rapidez incluso que los ordenadores actuales. Las investigaciones iniciales en el campo de las redes de neuronas artificiales surgieron del análisis del tipo de computación que lleva a cabo el cerebro humano, sensiblemente diferente a la de las máquinas digitales convencionales. El trabajo pionero del neurofisiólogo W. S. McCulloch y del matemático W. H. Pitts [McCulloch 1943] marcará el inicio de la era moderna de esta disciplina; en él se presenta una teoría basada principalmente en la suposición de que la actividad de las neuronas es binaria (pueden encontrarse activadas o desactivadas) y de que la estructura de la red de interconexiones es inmutable. Aunque tal hipótesis no resultó ser un modelo exacto de la actividad neuronal, puso de manifiesto una idea fundamental: es posible obtener una gran potencia de cálculo mediante la interconexión adecuada de un conjunto de neuronas senci-

llas. A partir de entonces, surgen una serie de trabajos que sentarán las bases para el desarrollo de modelos computacionales de sistemas de aprendizaje y adaptativos, entre los que destaca la contribución de D. O. Hebb, quien presenta la primera regla de aprendizaje que incluye la modificación explícita de los pesos sinápticos de las conexiones entre neuronas [Hebb 1949]; este autor sostenía que el responsable del aprendizaje era un aumento del área de unión sináptica entre dos neuronas, teoría que ha sido actualmente abandonada pues las investigaciones recientes muestran que lo que realmente tiene lugar es un incremento de la velocidad de liberación de un neurotransmisor específico en la neurona presináptica.

La década de los 60 se corresponde con el auge de los modelos neuronales con arquitectura en capas. F. Rosenblatt formula y demuestra el denominado *Perceptron Convergence Theorem* que asevera que si una red perceptrón multicapa (MLP) es capaz de aprender una clasificación, entonces lo hará en un número finito de ciclos de entrenamiento [Rosenblatt 1958]; al mismo tiempo, B. Widrow y M. Hoff introducen el algoritmo *Least Mean Square*, empleándolo para formular las redes *Adaline* [Widrow 1960]. El perceptrón, inspirado en las investigaciones sobre el comportamiento visual de las moscas e implementado rudimentariamente con el primitivo hardware disponible en aquella época, se convirtió en la primera red de neuronas artificiales útil. Durante esta primera etapa de esplendor de las redes neuronales se llegó a considerar que con ellas se podía resolver casi cualquier tipo de problema computacional, sin embargo con la publicación crítica *Perceptrons* [Minsky 1969] se demostró matemáticamente que los perceptrones de la época solamente podían distinguir patrones si estos eran linealmente separables y que, lejos de poder solventar todo tipo de problemas, presentaban limitaciones fundamentales, como por ejemplo su incapacidad para implementar la sencilla operación lógica XOR. Así, durante la década siguiente a la publicación mencionada hubo un decaimiento en el interés en las redes de neuronas artificiales. Cabe, no obstante, resaltar la aparición de los primeros trabajos sobre mapas autoorganizados con aprendizaje competitivo, basados en los mapas con orden topológico del cerebro [Willshaw 1976].

Los trabajos de investigación publicados durante los años 80 en diversos frentes relacionados con los modelos neuronales, propiciaron el resurgimiento del interés en esta disciplina. G. A. Carpenter y S. Grossberg introducen una nueva clase de redes neuronales (redes ART), basadas en un nuevo principio de autoorganización (*Adaptive Resonance Theory*) [Carpenter 1988]. J. Hopfield, inspirándose en la idea de función de energía, formula un nuevo modo de entender la computación neuronal mediante redes recurrentes (conocidas actualmente como redes de Hopfield) que presentan conexiones simétricas [Hopfield 1982]. En el mismo año, T. Kohonen publica su primer trabajo sobre mapas autoorganizados, más comúnmente conocidos como redes de Kohonen, en los que utiliza estructuras en malla de hasta dos dimensiones [Kohonen 1982] [Kohonen 2001]. Asimismo, Rumelhart et

ál. publican sus estudios sobre el algoritmo de aprendizaje basado en la retropropagación del error (*backpropagation*), que se convertiría desde entonces en el método más difundido para el entrenamiento de redes perceptrón multicapa [Rumelhart 1986] [McClelland 1986].

Desde los primeros desarrollos de los años 40 las redes de neuronas artificiales han recorrido un largo camino, hasta convertirse hoy en día en una materia interdisciplinar con profundos vínculos con las matemáticas, la física, la ingeniería, las neurociencias y la psicología. Las redes neuronales, comparadas con los sistemas de computación tradicionales, constituyen actualmente una tecnología robusta y con alta tolerancia a fallos, pues a diferencia de estos que pierden su funcionalidad en cuanto sufren un error de memoria, los fallos en un pequeño número de neuronas, aunque influyen en el comportamiento del sistema, no implican una caída repentina del mismo. De este modo, las redes pueden seguir realizando su función (con cierta degradación) aunque se destruya parte de su estructura, pues su conocimiento se encuentra distribuido entre todos sus elementos. Asimismo, pueden aprender a reconocer patrones con ruido, distorsionados, o incompletos. Las redes operan en base a la satisfacción de restricciones, por lo que pueden gestionar las contradicciones, lo cual no significa que una red proporcione respuestas correctas a partir de datos incorrectos, pero no se bloqueará, como ocurriría sin duda en los sistemas expertos: una red resolverá el conflicto dando más relevancia a otras restricciones o bien producirá resultados no significativos. El poder de computación de las redes neuronales reside tanto en la gran cantidad de interconexiones paralelas entre sus elementos de procesado (que les permiten gestionar de forma natural gran cantidad de datos), como en su capacidad para aprender mediante ejemplos, adaptarse al entorno y, de este modo, generalizar, entendiendo tal generalización como la habilidad para producir una respuesta razonable ante entradas que no se habían proporcionado anteriormente durante el proceso de aprendizaje. Estas capacidades constituyen algunas de las ventajas más atractivas de este modelo, y hacen posible que las redes neuronales puedan resolver problemas complejos que serían de otra forma difíciles de tratar computacionalmente [Haykin 2008].

Desde una perspectiva más filosófica, el enfoque conexionista basado en redes neuronales podría entenderse como una metodología en la que el análisis del mundo externo conduce a un modelo computacional de forma muy directa, no necesariamente ad hoc para cada aplicación concreta. Además, se dispone de un modelo en el que el comportamiento inteligente no se fundamenta en un proceso lógico de razonamiento inferencial sobre estructuras de tipo sentencia que representan estados del mundo real, por lo tanto, se separa la inteligencia del razonamiento con estructuras cuasi-lingüísticas [Clark 1992].

Las características mencionadas de las redes actuales, tales como su robustez o tolerancia a fallos, las capacidades de aprendizaje, adaptación y generalización o la ya descrita analogía neurobiológica, posibilitan su aplicación eficiente en un amplio abanico de pro-

blemas de optimización, reconocimiento de patrones o generalización [Arbib 2002]. Entre estos múltiples campos de aplicación destacan el reconocimiento y categorización de patrones, con redes para la clasificación de cromosomas, diagnóstico de enfermedades a partir de datos analíticos, interpretación de caracteres manuscritos, o el propio problema de clasificación estelar abordado en esta tesis; la rama de la visión artificial, en la que se diseñan redes neuronales que emulan el funcionamiento visual humano y que permiten reconocer imágenes con diferentes texturas y colores; el control motor, con diseños neuronales que permiten determinar la secuencia de movimientos que debe realizar un robot; los sistemas complejos de control en tiempo real; o los modelos predictivos, como las aplicaciones de predicción económica o meteorológica.

La elección adecuada de las características y estructura de una red neuronal, así como la selección de la información conveniente que se va a utilizar para el proceso de aprendizaje, propiciarán la construcción de redes capaces de realizar una simplificación del problema considerado mediante la determinación de los elementos relevantes del mismo [Tarassenko 1998]. A continuación se describe la arquitectura y características de los distintos modelos neuronales seleccionados para automatizar la clasificación bidimensional de las estrellas; se expone además en detalle el proceso de diseño e implementación de los mismos, incluyendo también un estudio comparativo de todos ellos con el fin de concluir cuáles se adaptan mejor a los distintos aspectos del problema de clasificación espectral.

4.5.1 Consideraciones generales de diseño

Con el objetivo de aplicar el paradigma de redes neuronales al problema de la clasificación espectral automática, se ha utilizado un conjunto de espectros estelares como patrones, tanto para presentar a la entrada de las diferentes redes durante la fase de entrenamiento como para corroborar si estas generalizan correctamente ante datos de entrada desconocidos. Estos espectros proceden de la base de datos principal de referencia, construida a partir de catálogos públicos [Silva 1992] [Pickles 1998] [Jacoby 1984], que ya se utilizó en el diseño del sistema difuso de inferencia descrito en el apartado precedente (véase sección 4.1 para más detalles), y se han escogido de modo que formen un conjunto completo, consistente y lo más significativo posible, pues se ha buscado una transición continua de las características espectrales entre cada clase de espectro y sus clases adyacentes. Asimismo, en el diseño de muchas de las redes neuronales descritas en este capítulo se han empleado también los 500 espectros del catálogo secundario de referencia [Prugniel 2001], pues permiten evaluar el comportamiento de las redes en una muestra que presenta una mayor variedad de características espectrales, debido a que estos espectros son reales y se ven, por

tanto, afectados por factores como el enrojecimiento interestelar o los efectos de distorsión de la atmósfera.

Como ya se ha mencionado, una de las mayores ventajas de las redes neuronales consiste en su capacidad de generalización, lo cual significa que una red entrenada podría clasificar datos de la misma especie que los datos de entrenamiento sin que estos se le hubiesen presentado con anterioridad. Aunque es posible utilizar todos los patrones disponibles para la fase de aprendizaje, con el objetivo de alcanzar una generalización óptima de las redes de neuronas diseñadas, es recomendable subdividir el conjunto completo de datos de entrada en tres partes:

- Conjunto de entrenamiento, empleado para entrenar las redes de neuronas durante el proceso de aprendizaje; el error de este conjunto de datos se intenta minimizar durante el entrenamiento.

- Conjunto de validación, que se utiliza para evaluar el rendimiento de una red neuronal durante el propio proceso de aprendizaje, con patrones que no se usan durante el entrenamiento; este conjunto se presenta como entrada tras un número predeterminado de ciclos de aprendizaje, y la propia red modifica sus pesos dinámicamente.

- Conjunto de prueba, usado para evaluar el rendimiento final de la red, es decir, con el fin de comprobar si esta ha alcanzado una buena generalización con patrones distintos a los empleados durante el proceso de aprendizaje.

Esta estrategia de diseño de los patrones de entrada es la que se ha intentado seguir en las redes que se han planteado para abordar la clasificación de espectros estelares. De este modo, en cada una de las arquitecturas neuronales específicas se ha construido el conjunto de entrenamiento con aproximadamente el 50% de los espectros de cada tipo, dejando alrededor del 10% para validar el entrenamiento y el 40% restante para evaluar las redes. Las tablas 15 y 16 muestran la distribución del conjunto de espectros seleccionados para diseñar y evaluar las redes de neuronas artificiales de clasificación en tipo espectral y en luminosidad estelar, respectivamente.

El proceso que consiste en entrenar y validar al mismo tiempo una red de neuronas artificiales con el objetivo de detenerse en el punto óptimo, se denomina validación cruzada [Haykin 2008]. El entrenamiento de la red debería finalizar en el momento en que el error del conjunto de validación sea mínimo, pues es cuando se supone que se alcanza una mejor generalización. Sin embargo, si este proceso no se detiene en dicho instante, posiblemente la red no se ajuste correctamente a los patrones, sino que simplemente memorizará el conjunto de entrenamiento, lo que técnicamente se denomina sobreentrenamiento, ya que se

considera que la red está *aprendiendo demasiado*. Asimismo, puede ocurrir que se alcance un mínimo local y se detenga el proceso de aprendizaje antes de llegar a una solución aceptable, aun cuando el error del conjunto de validación continúe siendo demasiado alto; en estos casos se suele solventar el problema modificando los parámetros de aprendizaje, variando la composición de los nodos intermedios, si los hubiera, o incluso comenzando de nuevo el proceso de entrenamiento inicializando la red de manera distinta.

Tipo espectral MK	Conjunto Entrenamiento	Conjunto Validación	Conjunto Prueba
B	25	5	20
A	20	3	14
F	24	5	19
G	25	5	19
K	20	3	14
M	20	3	14
TOTAL	134	24	100

Tabla 15. Composición de los conjuntos espectrales para las redes de tipo espectral

Clase luminosidad MK	Conjunto Entrenamiento	Conjunto Validación	Conjunto Prueba
I	30	6	23
II	10	1	5
III	40	7	31
IV	11	2	8
V	43	8	33
TOTAL	134	24	100

Tabla 16. Composición de los conjuntos de espectros para las redes de luminosidad

Además del criterio de minimización del error, es importante que los datos de entrenamiento cubran todo el espacio de entradas esperado, pues la extrapolación o generalización de la red sería errónea si se entrena de modo insuficiente o inadecuado, utilizando por ejemplo una incorrecta distribución de las distintas clases de patrones de entrada, ya que de esta forma se dificultaría la identificación posterior de las clases menos favorecidas durante el entrenamiento [Freeman 1991].

Las redes neuronales diseñadas para la clasificación espectral se han entrenado y evaluado en su mayoría con patrones de entrada que representan un conjunto de características resumen de los espectros (energía de bandas moleculares, intensidad o anchura equivalente de líneas de absorción y emisión, ratios entre líneas espectrales colindantes, etcétera). En concreto estos patrones incluyen los 25 índices espectrales descritos en la tabla 4, resultantes del análisis de sensibilidad de los criterios de clasificación realizado previamente

(v. sec. 4.2 y 4.3). En general no se ha realizado una selección previa de los parámetros que afectan a cada tipo espectral o clase de luminosidad, por lo que la mayor parte de los modelos neuronales que se han implementado incluyen 25 neuronas en la capa de entrada, una por cada parámetro, y una neurona más (salida esperada) en el caso del entrenamiento supervisado. Sin embargo, con el objetivo de llevar a cabo un estudio de la influencia de distintos conjuntos de índices en la obtención de la clasificación MK, en determinadas ocasiones se han diseñado redes que utilizan un subconjunto de estas características espectrales; asimismo, en todas las redes que emplean los espectros del catálogo secundario (Prugniel 2001), el número de patrones de entrada se reduce a 16, ya que esta base de datos no cubre todo el rango espectral en el que se localizan los índices de clasificación seleccionados. Además, en algunos diseños concretos se han utilizado también patrones de entrada que representan el flujo espectral en determinadas regiones de longitud de onda específicas, es decir, se le proporcionan a la red neuronal zonas espectrales completas para que sea ella misma la que extraiga la información relevante.

Los patrones de entrenamiento, validación y prueba, tanto los construidos con índices espectrales como aquellos formados por valores de flujo energético, se han obtenido automáticamente añadiendo la funcionalidad necesaria a la aplicación de análisis espectral desarrollada (v. cap. 3). El valor de cada índice de clasificación considerado necesita ser adaptado antes de que se construyan los patrones de entrada que se le proporcionarán posteriormente a las redes de neuronas artificiales. Para ello, previamente a la fase de entrenamiento, se normalizaron las entradas de las redes utilizando dos métodos distintos:

- Normalización global: se aplica una función sigmoidal global que normaliza los parámetros de entrada en el intervalo [0, 1]. Esto es:

$$x' = \frac{1}{1 + e^{-x}}$$

- Normalización contextualizada: se aplica una función sigmoidal específica para cada índice espectral. Esto es:

$$x' = \frac{1}{1 + e^{-(ax+b)}} \quad , a > 0$$

Esta última función normaliza los parámetros de entrada en el intervalo [0,1] y centra y escala la función de distribución de cada parámetro apropiadamente. Las constantes a y b se obtienen seleccionando para cada índice espectral un mínimo x1 y un máximo x2 de forma que el 95% de los valores de cada índice para todos los espectros de los catálogos de referencia se hallen entre ellos. De este modo, resolviendo el sistema de

ecuaciones siguiente, se determinan los valores de las constantes a y b para cada parámetro de clasificación espectral:

$$0.025 = \frac{1}{1 + e^{-(ax_1 + b)}}$$
$$0.975 = \frac{1}{1 + e^{-(ax_2 + b)}}$$

En la figura 55 se incluye un ejemplo de estos dos tipos de funciones de normalización para un índice espectral específico, cuyos valores reales oscilan en el intervalo [-40, 40]; tal y como se aprecia visualmente, la función contextualizada presenta cambios menos abruptos y es más equitativa distribuyendo los valores resultantes de la normalización, por lo que es esperable que logre un ajuste más adecuado. Se han elegido funciones sigmoidales porque, además de facilitar una normalización apropiada, son las que se utilizan con mayor frecuencia como funciones de activación de las neuronas, homogenizándose así en cierta forma el proceso de diseño de las redes neuronales.

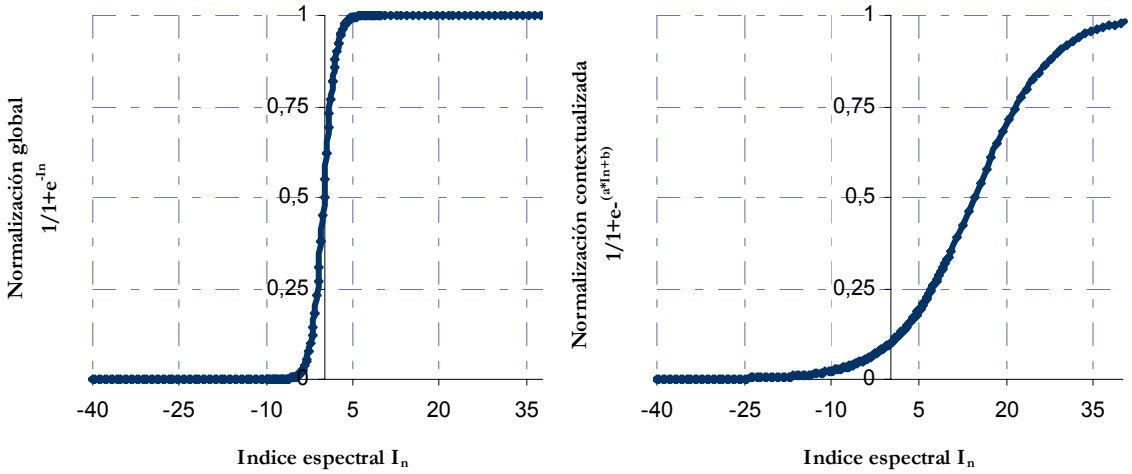


Figura 55. Funciones de normalización sigmoidal para los patrones de entrada de las redes neuronales de clasificación diseñadas

Para el diseño y entrenamiento de las redes de clasificación se ha utilizado el simulador SNNS v4.3 (*Stuttgart Neural Network Simulator*) [SNNS 2010a]. Esta herramienta permite el diseño e implementación de redes con diferentes topologías, algoritmos de aprendizaje, funciones de activación, inicialización y actualización de los pesos de las neuronas. Además incorpora una opción de transformación directa a código C de las redes entrenadas, que se ha aprovechado para integrar las redes de clasificación estelar en el sistema global de análisis y clasificación de espectros. Este software de diseño de redes neuronales incluye también algunos parámetros que permiten evaluar el rendimiento de las mismas,

como por ejemplo el MSE (*Mean Square Error*) o el SSE (*Sum Square Error*). Durante la experimentación se observó que la mayoría de las redes implementadas convergen para valores de MSE inferiores a 0.05, pues en este punto las redes se vuelven estables: si el entrenamiento continúa después de alcanzar este umbral, la red generalmente se sobreentrena y su rendimiento decrece. Para evaluar la tasa de acierto de las redes implementadas, SNNS proporciona un mecanismo que permite generar ficheros de resultados de la red sobre un conjunto de patrones diferentes a los usados durante el entrenamiento. En este simulador una salida mayor de 0.5 en una neurona equivale a un 1, mientras que una salida inferior a 0.5 es equivalente a un 0; por esta razón, para evitar ambigüedades en la evaluación del rendimiento de las redes implementadas a través de la generación y análisis de los correspondientes ficheros de resultados, no se han considerado como clasificaciones correctas las salidas cercanas a 0.5, en concreto las pertenecientes al intervalo [0.45, 0.55].

Actualmente existen modelos muy diversos de redes de neuronas artificiales en los que el diseño, reglas de aprendizaje y respuesta son muy distintas; para abordar la clasificación automática de espectros ópticos se han seleccionado diferentes arquitecturas neuronales, realizándose el proceso de entrenamiento con algoritmos de aprendizaje tanto supervisado como no supervisado. En concreto se han diseñado redes *backpropagation* (arquitectura multicapa con aprendizaje supervisado) [Ham 2000], SOM (mapas autoorganizados, con arquitectura en malla y aprendizaje no supervisado) [Kohonen 2001], RBF (arquitectura en capas y aprendizaje híbrido) [Howlett 2001] y memorias asociativas (redes recurrentes con aprendizaje supervisado) [Hopfield 1999]; dentro de estos tipos generales se analizarán diferentes variantes, como por ejemplo *backpropagation momentum* o *quickpropagation*, para determinar cuáles alcanzan un rendimiento óptimo en la determinación de la clasificación MK. Del mismo modo, será también objeto de estudio el comportamiento de cada red en función de las diferentes topologías posibles (número de capas, nodos de las capas intermedias, etcétera).

En las secciones siguientes se exponen los detalles concernientes al diseño (arquitectura, topologías, proceso de aprendizaje y validación, estudio de la influencia de los índices espectrales, etc.) de las redes seleccionadas para los diferentes tipos de clasificación espectral (tipo/subtipo espectral, luminosidad), así como una comparativa entre su rendimiento cuyo objetivo último es la determinación del tipo de red que se adapta mejor al problema considerado. Finalmente, se incluirán también los detalles relativos a la implementación en C++ de las redes neuronales óptimas, y su integración en el sistema propuesto de análisis y clasificación espectral.

4.5.2 Backpropagation

Las redes neuronales MLP (perceptrón multicapa) entrenadas con algoritmos de aprendizaje basados en la propagación hacia atrás del error (*backpropagation*), son las que se han empleado con mayor frecuencia para resolver problemas de clasificación, y no solamente en el campo de la Astrofísica, pues el 80% de las aplicaciones actuales de redes de neuronas artificiales lo son bajo el paradigma *backpropagation*. Por tanto, constituye esta un tipo de red neuronal muy conocida y prácticamente todas las herramientas, tanto de libre distribución como comerciales, la implementan, siendo así su fase de desarrollo muy rápida, ya que es sencillo obtener, con el conocimiento del dominio circunscrito al entorno de aprendizaje, aplicaciones muy específicas y eficientes. También son igualmente conocidos sus inconvenientes, entre los que se puede citar la fuerte dependencia de los valores de entrenamiento iniciales, la saturación de los pesos sinápticos, los elevados tiempos de entrenamiento, la inestabilidad temporal o el problema de los mínimos locales de la función de error [Ratcliff 1990] [Kolen 1991]. Sin embargo, gran parte de estos obstáculos pueden sortearse llevando a cabo varios procesos de entrenamiento distintos.

Una red *backpropagation* consiste en un modelo *feedforward* formado por una capa de entrada con n neuronas, una capa de salida con m neuronas y, dispuestas entre ellas, una o varias capas ocultas de neuronas internas. Una de las características principales de este tipo de redes es que no presentan conexiones hacia atrás ni laterales entre neuronas de la misma capa, lo cual posibilita una mayor rapidez en los cálculos; en el momento en que la información llega a una capa determinada, bien procedente del exterior de la red o bien de la capa precedente, todas las neuronas de la misma computan en paralelo su nuevo estado de activación y transmiten su salida hacia las neuronas de la siguiente capa, en la que tendrá lugar exactamente el mismo proceso hasta que se alcance la capa de salida y se emita al entorno la respuesta final de la red.

El proceso de entrenamiento de redes basado en la retropropagación de los errores fue propuesto originalmente por Paul J. Werbos, quien en 1974 lo incluyó en su trabajo de tesis doctoral [Werbos 1994]. Inicialmente este algoritmo no tuvo excesiva aceptación en la comunidad de desarrolladores de redes neuronales, debido en gran parte a que se formuló en un contexto general para cualquier tipo de redes, siendo las redes de neuronas únicamente una aplicación especial del mismo. Habría pues que esperar hasta mediados de los años 80 para que se reintrodujesen estos conceptos [Rumelhart 1986] [McClelland 1986], y se despertase así por fin un amplio interés en muchos sectores por el gran potencial que ofrece esta aproximación de redes neuronales, el cual radica fundamentalmente en su habilidad para adaptar dos o más capas de pesos sinápticos utilizando una regla de aprendizaje

sofisticada, escapando así de las capacidades restringidas de sus predecesoras con arquitecturas en una sola capa.

En el área de la clasificación o reconocimiento de patrones, la introducción de las redes *backpropagation* supuso un enorme paso hacia delante. En este tipo de problemas la elección de las características o factores sobresalientes suele ser en muchos casos la clave para su correcta resolución, ya que es el hecho de conocer las características discriminantes apropiadas el que permite clasificar correctamente los diferentes patrones. Las redes entrenadas bajo el paradigma de aprendizaje *backpropagation* son capaces de identificar un conjunto efectivo de características automáticamente: cada capa oculta actúa como una capa de detección, con unidades que responden a una característica concreta de los patrones de entrada; estos detectores se organizan a medida que se desarrolla el aprendizaje, extrayendo progresivamente las características más relevantes y adaptándose de tal manera que posibilitan que la red aprenda tareas complejas y alcance una solución satisfactoria.

La ventaja principal de las redes *backpropagation*, y una de las razones de su gran difusión, es su método de aprendizaje simple y claro, basado en conceptos de aprendizaje naturales y muy sencillos: cuando la red proporciona salidas incorrectas se corrigen sus pesos de forma que el error disminuya, con el objetivo de que en el futuro sea capaz de proporcionar respuestas más atinadas ante el mismo patrón de entrada.

El entrenamiento de una red *feedforward* MLP con el algoritmo de aprendizaje supervisado *backpropagation* estándar (conocido habitualmente como *vanilla backpropagation*) consiste en un proceso en dos fases: una primera etapa de propagación de la activación neuronal hacia delante (*forward propagation*), seguida de una segunda fase en la que los errores obtenidos en las salidas se propagan hacia atrás (*backward propagation*). De esta forma, se le presenta a la red un conjunto de patrones de entrada cuyo efecto propagará hacia delante a través de sus capas ocultas, hasta que la activación llegue a la capa de salida (*forward*), sin actualizar durante este proceso los pesos de las conexiones neuronales. Una vez alcanzada la capa de salida, se compara la respuesta obtenida con la esperada (*teaching input*), que se proporciona junto a los datos de entrada, y se ajustan entonces los pesos sinápticos de la capa de salida proporcionalmente al vector de error, formado por las diferencias entre la salida real y la esperada para cada neurona de salida; a continuación se transmiten los errores hacia atrás, adaptando convenientemente los pesos sinápticos capa por capa hasta alcanzar de nuevo la de entrada (*backward*), de forma que la respuesta real en el siguiente periodo se aproxime más a la que se desearía obtener. La red continúa el proceso descrito de aprendizaje en dos fases dando comienzo a un nuevo ciclo de entrenamiento, en el que se le presentarán nuevamente en orden aleatorio todos los patrones de entrada disponibles y se recalcularán otra vez los pesos sinápticos, hasta que los parámetros libres de la red se estabilicen y la medida del error considerada como condición de finalización (normalmente

el error medio de todo el conjunto de entrenamiento) alcance un valor mínimo (o al menos aceptablemente bajo) o no varíe significativamente entre iteraciones (ciclos de entrenamiento).

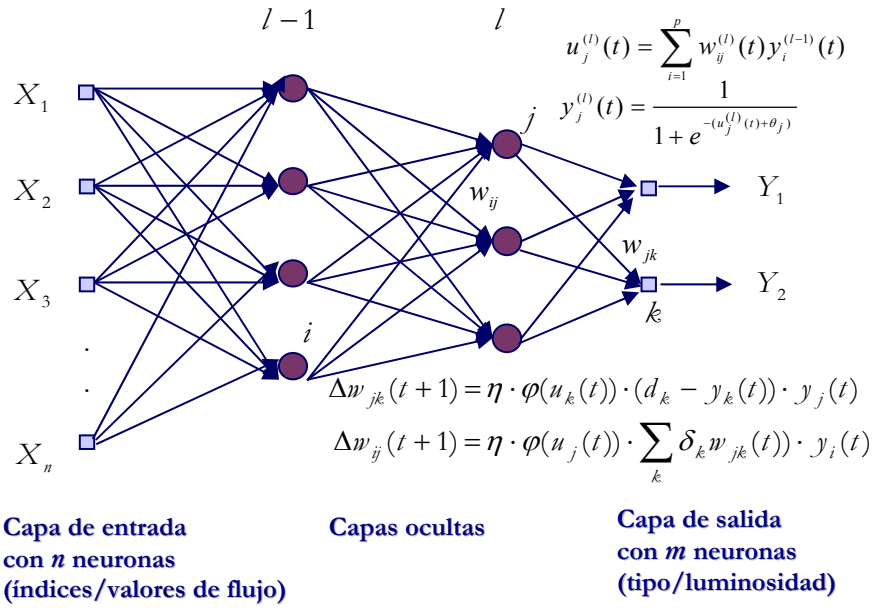


Figura 56. Esquema del algoritmo de aprendizaje *backpropagation* estándar para las redes MLP

En la figura 56 se muestra un esquema del algoritmo de entrenamiento *backpropagation* estándar para las redes MLP. Así, supongamos una red *backpropagation* compuesta de L capas, con n unidades de entrada y m neuronas de salida. En un ciclo específico de entrenamiento t se le presentarán todos los patrones de entrenamiento de forma aleatoria y para cada uno de ellos, representado por el par $\{x_p, d_p\}$ siendo x el vector de n entradas y d el vector de m salidas esperadas, se llevan a cabo los cálculos específicos de las dos etapas descritas anteriormente. Durante la fase *forward* se realiza el cálculo de los valores de activación u_j y de salida y_j para cada neurona j de la red; en la etapa *backward* posterior se ajustan los pesos sinápticos capa a capa de acuerdo a la denominada regla delta generalizada:

$$\Delta w_{ij}(t+1) = \eta\, \delta_j(t) y_i(t),$$

$$\delta_j = \begin{cases} \varphi(u_j(t)) \cdot (d_j - y_j(t)) & \text{si la unidad j es de la capa de salida} \\ \varphi(u_j(t)) \cdot \sum_k \delta_k w_{jk}(t) & \text{si la unidad j es de una capa oculta} \end{cases}$$

donde el índice k corresponde a una neurona sucesora a la actual (perteneciente a la capa siguiente) para la que existe una conexión w_{jk}, d_j es la salida esperada (*teaching input*) para la

neurona j y η es el denominado factor de aprendizaje, parámetro configurable que indica la velocidad de aprendizaje de la red (cuanto mayor sea su valor, más rápido será el proceso de aprendizaje) [Haykin 2008].

En la fase de diseño de las redes *feedforward* de clasificación de espectros estelares, además de la versión estándar descrita, se examinaron las siguientes variantes del algoritmo de aprendizaje basado en la retropropagación del error:

- *Backpropagation Momentum* o *Enhanced Backpropagation*: el algoritmo clásico de retropropagación del error requiere normalmente un número de cálculos elevado para lograr un ajuste apropiado de los pesos sinápticos de la red neuronal; en esta versión mejorada se introduce un factor en la regla de aprendizaje (denominado momento) para tratar de aligerar el entrenamiento y acelerar la convergencia de la red, al tiempo que se evita en gran medida el problema de los mínimos locales de la superficie de error. Los pesos se actualizan de acuerdo a la regla estándar pero, si el error decrece, se reitera el cambio hasta que comience de nuevo a aumentar; esto evitará los problemas habituales de oscilación cuando la superficie de error presente un área mínima muy reducida. Se trata de estabilizar los cambios de los pesos sinápticos introduciendo revisiones más suaves mediante la combinación del término del gradiente (Δw_{ij}) con una fracción de los cambios previos ya realizados. Es decir, en la expresión del incremento de los pesos se añade un nuevo término (momento, μ) que indica el porcentaje de la variación anterior de los pesos que se incluye en cada ciclo de entrenamiento para la computación de los nuevos cambios. Esto es:

$$\Delta w_{ij}(t+1) = \eta \delta_j(t) y_i(t) + \mu \Delta w_{ij}(t)$$

- *Quickpropagation*: esta variante se basa en la agilización del entrenamiento mediante el uso de información sobre la curvatura de la superficie de error, en concreto se calculan las derivadas de segundo orden de dicha función. Se asume que la superficie de error tiene un comportamiento local cuadrático, con los ejes alineados con los pesos, de forma que se pueda realizar en un solo paso directo la modificación de los pesos desde la posición actual al mínimo de la parábola. Así, después de obtener el primer ajuste de los pesos utilizando la regla de actualización del algoritmo *backpropagation* estándar, en los ciclos siguientes se computan las derivadas en la dirección de cada peso y se realiza un paso directo al error mínimo. Esto es:

$$\Delta w_{ij}(t+1) = \frac{f_e'(t+1)}{f_e'(t) - f_e'(t+1)} \Delta w_{ij}(t),$$

donde $f'_e(t)$ representa la derivada parcial de la función de error en el ciclo de entrenamiento t. Esta ecuación adolece de algunos problemas numéricos, ya que si la superficie del error no es cóncava se pueden realizar ajustes erróneos. Al contrario que en el algoritmo estándar donde el ajuste de los pesos se realiza después de cada patrón de entrada, aquí la actualización se aplaza hasta el final de cada ciclo de entrenamiento, pues esta versión se basa en la media para todos los patrones del gradiente de la superficie del error.

- *Backpropagation Batch*: esta variante es muy similar a la versión estándar, la diferencia principal radica en el momento en el que se produce la actualización de los pesos; mientras que en el algoritmo *vanilla* los pesos sinápticos de las conexiones neuronales se modifican después de cada patrón de entrada, en este los ajustes se producen después de una presentación completa de todos los patrones de entrenamiento (una época o ciclo completo).

Independientemente de la versión del algoritmo *backpropagation* que se adopte, antes de dar comienzo al proceso de entrenamiento es necesario realizar la inicialización de la red neuronal, es decir, establecer el valor de todos los pesos sinápticos de las conexiones, determinar los umbrales de activación de todas las unidades de procesamiento y configurar los parámetros de entrenamiento (η, μ, etcétera). El simulador utilizado para el desarrollo de las redes de clasificación espectral, SNNS v4.3, proporciona una función denominada *Randomize_Weigths* que permite asignar unos valores aleatorios iniciales a todos los pesos y *bias* de una red neuronal; en este caso, se ha seleccionado esta opción para inicializar las redes de clasificación con valores en el intervalo [-1, 1].

La regla delta generalizada en la que se basan los algoritmos *backpropagation* requiere el uso de neuronas cuya función de activación sea continua y, por tanto, diferenciable. Para esta experimentación se ha seleccionado la función sigmoidal *Act_Logistic* que proporciona el simulador, matemáticamente expresada por $\varphi = 1/(1+e^{-(u+\theta)})$. Las funciones sigmoidales son unas de las más utilizadas para calcular el nivel de activación de las neuronas, pues están especialmente indicadas para los problemas de reconocimiento de patrones en los que la respuesta de la red sea una función continua cuyos valores puedan interpretarse como una estimación de probabilidad, como es el caso de la obtención de clasificaciones MK de las estrellas.

Para efectuar la actualización de los pesos sinápticos se ha optado por la función *Topological_Order*, que induce a las neuronas a computar su nueva activación en un orden marcado por la propia topología de la red; esto significa que primeramente se realizan los cálculos en la capa de entrada, siguiendo con las capas ocultas y finalizando con la de salida.

En la primera fase del desarrollo de redes neuronales *feedforward* para obtener la clasificación MK de las estrellas, se analizaron las diferentes versiones descritas del algoritmo *backpropagation* con el objetivo de evaluar su rendimiento a la hora de diferenciar entre los tipos espectrales MK considerados (B, A, F, G, K y M). En esta primera experimentación se escogió un conjunto de patrones formados a partir de los índices espectrales de clasificación resultantes del análisis previo de sensibilidad (incluidos en la tabla 4 de la sección 4.2). De esta forma, los patrones de entrenamiento, validación y prueba presentados a las redes diseñadas estarán formados por los valores de los 25 parámetros espectrales (intensidad de líneas de absorción, anchura equivalente de bandas moleculares, etc.) para los 258 espectros seleccionados de los catálogos principales de referencia (Silva 1992, Pickles 1998, Jacoby 1984), normalizados convenientemente con los dos métodos de ajuste sigmoidal considerados. La composición específica de dichos conjuntos de espectros es la que se recoge en la tabla 15 de la sección anterior.

En cuanto a la topología, las redes de clasificación constarán de una capa de entrada con 25 neuronas (1 por cada índice espectral), una o varias capas ocultas y una capa de salida con seis neuronas (1 por cada tipo espectral). Puesto que el algoritmo de aprendizaje *backpropagation* es de tipo supervisado, será necesario también proporcionar a la red la codificación de la salida esperada o *teaching input* para cada patrón de entrada, de modo que pueda calcular el vector de errores y actualizar apropiadamente los pesos sinápticos de sus conexiones.

En sistemas simulados, como es el caso, la estrategia de diseño más utilizada para configurar las capas intermedias de las redes consiste en tratar de simplificar al máximo las mismas, incluyendo el menor número de neuronas posibles en cada capa oculta, pues cada una de ellas supondrá una carga mayor de procesamiento en el caso de una simulación software. Además, un número elevado de neuronas podría fomentar que la red simplemente memorice los patrones de entrenamiento, originando una merma considerable en su capacidad de generalización. Por otro lado, se ha observado que para la mayoría de los problemas una red MLP con una única capa oculta es capaz de realizar una aproximación cercana a cualquier función que se desee determinar; no obstante, emplear redes con más capas ocultas en ocasiones puede aportar algunas ventajas, de hecho algunos problemas que si se resuelven con una red de n capas requieren un número exponencial de nodos, podrían implementarse con una red de n+1 capas con un número polinómico de neuronas [Chauvin 1995].

Siguiendo por tanto esta estrategia de simplificación, se han diseñado redes con diferentes topologías, partiendo de estructuras sencillas y aumentando progresivamente tanto el número de capas ocultas como el número de neuronas incluidas en las mismas. Así, se han evaluado las configuraciones neuronales 25x3x6, 25x5x6, 25x10x6, 25x2x2x6,

25x5x3x6, 25x5x5x6, 25x10x10x6, 25x3x2x1x6, 25x5x3x2x6 y 25x10x5x3x6. En la gráfica de la figura 57 se muestra, para las redes con estas topologías seleccionadas, el análisis comparativo del rendimiento de los diferentes algoritmos de aprendizaje (*backpropagation estándar*, *backpropagation momentum*, *quickpropagation, backpropagation batch*) en la determinación del tipo espectral sobre el conjunto de 100 espectros de prueba. Tal y como puede observase, no serían necesarias distribuciones neuronales muy complejas, pues con un número reducido de neuronas en las capas ocultas (3, 5, 5x3) se puede discriminar satisfactoriamente entre las diferentes clases de espectros. De hecho, el incremento del número de capas ocultas condujo en muchos casos al aumento de los tiempos de entrenamiento, obteniéndose a la vez una mejora del rendimiento no excesivamente significativa (del 2% al 5%).

Buscando un compromiso satisfactorio entre la velocidad de la fase de entrenamiento y la facilidad de interpretación de los resultados, se ha elegido finalmente la topología 25x5x3x6, pues ofrece una tasa de acierto muy similar a la óptima (25x10x5x3x6) a la vez que se simplifica la estructura de la red, de forma que esta puede entrenarse más rápidamente y sus resultados son más inteligibles, es decir, una vez entrenada el análisis de los pesos de sus conexiones se presta a una interpretación más fácil y sencilla.

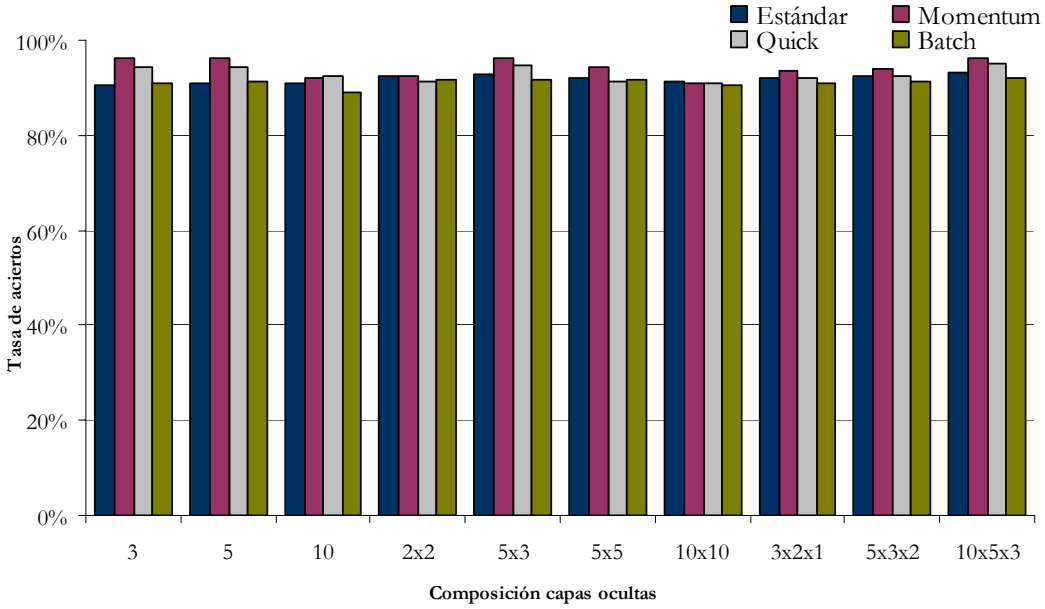


Figura 57. Rendimiento de los algoritmos *backpropagation* para las diferentes topologías consideradas

Como pone de manifiesto el estudio topológico anterior, los algoritmos de aprendizaje que mejores resultados han logrado para la red seleccionada (25x5x3x6) son *quickpropagation* y *backpropagation momentum*. Además, fueron también estos los que propiciaron un entrenamiento más rápido, llevando a la red a converger en menos de la mitad de los ciclos de entrenamiento necesarios en el algoritmo estándar. Sin embargo, con la variante *backpro-*

pagation momentum las redes convergen hasta un error menor y, por tanto, la respuesta que obtienen se aproxima más a la salida deseada. En consecuencia, será este el algoritmo de aprendizaje *backpropagation* seleccionado para implementar la clasificación en tipo espectral de las estrellas.

En la tabla 17 se muestra la evolución del proceso de entrenamiento efectuado sobre la red *backpropagation momentum* de topología óptima (25x5x3x6), con el fin de establecer el valor más apropiado de los parámetros μ (porcentaje del valor anterior del peso de una conexión incluido en el cómputo del nuevo) y η (coeficiente de entrenamiento). En esta experimentación los restantes parámetros libres de la red, es decir, *flat spot* (constante que se añade a la derivada de la función de activación para permitir que la red mantenga su funcionamiento y actualice los pesos, evitando las zonas constantes para las cuales dicha derivada es nula) y d_{max} (diferencia máxima permitida entre la salida esperada y la obtenida realmente por la red) se fijaron en 0.1 y 0, respectivamente. Asimismo, los patrones se normalizaron mediante la función sigmoidal contextualizada y el conjunto de validación se presentó a la red cada 50 ciclos de entrenamiento. El proceso de entrenamiento concluyó cuando se obtuvo un valor de MSE (media de los cuadrados del error) por debajo de 0.05, ya que se observó que a partir de dicho umbral las redes se vuelven estables, sin llegar a estar sobreentrenadas. Matemáticamente esta condición de finalización del entrenamiento podría expresarse como:

$$MSE \leq 0.05$$

$$MSE = \frac{SSE}{P} = \frac{\sum_{p=1}^{P}\sum_{j=1}^{M}(d_{pj} - y_{pj})^2}{P},$$

donde SSE es la suma de cuadrados del error de la función de aprendizaje para un entrenamiento con P patrones de entrada y M neuronas de salida; d_{pj} es la salida esperada de la neurona j para el patrón de entrada p, e y_{pj} la salida real para dicho patrón. Como puede apreciarse observando los diferentes procesos de entrenamiento recogidos en la tabla, un valor más elevado del parámetro μ conduce a un rendimiento ligeramente superior y a alcanzar la convergencia en un menor número de ciclos. Con relación al coeficiente de aprendizaje, se obtuvieron resultados muy similares para valores oscilando en el intervalo [0.01-0.2], si bien generalmente las redes convergen antes cuanto mayor sea este parámetro.

Con el objetivo de completar esta primera fase de pruebas, y establecido ya el valor del coeficiente de aprendizaje en 0.1 y el del *momentum* en 0.5, se llevó a cabo un nuevo proceso de entrenamiento de la red seleccionada para la clasificación en tipo espectral (topología 25x5x3x6) en el que se fueron ajustando dinámicamente parámetros tales como la frecuencia de validación (de 0 a 100 ciclos) o el número de ciclos de entrenamiento; además,

se contemplaron las dos variantes de normalización de los patrones (global y contextualizada) y se varió aleatoriamente el orden de presentación de los patrones de entrada tras cada ciclo de aprendizaje. Después de evaluar los resultados para cada una de estas opciones diferentes de entrenamiento, se observó que en los casos en los que se empleó validación cruzada se consiguió una tasa de acierto superior a la obtenida con las mismas redes entrenadas sin utilizar el conjunto de validación; esto ocurre porque la validación influye muy significativamente en los pesos de las neuronas, permitiendo a la red corregirlos dinámicamente durante el entrenamiento. Asimismo, las redes en las que las entradas se normalizaron con la función contextualizada para cada uno de los 25 índices espectrales de clasificación presentaron también un rendimiento más elevado que aquellas en las que los patrones se adaptaron con una función sigmoidal global.

NºCiclos	η	μ	MSE final	Tasa acierto
800	0.2	0.5	0.00363	95%
820	0.2	0.2	0.00427	95%
850	0.2	0.1	0.02745	94%
950	0.1	0.5	0.00206	**96%**
1000	0.1	0.2	0.00561	95%
1000	0.1	0.1	0.01984	95%
1200	0.01	0.5	0.00341	95%
1500	0.01	0.2	0.00828	95%
1500	0.01	0.1	0.02634	94%

Tabla 17. Evolución del entrenamiento de las redes *backpropagation* de tipo espectral variando los parámetros η y μ

Todos estos estudios preeliminares han permitido descubrir las características de la red *backpropagation* óptima para la clasificación en tipo espectral, es decir, se ha establecido la topología (25x5x3x6), el algoritmo de aprendizaje (*backpropagation momentum*), los valores de los parámetros libres de la red ($\mu = 0.5$, $\eta = 0.1$, *flat* = 0.1, $d_{max} = 0$), la normalización de las entradas (función sigmoidal contextualizada) y las características del entrenamiento idóneas para la discriminación del tipo espectral de las estrellas (validación cruzada cada 10 ciclos, pesos inicializados aleatoriamente y actualizados siguiendo el orden topológico de la red, condición de finalización MSE≤0.05, etcétera). En la figura 58 se muestra tanto la estructura de esta red final *backpropagation* diseñada para determinar el tipo espectral MK, como su proceso de entrenamiento, el cual concluyó después de aproximadamente 6000 ciclos con un valor de MSE alrededor de 0.01, como puede observarse en la gráfica de evolución.

En el análisis de los resultados de esta red, al igual que ocurría con la técnica anterior de clasificación, se advirtió que muchos de los errores de clasificación estaban relacio-

nados con el problema de subtipos limítrofes entre tipos espectrales, ya enunciado en la evaluación del rendimiento del sistema experto desarrollado; para minimizar este efecto se consideró igualmente aquí la holgura de un subtipo espectral en la clasificación, es decir, las discrepancias entre la clasificación de la red y la proporcionada en el catálogo de referencia que conciernan únicamente a un subtipo se considerarán correctas, tal y como suelen considerarse también en la técnica manual. Además en muchos de los casos afectados por este problema de bordes, la propia red concluye una clasificación con un nivel de activación en las neuronas de salida no tan fuerte como era de esperar, es decir, si bien es una la neurona con mayor activación en la capa de salida, existen otras con un nivel similar (por ejemplo, salidas con valor 0.7 para un tipo y 0.6 para el adyacente). Bajo estas premisas, la red diseñada asigna un tipo espectral consistente a 96 de los 100 espectros del catálogo de prueba (con un error medio de 0.06 tipos), tal y como se muestra en la tabla 18; se aprecia de nuevo en este caso un descenso en la tasa de aciertos que afecta sobre todo a los tipos espectrales A, F y G, y que se debe al conocido problema de degeneración entre la metalicidad y la temperatura estelar.

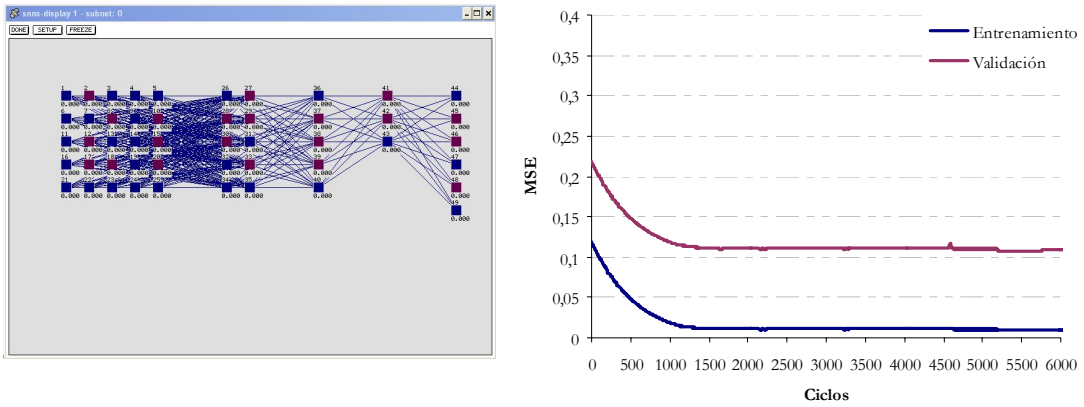


Figura 58. Estructura y entrenamiento de la red *backpropagation* óptima de la clasificación en tipo espectral

Hasta ahora la estrategia de clasificación mediante redes neuronales *feedforward* se ha basado en el diseño de una única red global a cuya salida se obtiene el tipo espectral, sin embargo, como ya se ha mencionado, en la técnica manual los espectroscopistas suelen llevar a cabo una clasificación en niveles, similar a la que se implementó en el sistema experto descrito en la sección precedente. Así pues, para evaluar esta alternativa más congruente con el proceso habitual de clasificación estelar, se diseñaron redes que obtienen primeramente una clasificación general en temperatura, diferenciando entre estrellas tempranas, intermedias y tardías, para posteriormente discriminar entre los tipos espectrales B-A, F-G y K-M separadamente. Observando los resultados obtenidos en la etapa de experimentación previa, estas nuevas redes se han entrenado de igual modo con el algoritmo

backpropagation momentum siguiendo las mismas pautas en cuanto a validación cruzada, normalización contextualizada, valor de los parámetros del algoritmo de aprendizaje, etc. La tabla 19 muestra las características del entrenamiento para las distintas topologías consideradas en la red de clasificación diseñada para separar estrellas intermedias, tempranas y tardías. En este caso se obtiene ya un rendimiento satisfactorio con una única capa oculta; los resultados indican además que el aumento de neuronas ocultas en este nivel de clasificación ayuda a reducir el número de ciclos de entrenamiento, incrementando al mismo tiempo la tasa de acierto de la red (98% para una única capa con 10 neuronas).

Tipo espectral MK	Entrenamiento (Nº espectros)	Validación (Nº espectros)	Prueba (Nº espectros)	Tasa acierto (%)
B	25	5	20	100%
A	20	3	14	85.71%
F	24	5	19	94.73%
G	25	5	19	94.73%
K	20	3	14	100%
M	20	3	14	100%
TOTAL	134	24	100	**96%**

Tabla 18. Resultados de la red *backpropagation* óptima de clasificación en tipo espectral MK

Neuronas capa oculta	Nº Ciclos	η	μ	MSE final	Tasa acierto
10	2600	0.1	0.5	0.01626	**98**%
7	1800	0.1	0.5	0.02235	93%
5	1300	0.1	0.5	0.02097	92%
3	1000	0.1	0.5	0.03057	92**%**

Tabla 19. Evolución del entrenamiento de las redes *backpropagation* de clasificación global

En cuanto a las redes diseñadas para el siguiente nivel, esto es, las que separan los diferentes grupos espectrales (B-A, F-G y K-M), la topología *backpropagation momentum* más adecuada ha resultado ser la misma que en el caso anterior de las redes de obtención del tipo espectral, es decir, 25x5x3x2. Así, llevando a cabo un proceso de entrenamiento análogo, se logró un rendimiento medio similar, si bien se experimentó un descenso notable en la tasa de acierto de los tipos tardíos (en torno al 7%) en comparación con la red diseñada para obtener el tipo espectral directamente. Los resultados detallados por grupo espectral de estas dos alternativas de clasificación (red global de tipo y red en dos niveles) se reflejan en azul en las dos primeras columnas de la figura 59.

Las redes anteriores con un rendimiento óptimo, es decir, las que obtuvieron los mejores resultados en la clasificación de parejas de tipos espectrales, se revisaron detenidamente con el objetivo de efectuar un nuevo estudio de sensibilidad, ahora a posteriori, de los índices espectrales de clasificación. De esta forma se llevó a cabo un examen de los pesos sinápticos de las redes tal y como quedan después de finalizar el proceso de entrenamiento, esto es, se comprueban y siguen desde la capa de salida hasta la de entrada las conexiones neuronales que presentan mayor valor, eligiéndose los parámetros correspondientes, pues son estos los que la red considera que tienen mayor importancia en la discriminación de cada tipo espectral individual. En la tabla 20 se muestran los índices espectrales que este estudio ha reflejado como los que más influyen sobre los tres tipos de clasificaciones.

B-A	**F-G**	**K-M**
Línea Ca II, H (id 11)	Línea Ca II, K (id 10)	Banda TiO 5160 Å (id 3)
Línea H I_{γ} (id 12)	Línea Ca II, H (id 11)	Banda TiO 6262 Å (id 7)
Línea H I_{δ} (id 13)	Línea H I_{δ} (id 13)	Banda TiO 6745 Å (id 8)
Línea He I 4026 Å (id 14)	Línea H I_{α} (id 17)	Banda TiO 7100 Å (id 9)
Línea He I 4471 Å (id 15)	Banda G (id 18)	Línea H I_{β} (id 16)
Ratio H I_{δ}, He I 4026 Å (id 20)	Ratio Banda G, H I_{γ} (id 22)	Línea H I_{α} (id 17)
Ratio H I_{δ}, He I 4471 Å (id 21)	Bandas TiO principales (id 23)	Ratio Banda G, H I_{γ} (id 22) Bandas TiO principales (id 23)

Tabla 20. Índices espectrales con mayor influencia en la discriminación de tipos espectrales MK según el análisis de sensibilidad realizado sobre los pesos de las redes *backpropagation momentum*

Para cotejar estos resultados se construyeron nuevas redes *backpropagation* considerando en la capa de entrada únicamente los índices de clasificación supuestamente más influyentes. El análisis de los resultados de estas redes, cuyos detalles se recogen en la figura 59, pone de manifiesto que si bien estos parámetros contribuyen significativamente en la salida, estas no serían capaces de alcanzar un rendimiento óptimo sin ayudarse de la información que aportan otros parámetros menos influyentes: la red, para ser capaz de generalizar apropiadamente, necesita fijarse no solamente en la presencia de determinadas características espectrales (los índices más relevante para cada tipo) sino también en la ausencia de otras en zonas espectrales distintas.

Adicionalmente, y con el objetivo de completar este análisis de sensibilidad, se diseñaron nuevas redes basadas en algunos de los índices espectrales que en la teoría de clasificación estelar se señalan como más influyentes para cada grupo. Como ya se ha mencionado, en las estrellas más frías (tipos K y M) la clasificación se centra generalmente en la zona de las bandas moleculares, es decir, aproximadamente a partir de 5000 Å; en cambio, para los tipos espectrales correspondientes a estrellas más calientes (B, A, F y G), los expertos

observan las zonas en las que se produce la mayor parte de los fenómenos de absorción o emisión de elementos químicos, lo que equivale aproximadamente a la región espectral comprendida entre 3900 Å y 5500 Å.

Parámetros B-A	Tasa acierto	Parámetros F-G	Tasa acierto	Parámetros K-M	Tasa acierto
Líneas H I, He I	91.17%	Líneas Ca II, H I	97.36%	Bandas moleculares	89.28%
Ratios entre líneas	82.35%	Ratios entre líneas	92.10%	Suma de bandas	89.28%
Líneas + Ratios	88.23%	Líneas + Ratios	97.36%	Suma + Líneas HI	89.28%

Tabla 21. Rendimiento de las redes diseñadas con los distintos conjuntos de índices espectrales

Los distintos conjuntos de índices seleccionados para cada grupo espectral, así como el rendimiento alcanzado para cada red diseñada se muestran en la tabla 21. La composición de la capa de entrada de la red no afecta significativamente en la discriminación entre los tipos K y M, pues tal y como se recoge en la tabla, se obtiene un porcentaje de error aceptable (en torno al 10%) basando el diseño únicamente en la anchura equivalente de las bandas moleculares o en la suma de los valores de las mismas; estas redes, no obstante, presentan una tasa de acierto ligeramente inferior a la obtenida al incluir la totalidad de los parámetros en la capa de entrada (aproximadamente del 3.5% menos). Por el contrario, en los tipos espectrales B y A las redes con rendimiento óptimo son las diseñadas para aceptar solamente la información de las líneas de absorción de hidrógeno y helio, lo cual es indicativo de que la inclusión de coeficientes entre líneas distorsiona en cierto grado la clasificación para estos tipos; en este caso ha descendido igualmente la tasa de acierto en comparación con la de las redes entrenadas con el conjunto completo de parámetros (alrededor de un 3%). Finalmente, en los tipos F y G se ha comprobado que se logran mejores resultados, incluso que los obtenidos con todo el conjunto de índices espectrales, cuando se considera solamente el subconjunto de índices referidos a las líneas espectrales de absorción para construir los patrones de entrada, lo cual señala que algunos parámetros del conjunto completo (como por ejemplo el valor de algunas bandas) estarían interfiriendo de algún modo en la correcta separación de las estrellas de este grupo.

En la clasificación manual, como ya se expuso en los epígrafes precedentes, en algunas ocasiones los expertos estudian el espectro completo de la estrella o una región espectral concreta, pues sucede a veces que el ruido u otros factores impiden la correcta medición de los índices espectrales significativos. La clasificación no se basará por tanto siempre en criterios particulares, sino que a veces se observa todo el rango comparando visualmente el espectro con los de las estrellas de referencia. Teniendo este hecho en cuenta, se han adaptado las redes que han obtenido mejor rendimiento en la clasificación anterior por grupos para que sean capaces de aceptar zonas espectrales específicas en la capa de entrada.

De este modo se han seleccionado las regiones espectrales más relevantes para cada pareja de tipos espectrales: los valores de flujo comprendidos entre las longitudes de onda 3900 Å a 4900 Å para las estrellas tempranas (B, A), 3900 Å a 5500 Å para las intermedias (F, G) y 4800 Å a 7200 Å para las tardías (K, M); por tanto, se construyeron redes *backpropagation momentum* con una capa de entrada formada por 200, 320 y 480 neuronas, correspondientes a los valores de flujo de la zona espectral seleccionada para cada pareja de tipos espectrales, muestreada con una dispersión constante de 5 Å. En el periodo de entrenamiento de estas redes se estudiaron de nuevo diferentes topologías, variaciones en los parámetros de entrenamiento, etc. Finalmente, las configuraciones que obtuvieron mejores resultados han sido capaces de clasificar correctamente tan solo aproximadamente un 66% de los patrones de prueba (67.34% para las B-A, 68.42% para las F-G y 64.28% para las K-M), lo cual supone un rendimiento poco satisfactorio en comparación con la tasa de acierto superior al 92% conseguida con las redes iniciales, construidas para aceptar los 25 índices espectrales en la capa de entrada. Estos resultados se deben sin duda al reducido tamaño del conjunto de espectros de entrenamiento en comparación con el elevado número de neuronas de la capa de entrada, lo que estaría impidiendo a la red asimilar apropiadamente las relaciones existentes entre sus entradas y generalizar posteriormente de forma adecuada; sería por tanto preciso entrenar este tipo de redes con un conjunto más amplio de patrones de entrada para conseguir unos resultados satisfactorios y comparables a los obtenidos con las anteriores configuraciones de la capa de entrada.

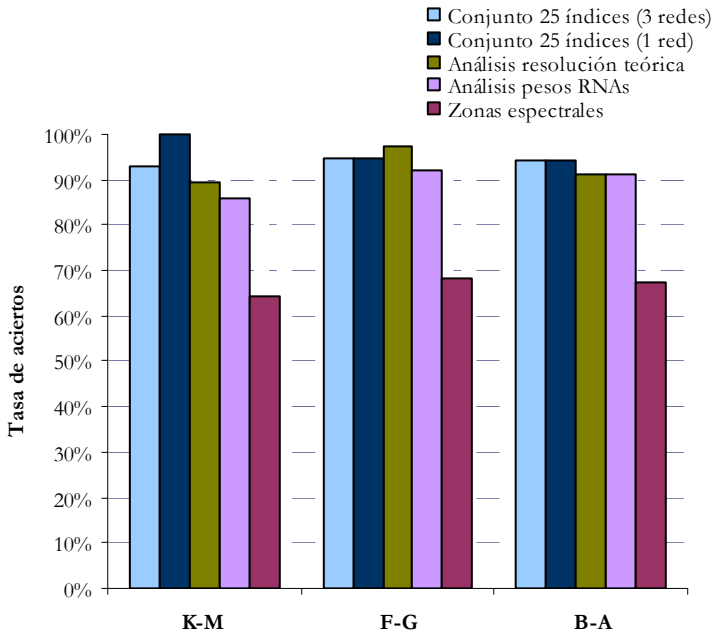


Figura 59. Rendimiento comparado de las redes *backpropagation* diseñadas para aceptar distintos conjuntos de patrones en la capa de entrada

En la figura 59 se muestra una gráfica comparativa del rendimiento de las redes *backpropagation momemtum* óptimas para obtener el tipo espectral directamente, de las diseñadas para discriminar entre grupos espectrales entrenadas con el conjunto completo de parámetros de clasificación, de las construidas con los índices espectrales resultantes del análisis de los pesos sinápticos de las anteriores, de las elaboradas basándose en la experiencia de los expertos y de las diseñadas para aceptar zonas espectrales completas como entrada. Estos resultados ponen de manifiesto que en general las redes más eficientes son las entrenadas con la totalidad de los índices espectrales de clasificación seleccionados, ya que en la mayoría de los casos han proporcionado un rendimiento significativamente mayor para el mismo conjunto de prueba. Por ello, finalmente será esta la estrategia que se adopte en el diseño de la capa de entrada de las redes implementadas para abordar la clasificación MK.

Red Subtipo	Entrenamiento (Nº espectros)	Validación (Nº espectros)	Prueba (Nº espectros)	Nº Ciclos	MSE Final	Tasa acierto
B	25	5	20	4500	0.0033	75%
A	20	3	14	7300	0.0470	57.14%
F	24	5	19	3500	0.0115	63.15%
G	25	5	19	4000	0.0039	68.42%
K	20	3	14	5500	0.0088	64.28%
M	20	3	14	4600	0.0281	57.14%
TOTAL	134	24	100	-	-	**65%**

Tabla 22. Resultados de las redes *backpropagation momentum* óptimas para la clasificación en subtipo espectral

La siguiente etapa de la experimentación con redes de tipo *backpropagation* consiste en diseñar redes que determinen los subtipos espectrales para cada uno de los tipos tratados con las redes construidas en la fase previa (B, A, F, G, K y M). En este caso, el estudio de distintas composiciones de las capas ocultas reveló que la topología para la que se obtiene la mejor convergencia y rendimiento es la constituida por una red para cada tipo espectral con 25 neuronas en la capa de entrada (correspondientes al conjunto completo de índices espectrales), dos capas ocultas con 20 neuronas cada una y una capa de salida con 10 neuronas que permite discriminar entre todos los subtipos posibles (0-9).

En la tabla 22 se muestran las características del entrenamiento y los resultados obtenidos al evaluar cada red de subtipo con el conjunto de 100 espectros de prueba. Se ha optado de nuevo por la inclusión de subtipos con temperaturas próximas dentro de la misma clasificación, es decir, se admite como válido un error de clasificación de la red de $\pm$ 1 subtipo para mitigar así el efecto de las clasificaciones supuestamente erróneas en los subtipos que marcan el límite entre tipos espectrales. De esta forma, las redes son capaces de determinar correctamente el subtipo espectral para un 65% de los espectros de prueba,

con un error medio de 0.51 subtipos. Los resultados obtenidos revelan que el rendimiento decrece para los tipos en los que se dispone de un conjunto de entrenamiento más reducido (A, K y M). De igual forma, la distribución de subtipos dentro de cada tipo influye también notablemente en el rendimiento de las redes, ya que obviamente estas no serán capaces de clasificar eficazmente aquellos subtipos de los que se les haya presentado un número muy reducido o incluso inexistente de patrones de entrada durante el entrenamiento.

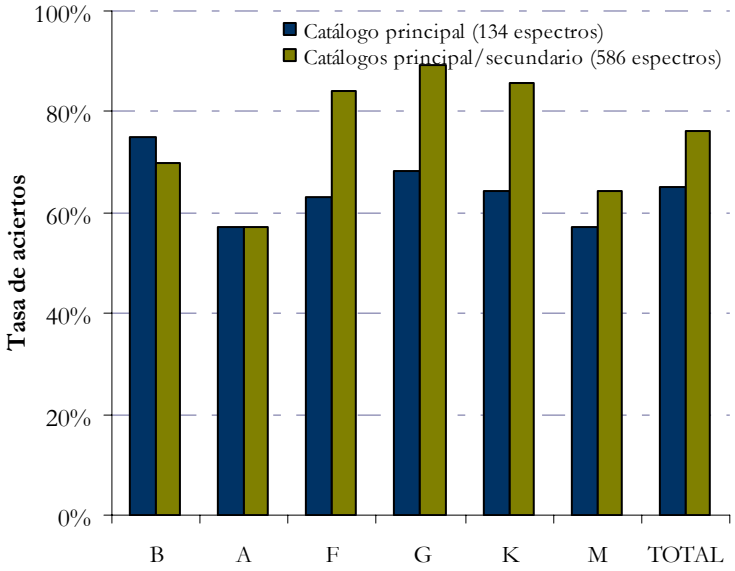


Figura 60. Rendimiento comparado de las redes de subtipo espectral entrenadas únicamente con el catálogo principal y añadiendo los espectros del catálogo secundario de referencia

Con el objetivo de diseñar redes de clasificación en subtipo espectral que sean capaces de una mayor generalización y, por tanto, logren unos resultados más satisfactorios, se ha añadido al conjunto de espectros principal la base de datos espectral de referencia secundaria, formada por los 500 espectros seleccionados del catálogo de Prugniel (véase sección 4.1 para más detalles). Con este nuevo conjunto de patrones, se diseñaron redes *backpropagation momentum* para la clasificación de los subtipos espectrales de cada tipo MK con una topología similar a la ya descrita (25x20x20x10), aunque en este caso la capa de entrada estará formada únicamente por los 16 índices espectrales (v. tab. 4) que pueden medirse en el rango de longitudes de onda que presenta este segundo conjunto de patrones (4100 Å a 6800 Å). Debido al aumento del número y variedad de los patrones de entrada, en algunos tipos (p. ej. F o G), fue necesario añadir más neuronas en las capas ocultas (topologías 16x50x20x10 y 16x30x20x10). Estas nuevas redes de subtipo, entrenadas con los conjuntos de espectros que se especifican en la tabla 23, consiguieron clasificar apropiadamente el subtipo espectral del 76% de los espectros de prueba, con un error medio de 0.32

subtipos, lo cual supone un incremento superior al 10% sobre la tasa de aciertos obtenida por las redes anteriores entrenadas únicamente con el conjunto estándar de espectros de referencia.

En la figura 60 se contrastan los resultados de estos dos procesos de entrenamiento desglosados por tipo espectral. Como era esperable, las diferencias más notables se encuentran en los tipos intermedios (F, G y K) en los que se ha aumentado considerablemente el conjunto de entrenamiento, en algunos casos en más de 140 patrones, pues al incluir más espectros y de más subtipos diferentes la red es capaz de una mejor generalización, logrando incrementar su rendimiento considerablemente (en más del 20% de tasa de acierto de los espectros de prueba). Sin embargo, en el resto de tipos espectrales (B, A, M) la capacidad de la red para predecir el subtipo disminuye, pues son estos en los que concurren las circunstancias de ser al mismo tiempo los que menos aumentan su conjunto de entrenamiento (20 espectros en el mejor de los casos), y los más afectados por los índices de clasificación que no pueden estimarse por encontrarse fuera del rango espectral del catálogo secundario (4100-6800 Å), es decir, fundamentalmente algunas líneas importantes de absorción de hidrógeno y helio alrededor de 4000 Å y algunas bandas tardías de óxido de titanio.

Red Subtipo	Entrenamiento (Nº espectros)	Validación (Nº espectros)	Prueba (Nº espectros)	Nº Ciclos	MSE Final	Tasa acierto
B	43	7	20	5000	0.0020	70%
A	31	4	14	8500	0.0393	57.14%
F	224	27	19	12000	0.0481	84.21%
G	170	21	19	9500	0.0412	89.47%
K	91	10	14	7000	0.0331	85.71%
M	27	3	14	5500	0.0034	64.28%
TOTAL	586	72	100	-	-	**76%**

Tabla 23. Resultados de las redes *backpropagation momentum* óptimas para la clasificación en subtipo espectral añadiendo al conjunto de entrenamiento los espectros procedentes del catálogo secundario [Prugniel 2001]

Después de haber efectuado el estudio completo de las redes MLP para clasificar espectros estelares según su tipo espectral, se procedió a construir redes para tratar la otra dimensión del sistema de clasificación MK, es decir, el nivel de luminosidad de las estrellas. En el proceso de desarrollo de este tipo de redes se han tenido en cuenta las conclusiones provenientes de la etapa previa de diseño de redes para el tipo/subtipo espectral. De este modo, se construyeron redes para clasificar la luminosidad tanto de forma independiente como estimando previamente el tipo espectral (alternativas que ya se contemplaron en el desarrollo del sistema experto de clasificación) aplicando nuevamente el algoritmo de

aprendizaje *backpropagation momentum*, aunque esta vez sobre una topología 25x10x10x5 que es la que obtuvo un comportamiento más eficaz durante el entrenamiento.

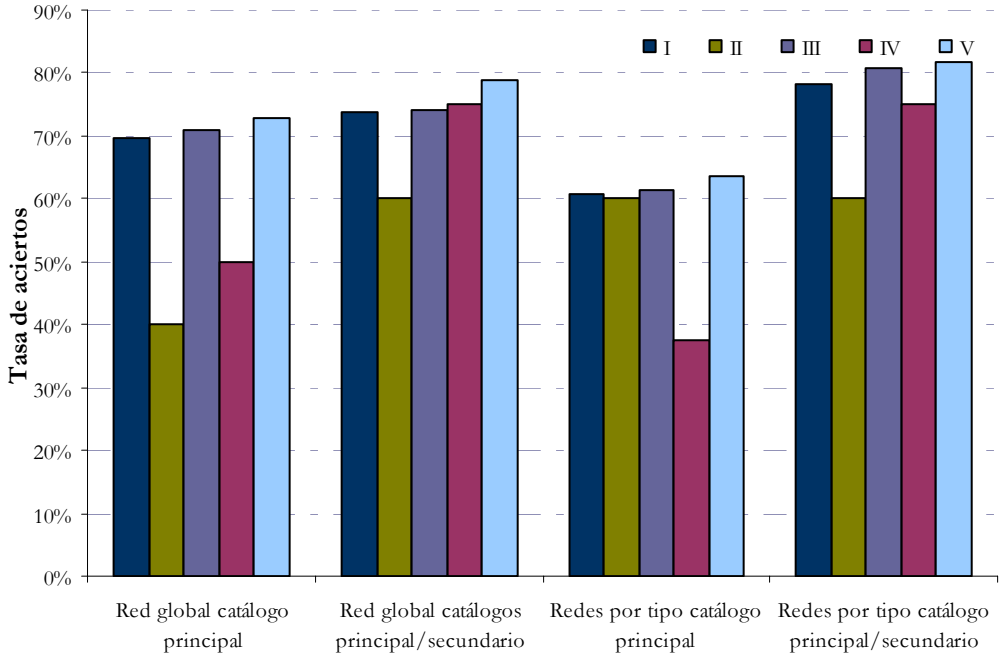


Figura 61. Rendimiento comparado de las distintas redes *backpropagation* diseñadas para obtener la luminosidad MK de las estrellas

En la tabla 24 se muestran las características y los resultados alcanzados por la red diseñada para determinar el nivel de luminosidad de forma global, sin conocer previamente el tipo espectral al que pertenece cada estrella. En la tabla 25, en cambio, se recoge el rendimiento de las redes diseñadas para establecer la clase de luminosidad para cada tipo espectral. El análisis de los resultados de ambas aproximaciones sobre el conjunto de prueba descrito muestra que la primera alternativa obtiene un rendimiento más elevado: las redes por tipo son capaces de clasificar correctamente la luminosidad de las estrellas en el 60% de los casos de prueba presentados, con un error medio de 0.46 clases de luminosidad, mientras que la red global de luminosidad obtiene un rendimiento del 68% con error medio de 0.37 clases; aun cuando sería esperable que ocurriera exactamente lo contrario, puesto que muchos de los índices espectrales utilizados en la clasificación afectan por igual a la temperatura (tipo espectral) y a la luminosidad de la estrella, esta peculiaridad puede atribuirse al número reducido de espectros disponibles para el entrenamiento de la red para cada tipo espectral y clase de luminosidad concreta, que no es suficiente para posibilitar que las redes perciban las diferencias intrínsecas de los distintos espectros y puedan generalizar apropiadamente ante entradas desconocidas. Es también preciso señalar que la mayor parte de los índices de clasificación considerados son específicos de la clasificación en temperatura, y

por ello es posible que no se hayan incluido características espectrales que a priori podrían resultar más adecuadas para determinar la luminosidad.

Tal y como ocurrió en el caso de la determinación del subtipo espectral, es previsible que los resultados obtenidos mejoren ampliando el conjunto de patrones de entrada, por lo que se optó aquí también por emprender un nuevo proceso de entrenamiento incluyendo los espectros del segundo catálogo de referencia. Estas redes ampliadas han conseguido discriminar la luminosidad con una tasa de acierto mayor, en torno al 77%, con respecto a la que se alcanzó entrenándolas únicamente con los espectros de los catálogos principales. Este incremento en el rendimiento se debe en gran medida al aumento del número de patrones utilizados en esta clasificación y a la composición de los conjuntos de entrenamiento, pues el catálogo secundario aporta gran cantidad de espectros de luminosidades III, IV y V, cubriendo algunas de las carencias más importantes de los catálogos utilizados en el primer diseño. En la figura 61 se muestran las gráficas comparativas del rendimiento de las redes diseñadas con ambos conjuntos de espectros, desglosado por nivel de luminosidad.

Luminosidad MK	Entrenamiento (Nº espectros)	Validación (Nº espectros)	Prueba (Nº espectros)	Tasa acierto
I	30	6	23	69.56%
II	10	1	5	40%
III	40	7	31	70.96%
IV	11	2	8	50%
V	43	8	33	72.72%
TOTAL	134	24	100	**68%**

Tabla 24. Resultados de la red global para la clasificación en luminosidad, sin conocer previamente el tipo espectral

Red según tipo MK	Entrenamiento (Nº espectros)	Validación (Nº espectros)	Prueba (Nº espectros)	Tasa acierto
B	25	5	20	60%
A	20	3	14	57.14%
F	24	5	19	57.89%
G	25	5	19	63.15%
K	20	3	14	64.28%
M	20	3	14	57.14%
TOTAL	134	24	100	**60%**

Tabla 25. Resultados de las redes para la clasificación en luminosidad, conociendo previamente el tipo espectral

El análisis del proceso de diseño y evaluación de diferentes redes MLP entrenadas con las distintas variantes del algoritmo de retropropagación del error, cuyos detalles se han referido en esta sección, señala la adecuación de esta técnica de Inteligencia Artificial al problema que nos ocupa, i. e. la clasificación MK de las estrellas. Las redes neuronales con unas características óptimas, en cuanto a topología y a configuración del proceso de aprendizaje (versión del algoritmo *backpropagation*, funciones de actualización de pesos, valores de los parámetros libres, tipo de patrones de entrada, ciclos de entrenamiento, frecuencia de validación, etc.), han sido capaces de obtener el tipo espectral con una tasa de acierto superior al 90% y de estimar la luminosidad apropiadamente en más del 75% de los espectros del conjunto de evaluación.

4.5.3 RBF

El cálculo de composiciones químicas o abundancias de los espectros estelares, y por extensión su clasificación en el sistema MK, se podría considerar como un problema de aproximación no lineal en el cual se dispone de datos afectados de ruido, produciéndose incluso en algunas ocasiones la ausencia de datos en la serie. La aproximación clásica, más común, consiste en realizar una regresión funcional y para ello, como es conocido, es necesario suponer una función determinada que exprese de la mejor forma la relación entre las variables dependientes e independientes. En el caso de las redes de neuronas RBF, no será preciso realizar ninguna suposición acerca de las funciones que relacionan las salidas con las entradas, ya que la idea básica es centrar funciones de base radial alrededor de los datos que se desea aproximar.

Las funciones de base radial emergieron a finales de los años 80 como una alternativa a las redes de neuronas artificiales basadas en el perceptrón multicapa [Broomhead 1988], sin embargo sus raíces entroncan con otras técnicas de reconocimiento de patrones mucho más antiguas como son la interpolación *spline,* la aproximación funcional, las funciones potenciales o las técnicas de agrupamiento [Tou 1974]. Estas funciones son simplemente una clase específica de funciones matemáticas que, en principio, podrían emplearse en cualquier tipo de modelo (lineal o no lineal) y en cualquier clase de red neuronal (única capa o multicapa). No obstante, desde sus orígenes las redes RBF se han asociado tradicionalmente con funciones radiales en una red de una única capa oculta, como la que se muestra en la figura 62.

A diferencia de las redes MLP, la arquitectura clásica de las redes RBF se basa en un modelo *feedforward* (conexiones hacia delante) compuesto estrictamente por tres capas: una capa de entrada con n neuronas, una única capa oculta con k elementos de procesado y una capa de salida constituida por neuronas. Como es habitual, las neuronas de entrada sim-

plemente envían la información del exterior hacia las neuronas de la capa oculta, las cuales disponen de funciones de activación radiales de carácter no lineal (generalmente gaussianas, en contraste con las funciones de tipo sigmoidal utilizadas frecuentemente en las redes *backpropagation*) que aplican a la distancia que separa el vector de entradas y el vector de pesos que cada una de ellas almacena, denominado centroide o centro gravitacional; las neuronas de la capa de salida computan la suma ponderada de las salidas de las neuronas de la capa intermedia combinadas linealmente con los pesos sinápticos de las conexiones entre ambas capas. Esta última característica convierte a las redes neuronales RBF en un modelo híbrido, pues combinan el aprendizaje no supervisado para las unidades ocultas con el aprendizaje supervisado en la capa de salida.

El principio de las funciones de base radial procede de la teoría de la aproximación funcional. Dados los vectores de entradas y salidas esperadas {x, y}, se trata de buscar una función específica f(x) tal que:

$$y \cong f(x) = \sum_{i=1}^{k} w_i \, h(|x - t_i|),$$

donde x es el vector de valores de entrada; w_i los coeficientes de los pesos sinápticos de las conexiones entre las neuronas de la capa oculta y la de salida; t_i se corresponde con los k centroides que deben ser seleccionados; y finalmente h será la función de base radial (generalmente de tipo gaussiano) que se aplica a la distancia euclídea entre cada centroide, t_i, y el argumento de entrada proporcionado, x_i. El simulador utilizado en este desarrollo, SNNS v4.3, implementa una función de activación de tipo radial denominada *Act_RBF_Gaussian*, la cual puede expresarse matemáticamente como:

$$h(r, p) = e^{-p r^2}, \quad r = |x - t|,$$

donde r será la distancia entre el vector de entradas y el centroide de cada neurona, y p un argumento adicional que representa el *bias* de las neuronas de la capa oculta. Cuando el vector de entradas se sitúa en una región espacial próxima al centroide de una neurona determinada j, esta se activará señalando así que reconoce el patrón de entrada; si el vector de entradas coincide completamente con su centroide, $x = t_i$, la función responderá con salida máxima (1), en cambio si este es muy diferente su respuesta tenderá a 0 [SNNS 2010b].

La diferencia fundamental entre las redes RBF y el modelo *backpropagation*, descrito en la sección anterior, estriba en la respuesta de las neuronas ocultas: en las redes entrenadas con algoritmos de aprendizaje basados en retropropagación del error, las unidades de las capas ocultas presentan una respuesta de rango infinito, puesto que cualquier vector de entradas puede causar la activación neuronal independientemente del espacio de entrada

del que proceda; en cambio, en las redes RBF las neuronas de la capa intermedia son de respuesta localizada, ya que solamente responden con intensidad apreciable cuando el vector de entradas y el vector de pesos local (centroide) pertenecen a una zona próxima en el espacio de entradas [Martín del Brío 2006].

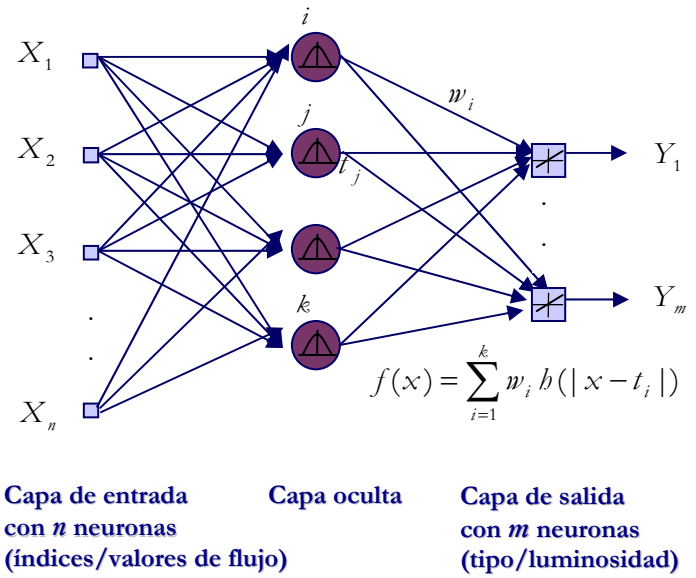


Figura 62. Arquitectura clásica de las redes neuronales basadas en funciones de base radial (RBF)

Las excelentes capacidades de aproximación no lineal de las redes RBF [Poggio 1990] [Park 1991], las convierte en una técnica muy útil y sencilla para modelizar emparejamientos o relaciones complejas que las redes neuronales de tipo MLP solamente podrían emular por medio de múltiples capas intermedias [Haykin 2008]. Asimismo, el mayor inconveniente de este modelo es el crecimiento del número de neuronas en función de la dimensión del espacio de entrada, por lo que no se emplea habitualmente este paradigma neuronal en aplicaciones que impliquen un elevado volumen de patrones de entrada, si bien se las reconoce como un tipo de redes con una alta eficiencia en la etapa de entrenamiento. Así, durante los últimos años las redes RBF se han aplicado con éxito en una gran diversidad de campos incluyendo modelización de series temporales caóticas [Moody 1989] [Casdagli 1989] [Leung 2001] [Rojas 2002], ingeniería de control [Sanner 1992], ecualización de canales [Chen 1991] [Bors 1994], interpolación [Bromhead 1988], restauración de imágenes [Cha 1996], reconocimiento de voz [Niranjan 1990] [Bors 1994], modelado de objetos 3-D [Matej 1996], estimación del movimiento de objetos [Bors 1998], fusión de datos [Chatzis 1999], etc.

La etapa de entrenamiento de las redes de neuronas artificiales que emplean funciones de base radial consiste en la estimación, a partir de los patrones de entrada y del vector

de salidas esperadas, tanto de los centroides de las unidades de la capa oculta como de los parámetros de las funciones de activación (amplitud y varianza si se trata de funciones gaussianas) [Howlet 2001]. El simulador SNNS proporciona una función de aprendizaje, *RadialBasisLearning*, que permite llevar a cabo de forma sencilla el entrenamiento de redes RBF, tratando de minimizar la función de error E mediante el método del descenso del gradiente. De esta forma, las variaciones dependientes de la corrección del error serían:

$$E[f(x)] = \sum_i (y_i - f(x_i))^2 + \lambda \mid P_f \mid^2$$

$$\Delta t_j = -\eta_1 \frac{\partial E}{\partial t_j}$$

$$\Delta p_j = -\eta_2 \frac{\partial E}{\partial p_j}$$

$$\Delta w_{jk} = -\eta_3 \frac{\partial E}{\partial w_{jk}},$$

donde el primer factor de la función de error, es decir el sumatorio, es la condición que minimiza el error total de la aproximación obtenida mediante la función f(x), mientras que la segunda parte de la ecuación es un estabilizador que fuerza a la función a converger lo más suavemente posible (la influencia de dicho estabilizador viene determinada por el factor λ); η_1 es la velocidad de aprendizaje para la modificación de los centroides t_i; η_2 se corresponde con la velocidad de aprendizaje para los *bias* de las neuronas de la capa oculta; y η_3 hace referencia a la velocidad de aprendizaje para los pesos de los enlaces entre las neuronas de la capa oculta y las de salida. En las neuronas de la capa de salida se ha empleado la misma función de activación que la seleccionada en el caso de las redes *backpropagation* anteriores, es decir *Act_Logistic*, la cual aplica una función sigmoidal característica a la suma de pesos sinápticos.

Antes de comenzar el proceso de entrenamiento de una red RBF será necesario llevar a cabo la inicialización de la misma, es decir, la asignación de un valor inicial a los pesos sinápticos y a los parámetros del algoritmo de aprendizaje seleccionado. La dificultad en este tipo de redes reside fundamentalmente en la estimación de los centroides y de los *bias* (parámetro p) de las unidades de procesamiento de la capa oculta, ya que estos deben establecerse correctamente para garantizar una generalización óptima.

En la mayoría de las redes RBF diseñadas para la clasificación estelar se ha utilizado la función de inicialización *RBF_Weights* implementada en el simulador SNNS, la cual escoge los centroides o centros de las funciones radiales (t_i) a partir de los patrones de entrenamiento proporcionados, asignándolos a los enlaces entre la capa de entrada y la capa oculta; posteriormente se inicializan también los *bias* de todas las neuronas (p_i) de la capa oculta adjudicándoles un valor seleccionado por el usuario y, finalmente, se computan los pesos

de los enlaces entre la capa oculta y la de salida. Es preciso indicar aquí que puesto que se está buscando una función f(x) que sea capaz de aproximar los patrones de entrada del conjunto de entrenamiento minimizando al mismo tiempo la función de error E, se puede emplear la matriz inversa de Moore Penrose [SNNS 2010b] para seleccionar los centroides mediante el criterio expuesto, ya que esta facilita un conjunto de coeficientes w_{jk} con los que es posible inicializar adecuadamente la red. En algunas de las redes RBF implementadas se ha aplicado otra función de inicialización, *RBF_Weights_Kohonen*, que también estima los centroides en base a los patrones de entrada pero en este caso utilizando el método de autoorganización de los mapas característicos de Kohonen.

Neuronas ocultas	Nº Ciclos	η_1	η_2	η_3	MSE final	Tasa acierto
2	1600	0	0	0.01	0.38931	66%
2	1000	0	0	0.2	0.22036	55%
2	2000	0	0	0.5	0.21859	60%
2	300	0.2	0	0.2	0.09429	77%
4	**200**	**0.2**	**0**	**0.2**	**0.04068**	**95%**
4	1500	0.01	0	0.2	0.00965	95%
6	300	0.2	0	0.2	0.04807	93%
6	500	0.2	0	0.02	0.04508	89%
8	400	0.2	0	0.2	0.04178	89%
8	700	0.2	0	0.02	0.04026	87%

Tabla 26. Rendimiento y evolución del entrenamiento para las redes RBF de tipo espectral diseñadas con las diferentes topologías consideradas

Al igual que en el caso de las redes *backpropagation*, se han diseñado redes RBF para abordar los diferentes niveles de la clasificación de las estrellas en el sistema MK, con el fin de determinar la capacidad de adaptación de este modelo neuronal al problema de clasificación espectral. La primera fase de la experimentación llevada a cabo con este tipo de redes consistió en la clasificación en tipo espectral de los 258 espectros de los catálogos principales de referencia (Silva 1992, Pickles 1998, Jacoby 1984) a partir de los 25 índices espectrales seleccionados previamente, normalizados con los dos métodos de ajuste implementados (véase sección 4.2 para más detalles). La distribución espectral de los conjuntos de entrenamiento, validación y prueba es la que se incluye en la tabla 15, ya empleada en el proceso de aprendizaje e implementación de las redes MLP anteriores. De esta forma, las redes RBF diseñadas constarán de una capa de entrada de 25 neuronas (una por cada parámetro de clasificación), una única capa oculta y una capa de salida con seis neuronas (una por cada tipo espectral considerado: B, A, F, G, K, M). Atendiendo de nuevo a la estrategia de simplificación de la estructura de la red, se han considerado las configuraciones neuronales 25x2x6, 25x4x6, 25x6x6 y 25x8x6, cuyo análisis comparativo se muestra en tabla 26, en la

que se recogen los resultados de evaluar el rendimiento de las redes diseñadas con las citadas topologías sobre el conjunto de 100 espectros de prueba. Asimismo se incluye también en dicha tabla tanto la evolución del entrenamiento llevado a cabo sobre cada una de las redes RBF, como el valor asignado en cada caso a los distintos parámetros de la función de aprendizaje. Tal y como puede apreciarse, no será necesario definir una capa oculta con un número muy elevado de neuronas para poder diferenciar adecuadamente entre los distintos tipos de espectros, pues con 4 unidades de procesamiento se obtiene ya un rendimiento satisfactorio (95% de tasa de acierto). La velocidad de aprendizaje para los centroides, η_1, influye significativamente en el número de ciclos necesarios para la convergencia de la red (criterio de MSE por debajo de 0.05), ya que, como era esperable, cuanto mayor sea el valor de este parámetro menor número de ciclos necesitará la red para completar el entrenamiento, aunque su rendimiento final no se vea afectado significativamente.

Una vez establecida la topología y características de la red RBF óptima para la clasificación en tipo espectral (resaltada en negrita en la tabla anterior) se llevó a cabo un nuevo proceso de entrenamiento de la misma en el que se varió la frecuencia de validación (de 0 a 100 ciclos), aplicando las dos funciones de inicialización seleccionadas (*RBF_Weights* y *RBF_Weights_Kohonen*) y los dos tipos de normalización de los patrones de entrada (sigmoidal global y sigmoidal contextualizada). En la evaluación del rendimiento de cada una de estas variantes consideradas, se observó que en las redes que se entrenaron con validación cruzada utilizando normalización contextualizada se alcanzaron tasas de acierto más elevadas que en las mismas redes entrenadas prescindiendo del conjunto de validación y normalizando las entradas mediante una función sigmoidal global; asimismo se constató que, por el contrario, la función de inicialización no tiene una influencia realmente significativa en la capacidad final de generalización de la red.

Después del estudio de las diferentes alternativas de diseño posibles, se optó por la implementación de una red RBF final para obtener el tipo espectral MK con una topología 25x4x6 y unos valores de las velocidades de aprendizaje de $\eta_1 = 0.2$, $\eta_2 = 0$ y $\eta_3 = 0.2$; la normalización de las entradas de esta red se efectuará mediante una función sigmoidal contextualizada para cada parámetro de clasificación, empleando la estrategia de validación cruzada cada 30 ciclos de entrenamiento y la función de inicialización más sencilla, i. e. *RBF_Weights*. En la tabla 27 se muestran los resultados obtenidos con esta configuración final especificados por tipo espectral. Como puede apreciarse, la red RBF de clasificación implementada otorga un tipo espectral consistente con el especificado en el catálogo a 95 de los 100 espectros que forman el conjunto de prueba (con un error medio de 0.08 tipos), considerando de nuevo una holgura de un subtipo espectral en la clasificación para minimizar los efectos de los supuestos fallos ocurridos en subtipos limítrofes entre tipos; a semejanza de lo que ya ocurría en las redes *backpropagation*, en este caso los errores se concentran

también en los tipos intermedios (A, F y G principalmente), pues es donde se produce el ya mencionado problema de degeneración entre la temperatura superficial y la metalicidad de los espectros.

Tipo espectral MK	Entrenamiento (Nº espectros)	Validación (Nº espectros)	Prueba (Nº espectros)	Tasa acierto
B	25	5	20	100%
A	20	3	14	92.85%
F	24	5	19	89.47%
G	25	5	19	94.73%
K	20	3	14	92.85%
M	20	3	14	100%
TOTAL	134	24	100	**95%**

Tabla 27. Resultados de la red RBF óptima de clasificación en tipo espectral MK para los espectros de los catálogos principales de referencia

Al igual que en el diseño de redes MLP se contempló también en este caso la posibilidad de efectuar la clasificación MK por niveles, para lo cual se construyeron redes RBF que obtienen inicialmente una clasificación general en temperatura (dividiendo las estrellas en tempranas, intermedias y tardías), para seguidamente discriminar por separado y en un segundo nivel entre los tipos B-A, F-G y K-M. En el entrenamiento de estas nuevas redes se siguieron pautas similares a las de la clasificación basada en una única red global, es decir, se aplicó de nuevo la función de aprendizaje *RadialBasisLearning*, utilizando asimismo la estrategia basada en la validación cruzada en el entrenamiento, la normalización contextualizada, la función de inicialización *RBF_Weights*, etc.

En la tabla 28 se muestran las peculiaridades del proceso de entrenamiento y el rendimiento alcanzado por las redes RBF diseñadas para obtener la clasificación general en temperatura, esto es, la diferenciación entre estrellas tempranas (B-A), intermedias (F-G) y tardías (K-M). Se observa en este caso que, aunque los resultados no son desfavorables (93% de tasa de acierto para 15 neuronas), es necesario incluir más neuronas en la capa oculta que en las anteriores clasificaciones. Durante el proceso de entrenamiento se ha disminuido la velocidad de aprendizaje para los pesos entre las capas oculta y de salida, lo cual si bien ha producido un incremento en el número de ciclos necesarios hasta alcanzar la convergencia, ha logrado también mejorar el rendimiento de la red hasta en un 3% en algunos casos, como por ejemplo en el diseño con 15 neuronas en la capa oculta.

Las redes diseñadas para abordar el segundo nivel de clasificación, aquellas capaces de determinar el tipo espectral en cada uno de los diferentes grupos espectrales (B-A, F-G y K-M), se construyeron con la misma topología que la empleada en la red global de clasifi-

cación en tipo espectral, es decir, considerando 4 elementos de procesamiento en la capa oculta; siguiendo un proceso de entrenamiento similar, se alcanzaron unos resultados satisfactorios, aunque se produjo una mengua en el rendimiento para los tipos tempranos y tardíos (alrededor del 3% en ambos casos) con respecto a la red RBF diseñada para la determinación directa del tipo espectral.

Neuronas ocultas	Nº Ciclos	η_1	η_2	η_3	MSE final	Tasa acierto
4	10100	0.01	0	0.02	0.07778	85%
6	7000	0.01	0	0.02	0.06019	89%
12	3600	0.01	0	0.2	0.04674	90%
12	20000	0.01	0	0.01	0.04994	90%
15	12500	0.01	0	0.01	0.03863	**93%**
15	10000	0.01	0	0.2	0.03604	90%

Tabla 28. Evolución del entrenamiento de las distintas topologías de redes RBF consideradas para la clasificación global en temperatura

En la figura 63 se muestran en azul los resultados obtenidos utilizando las dos alternativas de clasificación mencionadas, esto es, la red en dos niveles y la red global. Se incluye también en este gráfico el rendimiento de las redes de clasificación en niveles adaptadas para aceptar como entrada las zonas espectrales de interés para cada grupo espectral (3900-4900 Å para las estrellas tempranas, 3900-5500 Å para las intermedias y 4800-7200 Å para las tardías). Esta última configuración de redes RBF solamente ha sido capaz de clasificar de forma correcta aproximadamente el 70% de los espectros del conjunto de prueba (70.58% para el grupo B-A, 68.42% para el F-G y 67.85% para las estrellas K-M), lo que refleja un comportamiento poco apropiado si se compara con los resultados obtenidos empleando las redes basadas en parámetros espectrales, con una tasa de acierto en torno al 93%. Este descenso en el rendimiento de la red podría subsanarse ampliando el conjunto de entrenamiento, puesto que al aumentar drásticamente el número de neuronas de la capa de entrada (de 25 a 480 neuronas en algunos casos) el tamaño reducido de este (134 espectros) es insuficiente para posibilitar la generalización adecuada de la red.

Por lo tanto, con el objetivo de optimizar el rendimiento de las redes RBF diseñadas, a partir de este punto los niveles de clasificación restantes se han abordado añadiendo al anterior conjunto de entrenamiento los 500 espectros procedentes del catálogo secundario de referencia (Prugniel 2001). Con este nuevo conjunto de patrones, cuya distribución en los tres subconjuntos específicos es la que se incluyó ya en la tabla 23, se han diseñado varias redes RBF para clasificar cada pareja de tipos espectrales (B-A, F-G y K-M), con una estructura y topología similares a las de las redes que obtuvieron unos resultados óptimos en las respectivas clasificaciones mencionadas incluyendo únicamente el conjunto de espectros del catálogo principal. Como se ha detallado en el epígrafe precedente, la capa de en-

trada de estas redes RBF ampliadas estará formada únicamente por los 16 parámetros espectrales presentes en el rango espectral que cubre el catálogo secundario (4100-6800 Å); además, en algunos casos se ha variado también la composición de la capa oculta a causa del aumento del número y distribución de los espectros en algunos grupos, como por ejemplo en los tipos espectrales intermedios F y G en los que se han considerado topologías con 10, 20 y 30 neuronas ocultas.

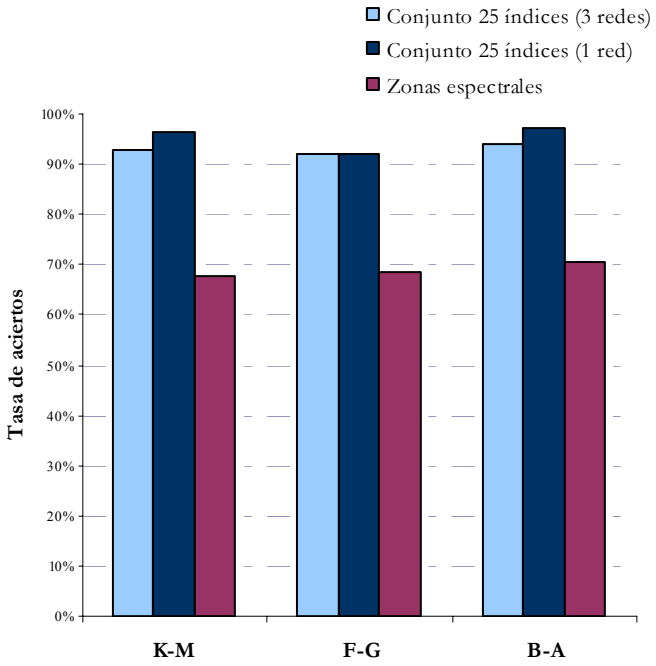


Figura 63. Rendimiento de las redes RBF diseñadas para aceptar distintos tipos de patrones de entrada

En la figura 64 se adjunta un gráfico comparativo de la clasificación de los distintos grupos espectrales utilizando por un lado todo el rango espectral (3510-7427 Å) que se corresponde con los 25 índices resultantes de la selección llevada a cabo mediante el análisis de sensibilidad previo (v. sec. 4.3) y, por otro, los 16 índices ubicados en el rango espectral disponible para la base de datos de referencia secundaria. El análisis de los resultados señala que ambas redes se adaptan convenientemente al proceso de clasificación de parejas de tipos espectrales, alcanzándose en el peor de los casos una tasa de acierto de alrededor de un 90%, con un error medio de 0.16 tipos.

El siguiente paso en la experimentación con redes RBF consistió en aplicar de nuevo el algoritmo de aprendizaje *RadialBasisLearning* con el objetivo de conseguir una clasificación en subtipo espectral para cada uno de los tipos espectrales discriminados en el nivel anterior. Se realizaron de nuevo pruebas con diversas estructuras, primeramente con la topología que obtuvo los mejores resultados en la etapa previa (15 neuronas en la capa

oculta), y más tarde aumentando el número de neuronas de la capa intermedia para comprobar si este factor tenía una influencia directa en el rendimiento final de la red. La topología para la que se alcanza un rendimiento óptimo es la constituida por una red para cada tipo espectral con 16 neuronas en la capa de entrada (correspondientes al conjunto reducido de índices espectrales), 25 neuronas en la capa oculta y una capa de salida con 10 neuronas que permite determinar el subtipo espectral correspondiente (0-9).

Red Subtipo	Entrenamiento (Nº espectros)	Validación (Nº espectros)	Prueba (Nº espectros)	Nº Ciclos	MSE Final	Tasa acierto
B	43	7	20	8000	0.0456	75.00%
A	31	4	14	9500	0.0325	57.14%
F	224	27	19	18000	0.0497	78.94%
G	170	21	19	16500	0.0324	89.47%
K	91	10	14	12500	0.0361	78.57%
M	27	3	14	6500	0.0447	64.28%
TOTAL	586	72	100	-	-	**75.00%**

Tabla 29. Características del entrenamiento y resultados de las redes RBF óptimas de subtipo espectral

En la tabla 29 se incluyen las peculiaridades del entrenamiento y los resultados alcanzados al evaluar las redes diseñadas sobre el conjunto de espectros de prueba. Tal y como se indica, estas redes RBF construidas para clasificar en subtipo espectral y entrenadas con los conjuntos de espectros que se especifican, consiguieron determinar de forma congruente el subtipo espectral del 75% de los espectros de prueba, con un error medio de 0.37 subtipos. Como ya ocurría para las redes *backpropagation*, la tasa de aciertos disminuye para aquellos tipos espectrales en los que se dispone de menos espectros de entrenamiento, en concreto los tipos A, K y M; en el análisis de resultados se ha seguido nuevamente el criterio de considerar una holgura de $\pm$ 1 subtipo para suavizar el efecto de los errores producidos en los bordes, es decir, en los subtipos límite entre tipos espectrales contiguos.

Para clasificar la luminosidad de las estrellas utilizando el enfoque basado en funciones de base radial, se tuvieron en cuenta de nuevo las dos alternativas expuestas en el caso del algoritmo *backpropagation*, por lo que se construyeron redes para obtener la luminosidad tanto de forma independiente como determinando el tipo espectral como paso previo, las cuales fueron capaces de discriminar el nivel de luminosidad del 73% (con un error medio de 0.36 clases) y del 75% (con un error medio de 0.37 clases) de los espectros del conjunto de prueba, respectivamente. La segunda opción es, por tanto, la que obtiene unos resultados óptimos, debido fundamentalmente a que la mayor parte de los índices espectrales seleccionados para la clasificación afectan de igual forma a la temperatura y a la luminosidad estelares, con lo que la estimación previa del tipo espectral implica una mayor resolución en la determinación posterior del nivel de luminosidad de la estrella.

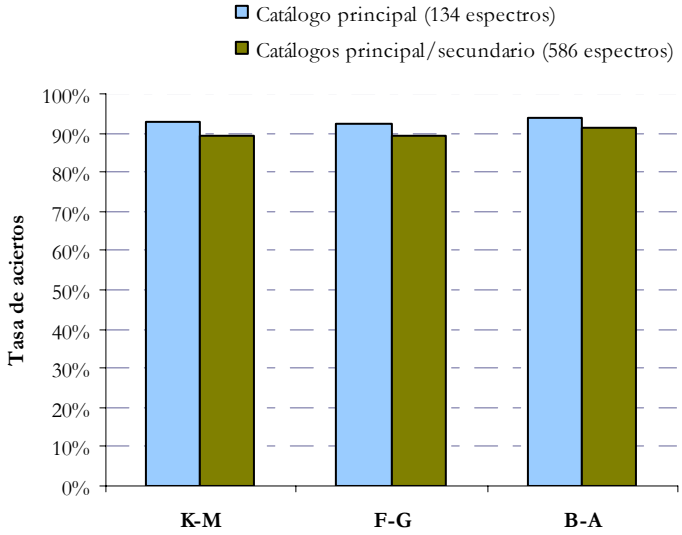


Figura 64. Rendimiento de las redes RBF de grupos espectrales entrenadas con el catálogo principal y añadiendo los espectros del catálogo secundario

En la figura 65 se muestra un cuadro comparativo del rendimiento de ambas alternativas de diseño desglosado por nivel de luminosidad; como puede observarse, en las clases I, III y V es donde se consigue una tasa de aciertos más elevada, pues son estas también las que se completaron con un mayor número de espectros al incorporar la base de datos espectrales del catálogo secundario de referencia.

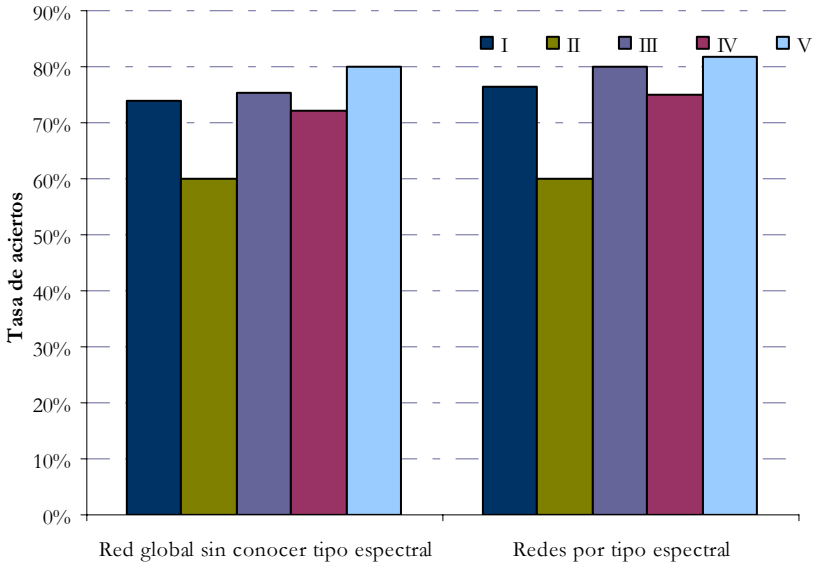


Figura 65. Rendimiento comparado de las dos redes RBF diseñadas para obtener la luminosidad MK de las estrellas

El estudio detallado de las posibilidades de las redes neuronales basadas en funciones radiales como técnica de clasificación espectral que se ha llevado a cabo en esta sección,

permite concluir que constituyen estas un método idóneo para determinar la temperatura y la luminosidad de las estrellas, ya que las redes con una configuración óptima han alcanzado unas tasas de acierto superiores al 90% para el tipo espectral y en torno al 75% para la clase de luminosidad, rendimientos ambos comparables a los obtenidos en la fase previa mediante redes MLP entrenadas con el algoritmo de aprendizaje *backpropagation*.

4.5.4 Kohonen

La teoría clásica de redes de neuronas artificiales, como ya se expuso al inicio de este capítulo, clasifica estas en dos grupos principales: redes con aprendizaje supervisado, a las que pertenecerían las redes MLP analizadas, y redes que hacen uso de algoritmos de aprendizaje que no necesitan de supervisión o control externo, es decir, suponen que no existe o no está disponible un instructor externo que sea capaz de decidir cuando se detiene el entrenamiento, tal y como ocurría en las redes *backpropagation* donde la diferencia entre la salida esperada (facilitada a la red como entrada adicional) y la obtenida realmente por esta proporcionaba la condición de finalización del proceso. Dentro de esta última clase de redes neuronales destacan los mapas de Kohonen o redes SOM (*Self-Organizing Maps*, mapas autoorganizados) [Kohonen 2001], ya que son las redes con aprendizaje no supervisado que se han aplicado con mayor frecuencia durante los últimos años en problemas de reconocimiento de patrones y, sobre todo, de agrupamiento de datos o análisis *cluster* [Kohonen 1996] [Estévez 1998] [Oja 1999] [Vesanto 1999] [Foody 1999] [Owens 2000] [Hewitson 2002] [Nikkilä 2002].

El interés por descubrir y entender la organización del cerebro llevó al investigador finlandés T. Kohonen a desarrollar muchas de las ideas que le conducirían a formular la teoría de las redes neuronales que llevan su nombre [Kohonen 1982], caracterizadas principalmente por su probada capacidad para organizar topológicamente las entradas. Aunque la corteza cerebral observada microscópicamente es sumamente compleja, a escala macroscópica presenta una estructura uniforme pues los centros neuronales dedicados a actividades tan diferentes como la visión, el pensamiento o la función motora yacen en zonas concretas de la misma (cada una con una organización lógica de su funcionalidad), ubicadas de una manera determinada con respecto a las demás. Los mapas somatotópico (representado por el conocido homúnculo) o el tonotópico de las regiones encargadas de la función auditiva ilustran claramente esta organización cerebral, en la que las neuronas próximas espacialmente entre sí responden a estímulos similares; por ejemplo, en el caso de la audición estas células se activarán ante frecuencias de sonido semejantes en una secuencia ordenada desde los tonos más elevados a los más bajos.

Los mapas autoorganizados de Kohonen constituyen en sí mismos una clase única de redes de neuronas artificiales con aprendizaje no supervisado ya que, a semejanza de la organización cerebral descrita, construyen mapas formados por neuronas competitivas que almacenan información semántica y que son capaces de preservar la topología inherente a los patrones de entrenamiento; es decir, estas redes tratan de establecer una correspondencia entre los datos de entrada y un espacio bidimensional de unidades competitivas creando mapas topológicos de dos dimensiones, de tal forma que ante datos de entrada con características similares se deberían activar neuronas situadas en zonas del mapa físicamente próximas. El objetivo principal de este tipo de redes, y por tanto su campo más idóneo de aplicación, será la clasificación de los datos de entrada en grupos de características similares.

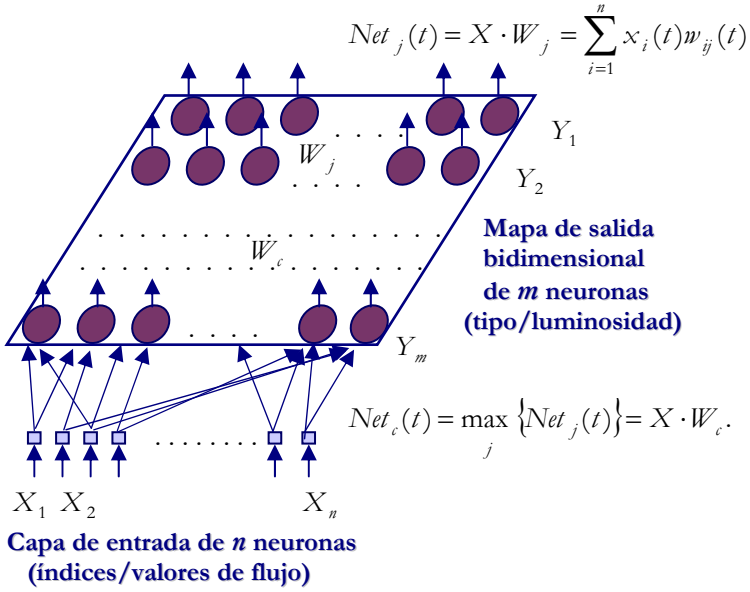


Figura 66. Arquitectura clásica de las redes de Kohonen

La arquitectura característica que presentan las redes de Kohonen está constituida por una capa unidimensional de entrada, que consta de n nodos conectados a través de conexiones *feedforward* a los m nodos o neuronas de la capa de salida bidimensional, organizada esta a modo de rejilla 2D de unidades neuronales competitivas que, aunque no están conectadas entre sí, ejercen cierta influencia sobre sus neuronas vecinas; así la activación de una neurona del mapa repercute sobre las neuronas cercanas topológicamente con un refuerzo positivo que va decreciendo, a medida que aumenta la distancia entre ellas, hasta hacerse negativo, para volver de nuevo a tener una leve influencia positiva sobre las más alejadas. En la figura 66 se muestra la arquitectura general de las redes de Kohonen.

El algoritmo de aprendizaje para los mapas autoorganizados, de tipo no supervisado y competitivo, implica dos etapas importantes y bien diferenciadas: el agrupamiento de

los datos de entrada y la ordenación espacial del mapa, de forma que patrones de entrada similares tiendan a producir una respuesta en neuronas que se sitúan en zonas próximas entre sí en la rejilla de unidades competitivas.

En el proceso de entrenamiento de la red, los vectores de patrones de entrada se presentan a todas las unidades competitivas en paralelo, sin incluir en ellos la salida esperada, y serán las propias neuronas de salida las que compitan entre sí por activarse, de modo que la unidad que mejor empareje cada entrada se erigirá en vencedora y, consecuentemente, se activará, ajustándose las conexiones entre neuronas en función de la misma. Para evaluar la medida de similitud/disimilitud entre el vector de pesos que mantiene cada unidad de la capa competitiva (W_j, que después del entrenamiento se asemeja a un patrón de entrada distinto) y los datos de entrada, se pueden emplear distintas métricas como por ejemplo el producto interno, la distancia euclídea o la distancia de Mahalanobis. La ordenación topológica del mapa se realiza posteriormente utilizando una relación de vecindad espacial entre las unidades competitivas durante el aprendizaje, es decir, tanto el vector ganador que ha obtenido los mejores resultados (con pesos W_c) como su vecindad N_c, definida como el conjunto de unidades situadas a un radio r de la neurona ganadora, adaptarán sus conexiones en la forma:

$$\Delta w_{ij}(t) = e_j(t) \cdot \left(x_i(t) - w_{ij}(t)\right) \qquad \text{si } j \in N_c$$

$$\Delta w_{ij}(t) = 0 \qquad \text{si } j \notin N_c,$$

$$e_j(t) = h(t) \cdot e^{(-dj/r(t))^2}$$

donde $e_j(t)$ es la función de adaptación, que en el caso de la implementación del algoritmo de Kononen en el simulador SNNS utilizado en este desarrollo (*Kohonen Learning Function*), se corresponde con una función gaussiana, siendo d_j la distancia entre el vector de pesos de cada neurona, W_j y el vector ganador (W_c); h(t), con $0 \leq h(t) \leq 1$, la altura de adaptación o velocidad de aprendizaje en el instante t, y r(t) el radio de la vecindad espacial de la neurona ganadora en el instante t. Estos dos últimos parámetros, la altura y el radio, suelen reducirse progresivamente a medida que avanza el entrenamiento con el objetivo de impulsar el proceso de agrupamiento de los datos de entrada [Kohonen 2001].

En las redes SOM que se han diseñado para clasificar los espectros estelares en los distintos grupos de temperatura y luminosidad, se ha empleado la función de inicialización *Kohonen_Weights* proporcionada por el propio simulador, pues inicializa de forma aleatoria los pesos sinápticos con valores entre 0 y 1 para posteriormente normalizar apropiadamente el vector de pesos particular de cada neurona de la capa competitiva. Para llevar a cabo la actualización de los pesos a medida que progresa el entrenamiento se ha seleccionado la

función *Kohonen_Order*, capaz de propagar los pesos respetando la topología del mapa: en primer lugar se calcula la salida de todas las neuronas de la capa de entrada, y seguidamente se computa la activación y la salida de las neuronas del mapa espacial; si bien como se ha visto, y a diferencia de lo que ocurría en los algoritmos analizados hasta el momento, en el algoritmo de aprendizaje de Kohonen no es imprescindible el cómputo de los valores de activación de las neuronas, en este caso se han estimado (utilizando la función de activación *Act_Euclid*) con el propósito de facilitar la visualización y evaluación de los resultados en el simulador.

Tamaño mapa bidimensional	Nº Ciclos	h(0)	r(0)	Tasa acierto
6	500	0.9	1	---
12	1200	0.9	2	---
24	5000	0.9	4	53%
36	8500	0.9	6	57%
60	**12000**	**0.9**	**10**	**59%**

Tabla 30. Evolución del entrenamiento y rendimiento para las redes de Kohonen de tipo espectral con diferentes tamaños del mapa

Con el objetivo de evaluar la potencia de resolución de este algoritmo con respecto a la clasificación bidimensional de las estrellas, se han diseñado mapas autoorganizados tanto para obtener el tipo espectral como la luminosidad estelar. El proceso de diseño de estas redes se inició con la construcción de mapas topológicos capaces de clasificar en temperatura los espectros procedentes de los catálogos principales de referencia (Silva 1992, Pickles 1998, Jacoby 1984), utilizando para ello como entrada los 25 índices espectrales elegidos después del análisis de sensibilidad previo (cuyos detalles se recogen en la sección 4.2). Puesto que no hay supervisión externa, en las redes de Kohonen no tiene sentido la validación durante el entrenamiento, ya que no se le proporciona de ninguna forma a la red la respuesta que se espera obtener con cada patrón de entrada; por ello, el conjunto de entrenamiento formado por los 134 espectros especificados en la tabla 15 se ha completado con los 24 espectros de validación. Así, estas primeras redes SOM estarán formadas por una capa de entrada con 25 neuronas (una por cada parámetro espectral de clasificación) y una capa competitiva en la que se ha variado el número de neuronas encargadas de cada uno de los 6 clústeres o tipos espectrales (B, A, F, G, K, M), considerado finalmente las dimensiones 6, 12, 24, 36 y 60, que se corresponderían con 1, 2, 4, 6 y 10 neuronas por cada grupo, respectivamente. En la tabla 30 se muestran las características del entrenamiento y el análisis del rendimiento para los espectros del conjunto de prueba de las diferentes configuraciones del mapa bidimensional seleccionadas. Como puede observarse, para tamaños del mapa reducidos la red no es capaz de clasificar los espectros: en el primer caso (6 neuronas de salida) solamente reconoce dos categorías (o tipos espectrales) en el conjun-

to de prueba, incluyendo prácticamente todos los espectros dentro del mismo grupo a excepción de algunos muy tardíos que los incluye en otra categoría diferente; para la configuración con 12 neuronas la red no distingue entre las seis clases, sino que agrupa los espectros en tres categorías distintas que podrían corresponderse con estrellas tardías (K-M), intermedias (F-G) y tempranas (B-A), aunque no siempre clasifica los espectros de prueba en la categoría a la que deberían pertenecer. Aun cuando para tamaños del mapa superiores estos resultados mejoran y la red es capaz de dividir los patrones de entrada en seis grupos diferenciados, el rendimiento obtenido (en torno al 60%) está muy por debajo de las tasas de éxito superiores al 90% alcanzadas con los modelos neuronales considerados en las secciones precedentes. Debido a esta desafortunada resolución, no se ha continuado la experimentación con este conjunto de entrenamiento, pues como se ha visto es insuficiente para propiciar una formación adecuada de los clústeres y una correcta generalización de la red. Por ello, a partir de este punto se diseñaron redes SOM en las que, para facilitar el proceso de obtención de categorías, el conjunto de entrenamiento se completó con los 500 espectros del catálogo secundario (Prugniel 2001), y la clasificación se llevó a cabo en niveles de forma separada (global, tipo espectral, subtipo y luminosidad).

De esta forma se construyeron mapas autoorganizados para clasificar primeramente los espectros en las tres categorías globales (estrellas tempranas, intermedias y tardías), obteniéndose unas tasas de acierto aceptables (en torno al 87%) para configuraciones del mapa a partir de 24 neuronas competitivas (8 para cada grupo). A continuación, y en un segundo nivel, se diseñaron redes para diferenciar por separado entre cada pareja de tipos espectrales (B-A, F-G y K-M), en las que a los conjuntos de entrenamiento correspondientes (recogidos en la tabla 23) se les añadió un tipo espectral adicional para facilitar el proceso de agrupamiento de la red; este tipo complementario se eligió de forma que fuese lo más diferente posible de los considerados en cada red individual, es decir, se seleccionó el tipo M para las redes que discriminan entre B y A, y el tipo B para las redes que lo hacen entre los tipos intermedios F y G, y los tipos tardíos K y M. La capa de entrada de estas redes estará ahora formada por 16 neuronas, una por cada uno de los 16 índices espectrales incluidos en el rango 4100 Å a 6800 Å correspondiente al catálogo secundario (normalizados con las dos funciones sigmoidales consideradas), mientras que en la capa competitiva se ha variado el tamaño del mapa desde 3 hasta 36 unidades; el número de ciclos de entrenamiento, el orden de presentación de los patrones de entrada y los valores de los parámetros de aprendizaje (h(t) y r(t)) se fueron modificando también durante la fase de entrenamiento de las diferentes topologías implementadas. Después de haber validado los resultados de cada tipo de red sobre el conjunto de 100 espectros de prueba, se constató que las redes que presentan un rendimiento óptimo son aquellas que disponen de un número elevado de unidades en la capa competitiva (a partir de 24 la tasa de acierto ya es satisfactoria), y que además han sido entrenadas con patrones normalizados con la función sigmoidal contex-

tualizada para cada índice, manteniendo asimismo los parámetros de entrenamiento en valores no excesivamente elevados. En la tabla 31 se muestra la evolución del entrenamiento y el rendimiento obtenido por estas redes de clasificación de tipo espectral. Tal y como muestran los resultados, es necesario diseñar redes con una capa competitiva constituida por un número amplio de unidades para que sean capaces de agrupar correctamente los patrones de entrada, ya que excepto en el caso de estrellas intermedias (tipos F-G) donde el número de espectros de entrenamiento es suficientemente elevado (442), en la mayoría de los diseños son necesarias como mínimo 24 neuronas competitivas, 9 para cada uno de los 3 clústeres (los dos correspondientes a los tipos implicados y el de diferenciación que se ha incluido adicionalmente).

Tipo de red	Tamaño mapa bidimensional	Nº Ciclos	h(0)	r(0)	∇h(t)	∇r(t)	Nº Clústeres	Tasa acierto
B-A	3	8000	0.9	1	0.08	0.05	1	---
B-A	12	8000	0.9	4	0.08	0.05	2	---
B-A	24	8000	0.9	8	0.08	0.05	2	---
B-A	24	2500	0.7	6	0.1	0.1	3	67.64%
B-A	**36**	**3000**	**0.9**	**12**	**0.08**	**0.05**	**3**	**70.58%**
F-G	3	8000	0.9	1	0.08	0.05	1	---
F-G	12	4000	0.9	4	0.08	0.05	3	71.05%
F-G	24	3000	0.9	8	0.08	0.05	3	76.31%
F-G	24	2500	0.7	6	0.1	0.1	3	78.94%
F-G	**36**	**3000**	**0.9**	**12**	**0.08**	**0.05**	**3**	**81.57%**
K-M	3	8000	0.9	1	0.08	0.05	1	---
K-M	12	8000	0.9	4	0.08	0.05	2	---
K-M	24	4000	0.9	8	0.08	0.05	3	67.85%
K-M	24	4500	0.7	6	0.1	0.1	3	71.42%
K-M	**36**	**2500**	**0.9**	**12**	**0.08**	**0.05**	**3**	**75%**

Tabla 31. Evolución del entrenamiento y rendimiento para las redes de Kohonen de clasificación de parejas de tipos espectrales para distintos tamaños del mapa y diferentes valores de los parámetros

En la siguiente etapa de la experimentación con redes de Kohonen se aplicaron estas al conjunto de espectros de entrenamiento para abordar el tercer nivel de clasificación en temperatura, esto es, la obtención del subtipo espectral para cada uno de los tipos espectrales o categorías obtenidas en la fase anterior. Nuevamente se construyeron redes con diferentes estructuras, variando el tamaño del mapa bidimensional desde 10 hasta 100 unidades competitivas, lo que equivale a grupos de 1 a 10 neuronas para cada uno de los 10 subtipos espectrales considerados (0-9). La topología para la que se obtuvieron unos resultados óptimos es la formada por una capa de entrada de 16 neuronas (una por cada índice) y un mapa bidimensional de 60 neuronas. Como se muestra en la tabla 32, con estas redes se consigue determinar correctamente el subtipo espectral del 62% de los espectros de

prueba, con un error medio de 0.65 subtipos, aplicando el criterio de holgura de ± 1 subtipo para minimizar el efecto de los supuestos errores de borde (subtipos limítrofes entre tipos espectrales distintos, como por ejemplo el B9 o el F0); lógicamente el rendimiento disminuye para las redes de aquellos tipos espectrales en los que se dispone de menos espectros de entrenamiento, en particular los tipos A y M.

Red Subtipo	Entrenamiento (Nº espectros)	Evaluación (Nº espectros)	Nº Ciclos	Tasa acierto
B	50	20	10500	60.00%
A	35	14	9000	57.14%
F	251	19	19500	63.15%
G	191	19	18000	68.42%
K	101	14	12500	64.28%
M	30	14	9000	57.14%
TOTAL	658	100	-	**62.00%**

Tabla 32. Características del entrenamiento y resultados de las redes SOM óptimas de clasificación del subtipo espectral

En cuanto a la clasificación en luminosidad se consideraron de nuevo las dos variantes descritas en los modelos predecedentes, es decir, se construyeron mapas autoorganizados de Kononen para clasificar el nivel de luminosidad estelar de forma independiente, y redes para obtener la luminosidad una vez que se ha determinado previamente el tipo espectral al que pertenece la estrella; estas últimas fueron capaces de asignar una clase de luminosidad congruente con la ofrecida por los autores de los catálogos de referencia al 59% de los espectros de prueba (con un error medio de 0.71 clases), mientras que las redes independientes de luminosidad obtuvieron una tasa de acierto del 51% (error de 0.76 clases). La alternativa basada en la clasificación previa en tipo espectral es la que alcanza un rendimiento óptimo pues, como ya se ha mencionado, la mayor parte de los índices espectrales elegidos como parámetros de clasificación afectan tanto a la temperatura como a la luminosidad de la estrella, siendo complejo separar en muchos casos ambas influencias.

En la figura 67 se muestran los resultados de ambas opciones de diseño detallados por clase de luminosidad; los niveles I, III y V son los que obtienen un rendimiento más elevado, ya que son estas las clases que presentan un mayor número y variedad de espectros distintos en el conjunto de entrenamiento.

El análisis de las posibilidades de aplicación del algoritmo de Kohonen para clasificar bidimensionalmente los espectros ópticos de las estrellas, expuesto en esta sección, refleja que, aunque el rendimiento obtenido por las redes diseñadas es bastante satisfactorio (con tasas de acierto del orden del 75% para el tipo espectral y en torno al 60% para la luminosidad), esta técnica de aprendizaje no supervisado precisaría de un conjunto más am-

plio de espectros de entrenamiento para posibilitar la correcta agrupación de los patrones de entrada en categorías significativas, de forma que se obtuviesen unos resultados comparables a los alcanzados con los diseños de redes MLP o RBF realizados anteriormente.

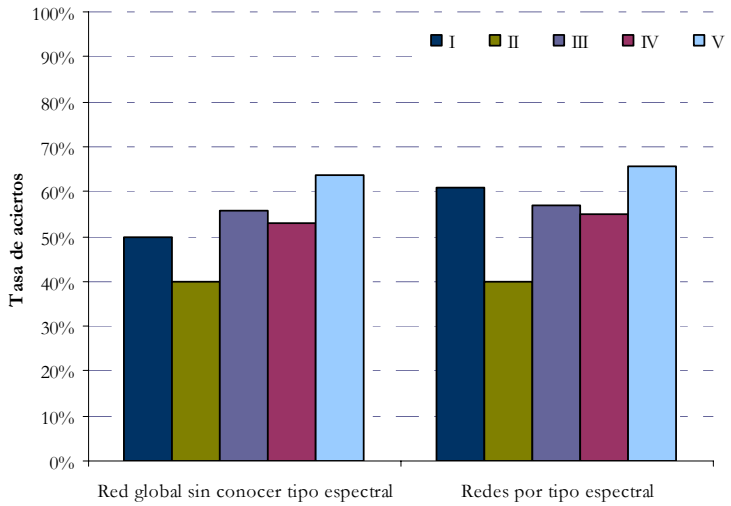


Figura 67. Rendimiento comparado de las dos redes SOM diseñadas para obtener la luminosidad MK de las estrellas

Es preciso mencionar asimismo que la fase de experimentación con modelos neuronales continuó mediante el diseño de redes recurrentes [Hopfield 1999], si bien este desarrollo se abandonó prontamente pues con los datos espectrales disponibles no se consiguió construir una red de este tipo que alcanzase un rendimiento lo suficientemente satisfactorio como para tenerse en cuenta en este enfoque automático de la clasificación estelar.

4.5.5 Implementación: clasificación en temperatura y luminosidad

La etapa de experimentación preliminar con los distintos modelos neuronales presentados en las secciones precedentes condujo a la implementación de las configuraciones óptimas en lenguaje C++, integrando dichos desarrollos en la aplicación de procesado y análisis morfológico de los espectros (v. cap. 3).

La herramienta *snns2c*, incluida en el simulador empleado para el diseño y entrenamiento de las redes neuronales (SNNS en su versión 4.3.), permite generar de una forma automática funciones en código C a partir de los modelos implementados. Al finalizar la fase de entrenamiento de cada red, y una vez que esta ofrece una capacidad de generalización razonable, mediante esta opción adicional del simulador se crea directamente un fiche-

ro .c, con su correspondiente cabecera .h, que pueden por tanto enlazarse fácilmente con el sistema de procesamiento de espectros desarrollado en *Builder C++*.

Los resultados que se obtienen con los diferentes métodos de clasificación implementados se muestran, como ya se ha indicado, a través de la interfaz de la aplicación de análisis espectral. En el caso de las redes neuronales además de proporcionar la clasificación en temperatura y luminosidad propias del sistema MK, se aporta también una probabilidad que orienta sobre la corrección de los resultados ofrecidos, o lo que es lo mismo la confianza de la red en sus propias conclusiones. Para ello, en la traducción a lenguaje C de los modelos neuronales, se ha incorporado un sencillo método para obtener dicha estimación: si la salida efectiva de la red, s, es 0 (i. e. menor que 0.45), la probabilidad se determinará como $p = 100-(s \cdot 100)$, si por el contrario se ha generado un 1 (es decir una salida mayor que 0.55), únicamente se multiplicará este valor por 100, $p = (s \cdot 100)$; en los casos en los que la salida de la red sea ambigua, por situarse en el intervalo considerado como de no resolución ([0.45-0.55]), se proporcionarán dos clasificaciones alternativas, respaldada cada una de ellas por su correspondiente probabilidad. Asimismo cuando el modelo de red implementada esté compuesto por varios niveles, la probabilidad obtenida en cada nivel se multiplicará por la del siguiente sucesivamente hasta computar la probabilidad final de la clasificación resultante.

Durante la fase de diseño y entrenamiento de las diferentes arquitecturas neuronales se consiguió determinar el tipo de red de neuronas específico que resuelve de forma más satisfactoria cada nivel de clasificación estelar, por lo que se está entonces en condiciones de proponer modelos globales, basados obviamente en estas redes óptimas, que formalicen el proceso completo de clasificación en temperatura y luminosidad en el sistema MK estándar. Así la clasificación espectral completa o estimación de la temperatura (subtipo espectral) y clase de luminosidad de las estrellas se efectuará finalmente a través de la implementación, dentro del sistema de tratamiento de espectros estelares, de varios modelos neuronales distintos basados en las dos filosofías de diseño adoptadas durante la etapa de experimentación, es decir, la clasificación estructurada en niveles y la clasificación basada en una red global.

La primera estrategia que se propone para determinar el subtipo espectral y nivel de luminosidad en el sistema MK se basa en una combinación de las redes expuestas en las secciones anteriores conectadas adecuadamente entre sí, en concreto aquellas que han obtenido un rendimiento más alto para cada nivel de clasificación espectral (global, tipo, subtipo y luminosidad) durante la fase de evaluación de las diferentes configuraciones neuronales; estas redes se organizarán en una composición en forma de árbol similar a la resultante de la estrategia de razonamiento propia de los sistemas expertos, cuyo esquema se recogía en la figura 47. De esta forma se implementarán estructuras de redes neuronales MLP y

RBF, descartando inicialmente las arquitecturas SOM y las redes recurrentes por haber obtenido unos resultados más modestos durante la experimentación; asimismo se han tenido en cuenta también los dos rangos espectrales incluidos en los catálogos de referencia, diseñando por tanto un modelo de red de redes que admite únicamente los 16 índices espectrales presentes en el rango 4100 Å a 6800 Å del catálogo secundario, y otro alternativo que acepta como entrada los 25 parámetros espectrales del rango completo correspondiente a los catálogos principales de referencia, es decir de 3510 Å a 7427 Å.

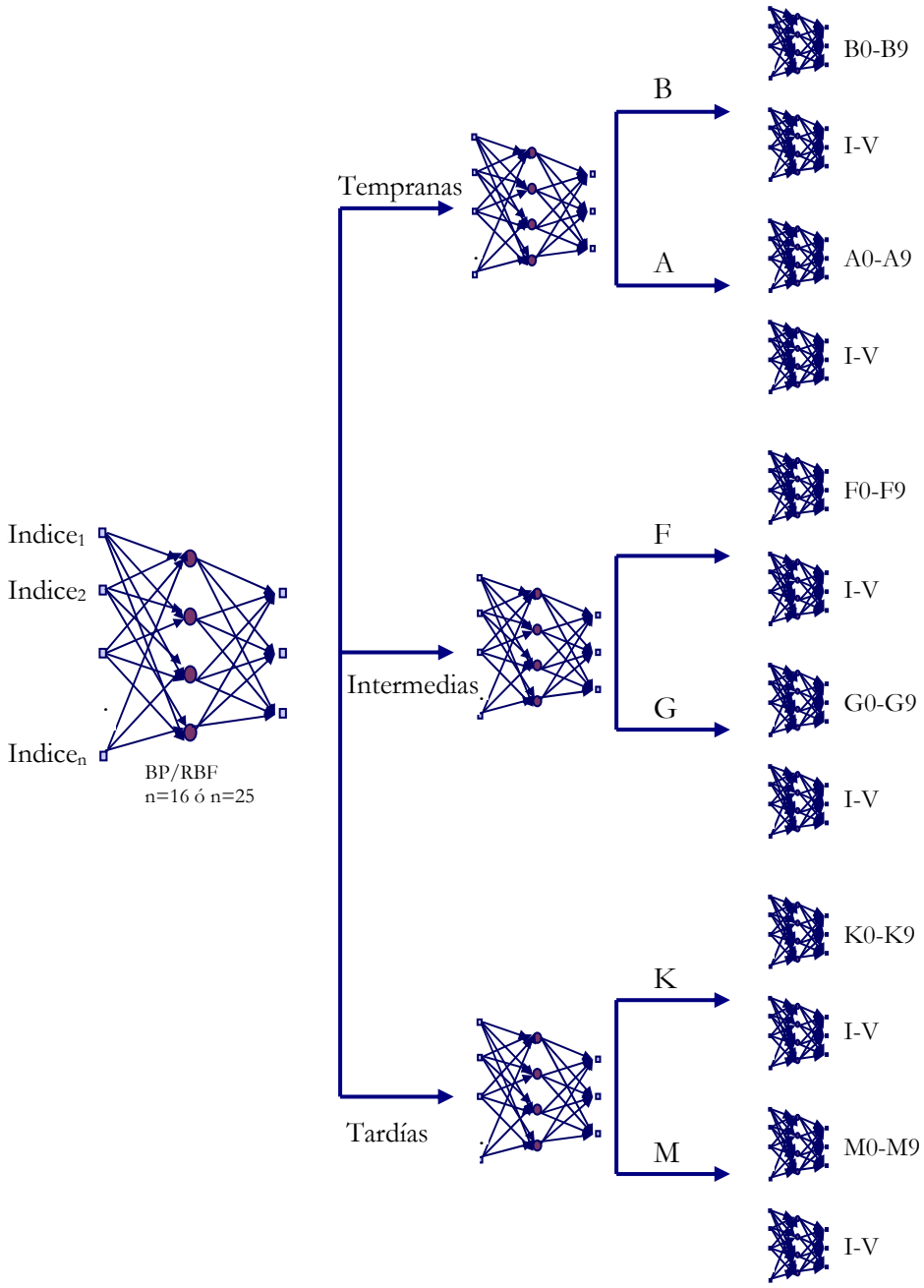


Figura 68. Esquema conceptual de la red de redes diseñada para realizar la clasificación MK completa

Independientemente del algoritmo de aprendizaje y del rango espectral considerados, la red de redes para la clasificación de la temperatura y luminosidad espectral estará formada por un primer nivel constituido por una red neuronal (*backpropagation momemtum* o RBF con 16 ó 25 entradas, según corresponda) diseñada para determinar el tipo global de cada estrella, es decir, para discriminar entre tempranas (B-A), intermedias (F-G) y tardías (K-M); un segundo nivel compuesto por tres redes diferentes que clasifican cada pareja anterior de tipos espectrales; y finalmente un último nivel formado por doce redes, dos para cada uno de los tipos espectrales considerados (B, A, F, G, K, M), de forma que una de ellas se encargue de establecer el subtipo concreto al que pertenece cada espectro (0-9) y la otra determine apropiadamente su clase de luminosidad (I-V) en función del tipo espectral del que se trate. Al trasladar esta estructura en árbol a la implementación en C++ se articuló apropiadamente la comunicación entre los distintos niveles de clasificación, de modo que las redes de cada nivel puedan decidir a qué red del nivel siguiente se envían los espectros y los dirijan hacia ella acompañados de una clasificación y probabilidad parciales; en algunos casos concretos será necesario encaminarlos hacia dos redes diferentes, especialmente cuando se trate de espectros que se encuentren en la frontera entre dos tipos espectrales consecutivos, por ejemplo B9A0 ó G9K0. En la figura 68 se muestra el diseño conceptual de este modelo de red de redes para clasificación estelar en el sistema MK.

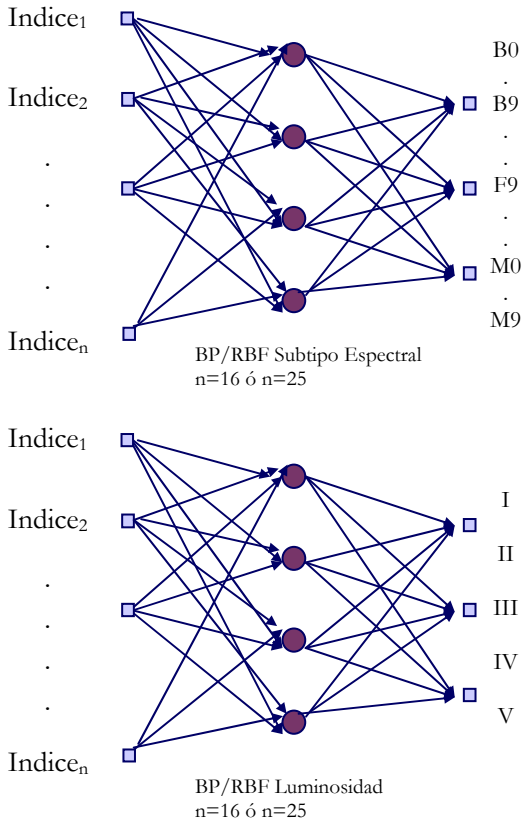


Figura 69. Esquema conceptual de la red global diseñada para realizar la clasificación MK completa

El segundo método propuesto para abordar la clasificación espectral completa se basa en el diseño de dos redes globales de neuronas artificiales mediante las que se efectuará la estimación del subtipo espectral y la clase de luminosidad de las estrellas, en un único nivel de clasificación y de forma independiente aunque simultánea. De este modo se implementarán nuevamente modelos neuronales de los tipos MLP (en concreto redes entrenadas con el algoritmo de aprendizaje *backpropagation momentum*) y RBF, que aceptarán como entrada tanto los 25 índices espectrales pertenecientes al rango de los catálogos principales de referencia (3510 Å-7427 Å), como los 16 comprendidos en el rango más restrictivo del catálogo secundario (4100 Å-6800 Å). La figura 69 ilustra el diseño conceptual de este segundo modelo neuronal para la clasificación espectral en temperatura y luminosidad.

Tipo de red	Rango espectral	Topología	Tasa acierto
Red de redes BP Momentum	3510 Å-7427 Å	Global: 25x10x3 Tipo: 25x5x3x2 Subtipo: 25x20x20x10 Luminosidad: 25x10x10x5	Global: 98% Tipo: 94% Subtipo: 65% Luminosidad: 60%
Red de redes BP Momentum	4100 Å-6800 Å	Global: 16x10x3 Tipo: 16x10x5x2 Subtipo: 16x50x20x10 Luminosidad: 16x20x10x5	Global: 95% Tipo: 93% Subtipo: 76% Luminosidad: 79%
Red de redes RBF	3510 Å-7427 Å	Global: 25x15x3 Tipo: 25x4x2 Subtipo:25x20x10 Luminosidad: 25x20x5	Global: 93% Tipo: 92% Subtipo: 62% Luminosidad: 60%
Red de redes RBF	4100 Å-6800 Å	Global: 16x15x3 Tipo: 16x4x2 Subtipo: 16x25x10 Luminosidad: 16x30x5	Global: 92% Tipo: 90% Subtipo: 75% Luminosidad: 75%
Red global BP Momentum	3510 Å-7427 Å	Subtipo: 25x30x20x10 Luminosidad: 25x10x10x5	Subtipo: 67% Luminosidad: 68%
Red global BP Momentum	4100 Å-6800 Å	Subtipo: 16x50x20x10 Luminosidad: 16x20x10x5	Subtipo: 74% Luminosidad: 75%
Red global RBF	3510 Å-7427 Å	Subtipo: 25x30x10 Luminosidad: 25x20x5	Subtipo: 65% Luminosidad: 65%
Red global RBF	4100 Å-6800 Å	Subtipo: 16x30x10 Luminosidad: 16x30x5	Subtipo: 75% Luminosidad: 73%

Tabla 33. Arquitecturas neuronales implementadas para efectuar la clasificación completa en el sistema MK

En la tabla 33 se relacionan las diferentes topologías seleccionadas en las dos estrategias formuladas para resolver la clasificación en temperatura y luminosidad (árbol de redes y red global), así como el rendimiento de las mismas para el conjunto de espectros de prueba. En la implementación final dentro de la aplicación de análisis y clasificación espectral se ha distinguido entre las arquitecturas de redes *backpropagation* y RBF, diferenciándose también los desarrollos realizados con patrones incluyendo los 25 parámetros correspon-

dientes al rango espectral de 3510 Å a 7427 Å de los modelos diseñados con 16 índices espectrales correspondientes al rango de 4100 Å a 6800 Å. Respecto a la luminosidad, se ha incluido tanto la opción de obtenerla de forma independiente como la consistente en estimarla como parte de la red de redes de clasificación, es decir, una vez determinado el tipo espectral de cada estrella. Los detalles de implementación más relevantes de estos modelos neuronales propuestos para llevar a cabo la clasificación MK de los espectros ópticos de las estrellas se recogen en el anexo IV.

Figura 70. Implementación en C++ de los modelos neuronales para la clasificación en subtipo y luminosidad

Como puede apreciarse en la figura 70, las diferentes alternativas de clasificación mediante redes de neuronas artificiales mencionadas se han integrado en la interfaz del módulo de análisis en forma de menús, situados en la parte superior, que permiten seleccionar el método de clasificación, el espectro o espectros que se desea clasificar y el rango espectral de los mismos. La clasificación MK obtenida por los modelos neuronales así como la probabilidad de la misma se muestran de nuevo al usuario a través de esta interfaz; sin embargo en este caso, a diferencia de lo que ocurría en la clasificación mediante sistemas expertos, no es posible incluir un módulo explicativo en el que se obtenga y muestre una explicación coherente y estructurada del razonamiento del sistema, ya que la presencia de funciones no lineales en algunos modelos neuronales, las complejas arquitecturas con múltiples capas ocultas y la alta conectividad de cada red dificultan en gran medida la realización de un análisis teórico de su comportamiento y la visualización inteligible del proceso de aprendizaje.

4.5.6 Evaluación de rendimiento y análisis de resultados

En esta sección se procederá a realizar un análisis completo de los resultados obtenidos con esta segunda técnica computacional evaluada para automatizar el proceso de clasificación estelar. Se estudiará por tanto el rendimiento que alcanzan los diferentes modelos de redes de neuronas artificiales diseñados en cuanto a la estimación de la temperatura y luminosidad del conjunto de prueba formado por los 100 espectros ópticos de los catálogos principales de referencia, esto es, aquellos que no se habían seleccionado previamente para formar parte del entrenamiento y validación de las redes durante la fase de aprendizaje (la distribución en tipos espectrales y clases de luminosidad, así como la lista completa de espectros elegidos pueden consultarse en el anexo II). Con este objetivo se proporcionó este conjunto de espectros como entrada a las diferentes redes neuronales implementadas para llevar a cabo la clasificación bidimensional en el sistema MK, obteniéndose a la salida de las mismas el subtipo espectral (indicativo de la temperatura superficial) y la luminosidad estelar, acompañados ambos de una medida de la confianza en la clasificación ofrecida en forma de probabilidad.

En el análisis de resultados que se expone a continuación no se consideraron clasificaciones correctas aquellas cuya probabilidad o confianza no superó el 70%, siguiéndose así el mismo criterio que el empleado en la evaluación del rendimiento de los sistemas expertos propuestos. Asimismo en el estudio de las salidas de las redes de subtipo, el procedimiento para evaluar los aciertos es similar al que llevan a cabo la mayoría de los expertos cuando cotejan sus clasificaciones, admitiendo una clasificación con una resolución de ±1 subtipo espectral: en este sentido, si la red obtiene el subtipo dentro del grupo correcto el

resultado se computa como válido; en caso contrario, se examinan los dos subtipos adyacentes con mayor y menor temperatura que el tratado, y si la salida generada pertenece a alguno de estos subtipos el resultado se consideraría también correcto, mientras que en otro caso se computaría como fallo real. En lo referente a la luminosidad, únicamente se consideran salidas válidas aquellas en las que la clase estimada por la red neuronal coincide exactamente con la especificada en el catálogo de referencia.

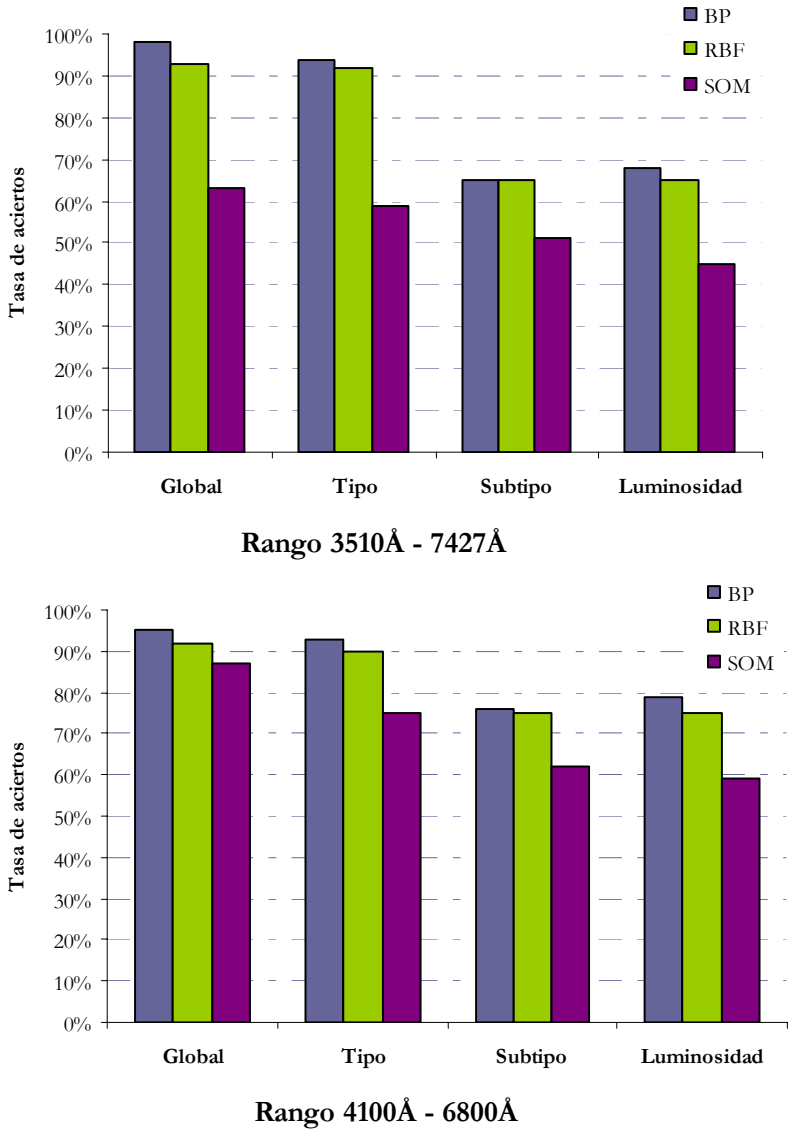


Figura 71. Análisis del rendimiento de las redes neuronales de clasificación

En la figura 71 se muestra el análisis comparativo del rendimiento de las tres arquitecturas neuronales finalmente seleccionadas (redes MLP entrenadas con el algoritmo *back-propagation momentum*, redes RBF y mapas SOM o redes de Kohonen) desglosado por nivel de clasificación (global, tipo espectral, subtipo espectral y clase de luminosidad) para cada uno de los dos rangos espectrales considerados (3510 Å-7427 Å y 4100 Å-6800 Å).

Si bien con algunas leves diferencias, las redes de los tipos *backpropagation* y RBF han obtenido un rendimiento muy similar, en cambio las redes de Kohonen presentan tasas de acierto sensiblemente inferiores en todas las implementaciones (no se han incluido en este análisis los resultados obtenidos con las redes de Hopfield pues en su mayoría no lograron generalizar apropiadamente). Los mapas autoorganizados se caracterizan principalmente por utilizar un algoritmo de aprendizaje de tipo no supervisado y competitivo, en el que es fundamental que el conjunto de entrenamiento sea lo suficientemente amplio como para permitir a la red extraer por sí misma las similitudes entre los datos de entrada y agruparlos apropiadamente. Por este motivo, las redes SOM entrenadas con los espectros procedentes del catálogo secundario muestran un comportamiento más adecuado, con unas tasas de éxito más semejantes a las obtenidas con los otros modelos neuronales, ya que la ampliación en más de 500 espectros del conjunto de entrenamiento posibilita la creación de mapas bidimensionales de salida más adaptados al problema de clasificación espectral.

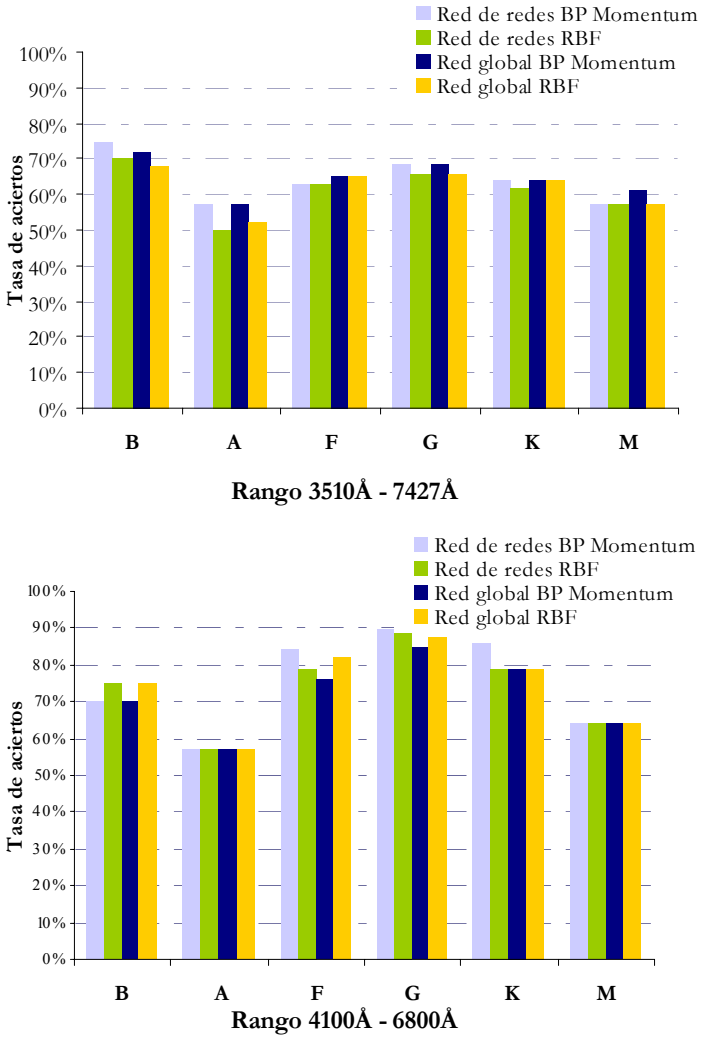


Figura 72. Análisis del rendimiento de los modelos neuronales para la clasificación final del subtipo en los dos rangos espectrales

Analizando por lo tanto los resultados obtenidos durante las fases de experimentación, se puede concluir que las arquitecturas neuronales basadas en el perceptrón multicapa (BP) y en las funciones de base radial (RBF) exhiben un comportamiento más congruente, siendo capaces de lograr un rendimiento final muy aceptable para los diferentes niveles de clasificación tratados, ya que para ambos rangos espectrales alcanzan tasas de éxito superiores al 90% en la discriminación preeliminar (tempranas, intermedias y tardías) y en la determinación del tipo espectral, y del orden del 70% en la obtención del subtipo y de la clase de luminosidad. Por esta razón han sido estas arquitecturas las que se han incluido en la integración de las redes de neuronas artificiales en el sistema desarrollado de análisis y clasificación espectral.

En la clasificación final en temperatura (subtipo espectral), como ya se indicó en la sección precedente, se implementaron tanto modelos basados en una arquitectura de red de redes neuronales como modelos constituidos por redes globales específicas para cada dimensión del sistema MK (temperatura y luminosidad). En la figura 72 se muestran las gráficas del rendimiento alcanzado con cada una de estas variantes detallado por tipo espectral, nuevamente sobre el conjunto de prueba formado por 100 espectros ópticos. El análisis minucioso de estos cuadros comparativos pone de relieve que, teniendo en cuenta los resultados en su totalidad, es el modelo basado en una estructura en forma de árbol compuesto por varias redes neuronales el que presenta unas tasas de acierto más satisfactorias, ya que es capaz de obtener correctamente y de forma inequívoca (probabilidad mayor del 70%) el subtipo espectral de alrededor del 76% de los espectros que forman el conjunto de evaluación seleccionado, cuando se trata de redes de tipo MLP entrenadas con el algoritmo de aprendizaje *backpropagation momentum*, o en torno al 74% cuando las redes se entrenan con el algoritmo RBF. Por el contrario, en las implementaciones basadas en la determinación directa del subtipo a través de redes globales, este rendimiento es ligeramente inferior (72%-73%). Asimismo puede constatarse que la inclusión de los espectros del catálogo secundario en el conjunto de entrenamiento (gráfica del rango 4100-6800 Å) produce en general una mejora significativa en el rendimiento de cada uno de los modelos implementados (entre el 7% y el 13% de incremento en la tasa de éxito).

Real/Est.	B	A	F	G	K	M
B	19	1	0	0	0	0
A	1	10	3	0	0	0
F	0	4	14	1	0	0
G	0	0	1	16	2	0
K	0	0	0	1	12	1
M	0	0	0	1	1	12

Tabla 34. Matriz de confusión inicial para el tipo espectral en el modelo neuronal óptimo

Real/Est.	B	A	F	G	K	M
B	20	0	0	0	0	0
A	1	11	2	0	0	0
F	0	2	17	0	0	0
G	0	0	1	18	0	0
K	0	0	0	0	14	0
M	0	0	0	1	0	13

Tabla 35. Matriz de confusión final para el tipo espectral en el modelo neuronal óptimo

En cuanto al tipo espectral, el estudio de los resultados indica que existe cierta correlación entre la tasa de acierto final alcanzada y la composición y tamaño del conjunto de entrenamiento, ya que independientemente del modelo y del rango espectral considerado, el rendimiento de las redes decrece para los tipos en los que dicho conjunto incluye menos espectros (A y M, principalmente). Al introducir los espectros del catálogo secundario, los resultados mejoran significativamente (en más del 20% en algunos casos) para los tipos intermedios (F, G y K), pues es en estos en los que se experimenta un aumento mayor tanto en el número como en la variedad de espectros; por otra parte, para el resto de tipos espectrales (B, A y M), el rendimiento no aumenta de forma notable e incluso a veces hasta disminuye en algunas implementaciones, puesto que las estrellas de estos tipos son más sensibles a los índices espectrales que se han excluido del rango del catálogo secundario (principalmente algunas líneas importantes de hidrógeno y helio alrededor de 4000 Å y algunas bandas tardías de óxido de titanio en la zona de 7000 Å).

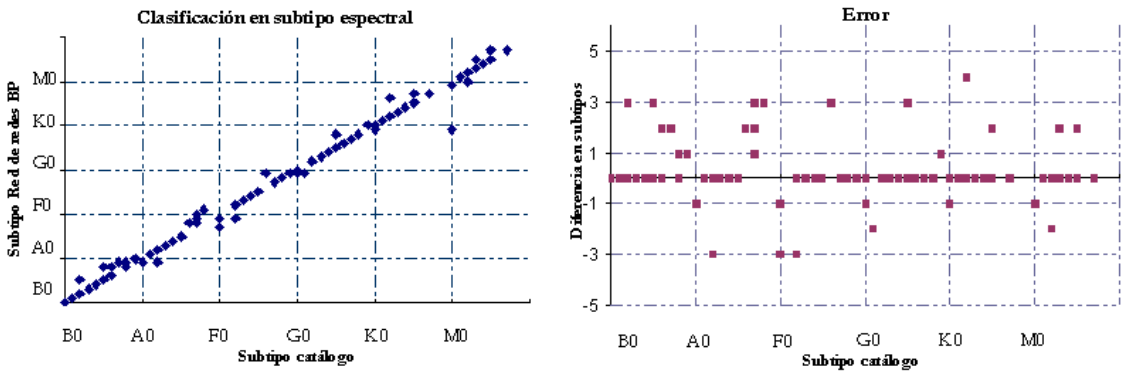


Figura 73. Comparación de la clasificación en subtipo espectral entre los catálogos de referencia y el modelo neuronal óptimo, incluyendo la gráfica de discrepancias (error) entre ambos

En la tabla 34 se incluye la matriz de confusión para el tipo espectral [Kohavi 1998] correspondiente al análisis de las salidas del modelo neuronal con resultados óptimos, i. e. red de redes entrenada con el algoritmo *backpropagation*. Como ya se indicó en el estudio del comportamiento del sistema experto, esta herramienta gráfica de verificación de resultados refleja en sus filas el número real de espectros de cada tipo espectral y en sus columnas el número de predicciones obtenidas para cada uno de ellos. En este caso se advierte que la red neuronal asigna el tipo espectral correctamente a un total de 83 espectros de prueba, lo que equivale a una tasa de éxito de 83% con error medio de 0.2 tipos. Observando a simple vista la matriz resultante se constata que los errores se producen generalmente entre tipos contiguos, es decir, son debidos presumiblemente al problema de bordes descrito en secciones anteriores. Por ello, si se permite nuevamente una holgura de ±1 subtipo en el análisis de las salidas, la matriz de confusión resultante (que se incluye en la tabla 35) refleja una

disminución considerable de los fallos en la clasificación, pues la red es ahora capaz de asignar un tipo espectral congruente con el que les otorga su propio catálogo a 93 de los 100 espectros de evaluación, reduciéndose el error medio a 0.08. Aunque la tasa de acierto se incrementa en un 10%, se observa en esta nueva matriz que aún se mantiene una cierta confusión entre los tipos espectrales A y F, esperable si se tiene en cuenta que es en estos donde tiene lugar el ya citado problema clásico de degeneración entre la temperatura superficial de la estrella y la metalicidad de su espectro.

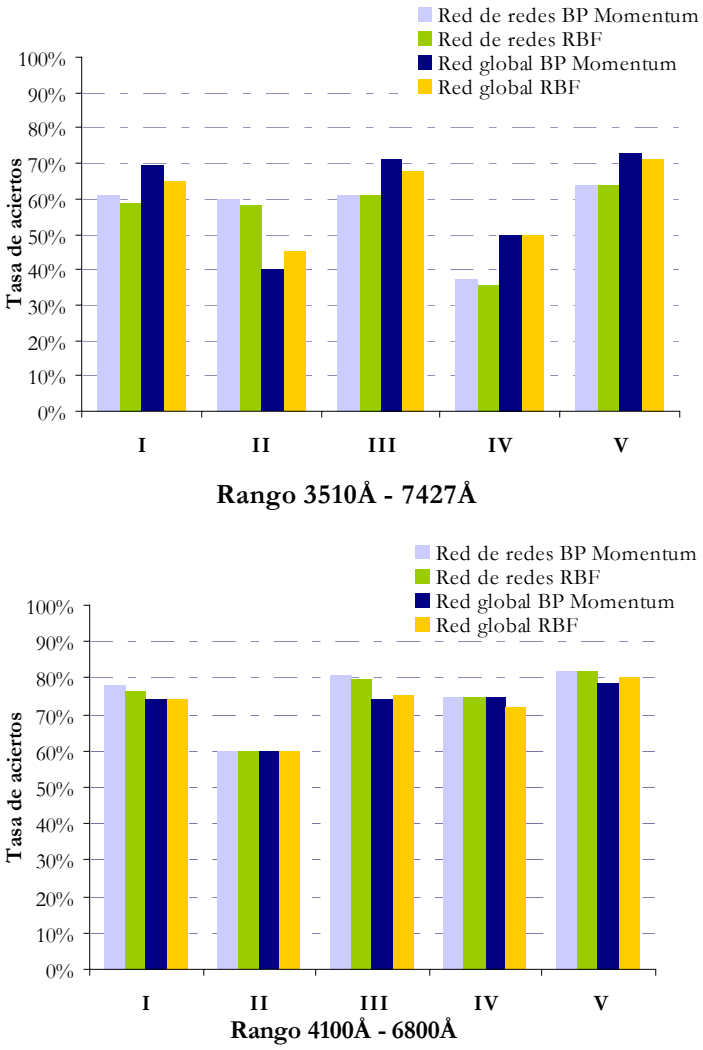


Figura 74. Análisis del rendimiento de los modelos neuronales para la clasificación final de la luminosidad en los dos rangos espectrales

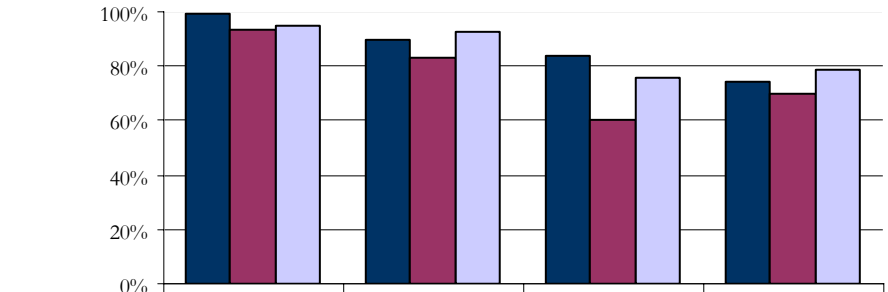
En la figura 73 se muestran las gráficas detalladas de comparación y de error entre el subtipo real de cada espectro y el que le asigna este modelo neuronal óptimo, el cual es capaz de clasificar correctamente el 76% de los espectros del conjunto de evaluación (considerando ya la holgura de ±1 subtipo) con un error medio de 0.92 subtipos; la mayor parte de las clasificaciones erróneas se ubican de nuevo en los subtipos limítrofes entre tipos, de

ahí las desviaciones en la tendencia diagonal de la primera gráfica que se producen precisamente en las transiciones entre el subtipo 9 de un tipo espectral y el subtipo 0 del siguiente.

En la clasificación de la clase de luminosidad se implementaron también soluciones basadas en ambos modelos neuronales: redes globales específicas que obtienen el nivel de luminosidad de forma independiente a la temperatura, y arquitecturas reticulares o red de redes de neuronas que estiman la clase de luminosidad en función del tipo espectral de la estrella. En la figura 74 se recogen las gráficas de comparación del rendimiento obtenido con cada una de estas posibilidades sobre el conjunto de evaluación de 100 espectros ópticos. Tal y como se observa claramente, para el rango espectral del catálogo principal (3510-7427 Å) ambos modelos implementados ofrecen un rendimiento similar (60%-68%), apreciándose una ligera mejoría al utilizar únicamente la opción basada en redes específicas de luminosidad, la cual puede deberse a los errores adicionales que se incluyen en la red por niveles cuando se determina el tipo espectral siguiendo un camino equivocado en el árbol, ya que se añade así un error previo que condiciona la estimación de la clase de luminosidad. Sin embargo, esta tendencia se invierte al añadir los espectros del catálogo secundario correspondientes al rango espectral de 4100 Å a 6800 Å, pues consigue un rendimiento óptimo el modelo basado en una estructura en niveles compuesta por varias redes neuronales consecutivas que obtienen la luminosidad después de haber determinado el tipo espectral, estimando adecuadamente (probabilidad mayor del 70%) la clase de luminosidad del 79% de los espectros del conjunto de evaluación en redes MLP entrenadas con el algoritmo de aprendizaje *backpropagation* y alrededor del 75% cuando se trata de redes de tipo RBF.

Si se analizan los resultados por nivel de luminosidad, se comprueba de nuevo la dependencia con respecto al tamaño del conjunto de entrenamiento para cada clase, ya que el rendimiento disminuye considerablemente para aquellos niveles de luminosidad en los que dicho conjunto es más escaso (II y IV), independientemente del modelo neuronal y del rango espectral considerado; obviamente, cuantos más espectros estén disponibles para cada clase, mejor se pueden delimitar las características espectrales que la definen, con lo cual los resultados obtenidos serían perfectamente consistentes con el diseño de los modelos neuronales. Por esta razón, cuando se agregan los espectros del catálogo secundario, el rendimiento tiende a mejorar para todas las clases pero especialmente para las más desfavorecidas en las que el tamaño de la muestra era significativamente menor, con un aumento en la tasa de aciertos superior al 25% en algunas implementaciones; de igual modo la tasa de éxito más elevada la genera la clasificación del nivel de luminosidad V, debido a que el número de patrones de entrenamiento que pertenecen a esta clase es notablemente superior al de los demás, con más de 200 espectros de diferencia en algunos casos.

El análisis de los resultados obtenidos con los diferentes modelos neuronales implementados para abordar la clasificación completa en el sistema MK estándar indica que sería recomendable utilizar el modelo de red de redes neuronales tanto para la determinación del subtipo espectral como de la clase de luminosidad, ya que en ambos casos se obtienen unas tasas de éxito satisfactorias (en torno al 75%) y ligeramente superiores a las alcanzadas por la red global específica (alrededor del 73%). Como ya revelaba el análisis de sensibilidad llevado a cabo sobre los índices espectrales de clasificación, muchos de los parámetros que emplean los expertos afectan tanto a la temperatura como a la luminosidad estelar, siendo sumamente difícil separar ambas influencias. Por tanto, un modelo basado en la obtención de la clasificación en varios niveles que supedite la determinación de la clase de luminosidad a la estimación previa del tipo espectral, será más consistente con el proceso que se sigue generalmente en las técnicas manuales de clasificación estelar.



	Clasif. global	Tipo espectral	Subtipo espectral	Luminosidad
Experto A	99%	90%	84%	74%
Experto B	93,50%	83%	60%	70%
Red de RNAs	95%	93%	76%	79%

Figura 75. Cuadro comparativo de los resultados del modelo neuronal final óptimo y de los dos expertos humanos para los cuatro niveles de clasificación considerados

Al igual que en la fase de evaluación del rendimiento del sistema experto desarrollado, se ha llevado a cabo también en este punto una validación adicional de los modelos neuronales óptimos mediante la comparación de sus conclusiones con las clasificaciones obtenidas por el grupo de expertos que han colaborado en el diseño del sistema de tratamiento de espectros estelares. En la figura 75 se recogen los resultados de este estudio de la adecuación de las clasificaciones obtenidas por el modelo neuronal óptimo (red de redes de tipo *backpropagation*) a las estimadas manualmente por los expertos espectroscopistas. Para completar esta fase de evaluación final se llevó a cabo un estudio ciego, similar al efectuado para el sistema experto, en el que se le presentó a los astrofísicos un conjunto de espectros ya clasificados (bien por la red neuronal o bien por otro experto) con el objetivo de que estos emitiesen su juicio sobre la clasificación propuesta; en la tabla 36 se reflejan los porcentajes de acuerdo entre ambos expertos humanos y el modelo neuronal óptimo.

Con el objetivo de completar y concluir el proceso de evaluación de las redes de neuronas artificiales, se efectuó un estudio del rendimiento obtenido en la clasificación de espectros con características manifiestamente diferentes a las presentes en aquellos que se emplearon durante el aprendizaje: en concreto se seleccionó un conjunto de 49 espectros de estrellas post-AGB procedentes de campañas de observación propias en el Instituto Astrofísico de Canarias [Suárez 2006], y un conjunto formado por los 486 espectros descartados inicialmente (por razones variadas como metalicidad atípica, ausencia de medida de flujo en regiones esenciales, clasificaciones ambiguas, etc.) de los catálogos de referencia (Silva 1992, Pickles 1998, Jacoby 1984 y Prugniel 2001). Los resultados obtenidos con el modelo neuronal óptimo (red de redes *backpropagation*) en la estimación de la clasificación MK de estos espectros, desglosados por la fuente de procedencia de los mismos, se recogen en las tablas 37 y 38. Para facilitar una comparación apropiada, se ha utilizado como referencia estándar la clasificación manual proporcionada por los expertos de nuestro grupo de investigación en el conjunto de estrellas post-AGB, y la ofrecida por los propios catálogos para el segundo conjunto, confirmando la misma a través de la consulta de las principales bases de datos estelares.

	Exp. A	**Exp. B**	**Red RNAs**
Exp. A	100%	78%	85%
Exp. B	87%	100%	86%
Red RNAs	84%	78%	100%

Tabla 36. Resultados del estudio realizado para determinar el porcentaje de acuerdo entre los expertos y el modelo neuronal final

Tal y como era previsible, la tasa de error se eleva en el caso de espectros que proceden de observaciones directas, ya que estos son reales y por tanto más sensibles a los efectos de la atmósfera y a las deficiencias de precisión de los aparatos de medición; además no están promediados sino que proceden de una única estrella y pueden por lo tanto incluir algunas características (desplazamiento significativo de líneas, ruido excesivo, etc.) que no estaban generalmente presentes en los espectros tipo de los catálogos. En los espectros atípicos procedentes de los catálogos de referencia, los fallos se concentran en los tipos espectrales tardíos, pues muchos de ellos presentan un nivel de metalicidad irregularmente bajo que conlleva a su confusión con tipos más tempranos.

Los resultados obtenidos en esta validación final de las redes de neuronas artificiales por los expertos confirman que esta técnica de Inteligencia Artificial es capaz de emular de forma satisfactoria el proceso de clasificación estelar manual, ya que en la mayoría de los casos su tasa de éxito es comparable a la alcanzada por los expertos en clasificación, los cuales coinciden en aproximadamente el 82% de las estimaciones. Asimismo, los modelos neuronales han demostrado una capacidad de generalización muy aceptable en ambas dimensiones del sistema MK estándar (temperatura y luminosidad), pues se obtienen tasas de

éxito similares (en torno al 75%) tanto para espectros semejantes a aquellos con los que fueron entrenados como para espectros que, por proceder de fuentes totalmente distintas, presentan algunas peculiaridades y características espectrales muy diferentes.

Tipo espectral MK	Espectros de evaluación	Espectros post-AGB	Espectros atípicos catálogos referencia
B	70%	74.22%	75%
A	57.14%	62%	69.50%
F	84.21%	80.94%	84%
G	89.47%	75.5%	82.36%
K	85.71%	87.15%	74.60%
M	64.28%	72%	73.90%
TOTAL	**76%**	**75.30%**	**76.56%**

Tabla 37. Resultados del modelo neuronal óptimo para el subtipo espectral desglosados por la fuente de procedencia

Nivel luminosidad	Espectros de evaluación	Espectros post-AGB	Espectros atípicos catálogo de referencia
I	78.26%	74%	76%
II	60%	-	60%
III	81%	-	78.85%
IV	75%	-	65.42%
V	82%	-	80.70%
TOTAL	**79%**	**74%**	**72.19%**

Tabla 38. Resultados del modelo neuronal óptimo para la luminosidad desglosados por la fuente de procedencia

4.6 Algoritmos de clustering

Los algoritmos estadísticos de agrupamiento (*clustering*) de datos constituyen, tanto por sus características específicas como por su frecuente aplicación en problemas de reconocimiento de patrones, una de las técnicas que a priori podrían suponer una mejor adaptación al problema la clasificación no supervisada de las estrellas a través del estudio de sus espectros ópticos. En esta sección se describe detalladamente el proceso completo de diseño e implementación de los algoritmos de agrupamiento seleccionados para llevar a cabo la determinación automática del tipo espectral y clase de luminosidad estelares siguiendo el sistema de clasificación estándar MK.

El término análisis *cluster* fue introducido por R. C. Tryon en una monografía publicada a principios del siglo pasado [Tryon 1939], y dentro de él se engloban diferentes algoritmos de clasificación cuyo objetivo último es la organización sucesiva de la información hasta convertirla en conjuntos comprensibles y manejables a los que se denomina *clusters*, palabra de origen astronómico que tiende a connotar una multitud de puntos próximos entre sí en el espacio. Esta técnica consiste por tanto en la clasificación de objetos similares en clases o categorías diferentes agrupándolos en base a algún tipo de criterio o, más exactamente, en la división del conjunto inicial de datos en subconjuntos (*clusters*) de forma que los elementos asignados a cada uno de ellos compartan algún atributo común, que suele ser la proximidad de acuerdo a alguna medida predefinida de la distancia (*city-block*, distancia euclídea, distancia Chebychev, etc.) [Hartigan 2001].

Los algoritmos de *clustering* constituyen un método habitual para efectuar el análisis estadístico de datos que se requiere en áreas tales como el aprendizaje automático (donde el análisis *cluster* se considera una forma más de aprendizaje no supervisado), la minería de datos (*Data Mining*), el reconocimiento de patrones, el análisis de imágenes o la bioinformática. Así esta técnica ha tenido una gran aplicación práctica a lo largo de los años en una amplia variedad de problemas de investigación pertenecientes a diferentes campos clásicos como la medicina (taxonomías de enfermedades, agrupamiento de síntomas, etc.) o la arqueología (categorías de objetos funerarios, herramientas de piedra, etc.) [Hartigan 1975], aplicándose más recientemente a áreas más novedosas y específicas como pueden ser la categorización automática de documentos (con el objetivo de mejorar el rendimiento de los motores de búsqueda o facilitar la revisión de los resultados obtenidos por los mismos) [Gövert 1999] [Yang 1999], la segmentación de imágenes médicas [Alonso 2000] o de satélite [Hitimajshima 2000], el reconocimiento de gestos para hace posible, por ejemplo, que un ordenador entienda el lenguaje de signos [Wachs 2002] [Wachs 2008], o la segmentación de imágenes en color para el análisis y edición de motivos de diseño en la industria textil [Albert 2003].

Aunque en las etapas de diseño preeliminar correspondientes a la construcción de catálogos de referencia y al análisis de sensibilidad de parámetros espectrales se han utilizado algunos algoritmos de *clustering*, en este primer enfoque computacional de la clasificación bidimensional de las estrellas, las técnicas de agrupamiento estadístico se han aplicado principalmente para refinar los resultados obtenidos mediante otros métodos de clasificación, tales como los sistemas expertos o las redes de neuronas artificiales. Con este propósito particular se han considerado los algoritmos de *clustering K-means*, Max-Min, ISODATA y FKNN (*Fuzzy K-Nearest Neighbour*) [Kaufman 1990]. A continuación se exponen las características principales de las técnicas de agrupamiento seleccionadas y la descripción detallada del proceso de diseño e implementación de cada una de ellas, incluyéndose asimismo un análisis comparativo de su rendimiento cuyo objetivo será la determinación de la capacidad de adaptación de las mismas a los distintos supuestos de clasificación espectral. Además, como en el caso de los métodos anteriores, se llevará a cabo nuevamente un estudio de la influencia que ejercen los distintos índices espectrales considerados en la clasificación estelar, con el fin de refinar en la medida de lo posible los resultados alcanzados con los distintos algoritmos de análisis *cluster* implementados.

4.6.1 Consideraciones generales de diseño

El término algoritmos de agrupamiento, como ya se ha indicado, alude a la capacidad de estos métodos para formar grupos o clases a partir de los datos de entrada. La única información que se requiere para llevar a cabo tal acción, aparte de determinados parámetros de entrada específicos de cada algoritmo como puede ser el número de clases deseadas, es la definición previa del vector de características; una vez establecido este, los algoritmos recibirán como entrada los vectores a clasificar y, de forma autónoma y sin supervisión de ningún tipo, los agruparán en clases a partir de la información disponible. En la figura 76 se representa gráficamente esta particularidad de las técnicas de *clustering*.

En el caso de los algoritmos elegidos para llevar a cabo la clasificación espectral, al igual que en el diseño del sistema experto y de las redes neuronales descritas en los epígrafes anteriores, para formar el vector de características se ha empleado el conjunto de 258 espectros estelares procedentes de los catálogos principales de referencia [Silva 1992] [Pickles 1998] [Jacoby 1984] (véase sección 4.1 para más detalles); si bien sería posible destinar todos los espectros disponibles a facilitar el agrupamiento o formación de los *clusters*, solamente se dedicó un subconjunto formado por 158 de ellos a este fin, mientras que los 100 restantes se utilizaron para evaluar la capacidad resolutiva de cada algoritmo en la obtención de la clasificación MK de las estrellas. Las tablas 39 y 40 muestran la distribución en

tipos espectrales y clases de luminosidad del conjunto de espectros seleccionados para evaluar la técnica de análisis *cluster* como posible método automático de clasificación estelar.

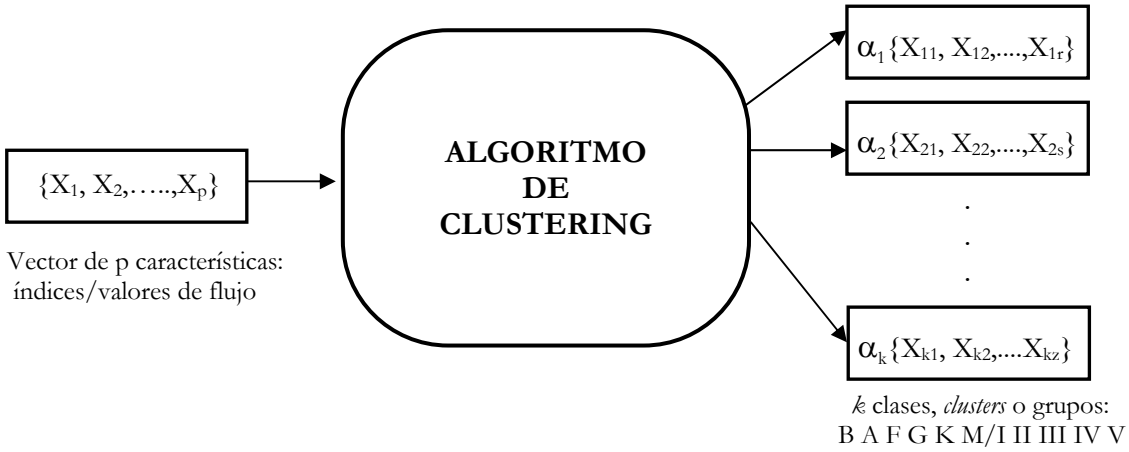


Figura 76. Esquema general del funcionamiento de los algoritmos de agrupamiento

A partir de cada espectro de entrada se han construido tres vectores distintos de características (patrones) que equivaldrían a los valores del flujo energético en todo el rango espectral, a estos mismos valores pero en determinadas zonas espectrales de interés o a un conjunto de parámetros resumen del espectro formado por los 25 índices espectrales de clasificación resultantes del análisis de sensibilidad llevado a cabo previamente (v. tab. 4), los cuales se corresponden con algunas de las peculiaridades que estudian visualmente los expertos en la técnica de clasificación manual (intensidad o anchura equivalente de líneas de absorción y emisión, energía de bandas moleculares, ratios entre líneas significativas, etcétera). Es preciso resaltar en este punto que no siempre se ha empleado este conjunto completo de parámetros de clasificación ya que, con miras al perfeccionamiento de los algoritmos implementados, se ha estimado conveniente en algunos casos realizar una selección previa de los índices para estudiar su influencia en la determinación del tipo espectral y/o de la clase de luminosidad.

Los vectores de características de cada espectro (valores de flujo o medidas de los índices espectrales), bien sea éste miembro del conjunto de agrupamiento o del conjunto de evaluación, se han obtenido automáticamente mediante la aplicación de los algoritmos de análisis morfológico descritos en el capítulo 3. En el caso de los índices de clasificación, los componentes del vector de entrada se han normalizado utilizando una función sigmoidal específica contextualizada para cada uno de ellos, similar a la empleada previamente para la adaptación de las entradas de las redes de neuronas artificiales diseñadas (v. sec. 4.5.1).

El diseño, implementación y evaluación de los algoritmos estadísticos de agrupamiento se ha llevado a cabo mediante el software *Matlab* (MATrix LABoratory) en su versión 7.10 [Matlab 2010]. Este paquete interactivo de fácil uso proporciona un entorno de computación y desarrollo de aplicaciones totalmente integrado, orientado a la ejecución de proyectos en los que se encuentren implicados tanto elevados cálculos matemáticos como la visualización gráfica de los mismos. En los últimos años *Matlab* se ha convertido en un estándar de la industria al ser capaz de integrar, de forma coherente y sin fisuras, los requisitos esenciales de un sistema de computación técnico (análisis numérico, cálculo matricial, procesamiento de señales, visualización gráfica, herramientas para aplicaciones específicas, capacidad de ejecución en múltiples plataformas, etc.) en un entorno completo donde los problemas y sus soluciones se expresan del mismo modo en que se escribirían habitualmente (lenguaje de alto nivel basado en vectores y matrices), sin necesidad de hacer uso de la programación tradicional [Hahn 2007].

Tipo espectral MK	Conjunto Agrupamiento	Conjunto Evaluación
B	30	20
A	23	14
F	29	19
G	30	19
K	23	14
M	23	14
TOTAL	158	100

Tabla 39. Distribución de tipos espectrales en los conjuntos espectrales de los algoritmos estadísticos de agrupamiento

Clase luminosidad MK	Conjunto Agrupamiento	Conjunto Evaluación
I	36	23
II	11	5
III	47	31
IV	13	8
V	51	33
TOTAL	158	100

Tabla 40. Distribución de clases de luminosidad en los conjuntos espectrales de los algoritmos de agrupamiento

Este software dispone además en la actualidad de un amplio abanico de programas de apoyo especializados, denominados *Toolboxes*, que extienden significativamente el número de funciones incorporadas en la aplicación principal; con esta funcionalidad adicional se

cubren prácticamente todas las áreas principales del mundo de la ingeniería y de la simulación: procesamiento de imágenes, estadística, análisis financiero, simulación de sistemas dinámicos, lógica difusa, redes neuronales, matemáticas simbólicas, etc. En la implementación de las técnicas de análisis *cluster* para la clasificación espectral se ha hecho uso exhaustivo del *Statistics Toolbox*, pues proporciona un conjunto de algoritmos de agrupamiento ya implementados, fiables y muy verificados, en forma de funciones predefinidas escritas en código *Matlab* (archivos .m) que resultan muy convenientes para efectuar el análisis de datos estadísticos y que además pueden utilizarse como plantillas para crear procedimientos específicos adaptados a nuestras propias necesidades. *Matlab* incorpora asimismo un compilador (*the Matlab Compiler*) que permite crear de forma inmediata código C/C++ optimizado, opción esta que se ha aprovechado para integrar de forma fácil y directa los algoritmos de agrupamiento implementados con los desarrollos de métodos anteriores en el sistema global de análisis y clasificación espectral.

Aunque dentro del análisis *cluster* conviven enfoques muy diferentes, las técnicas más populares son las que se basan en el agrupamiento jerárquico de los datos mediante la búsqueda de nuevos *clusters* a partir de los iniciales (*Hierarchical Algorithms*), y aquellas que siguen la filosofía de la división del conjunto inicial de datos creando todos los *clusters* al mismo tiempo (*Partitional Algorithms*). Para abordar la clasificación automática de espectros ópticos mediante estas técnicas, se han seleccionado los algoritmos basados en la partición de los datos *K-means* (y su variante FCM), ISODATA y FKNN (*Fuzzy K-Nearest Neighbor*), y el algoritmo de agrupamiento jerárquico Max-Min.

El algoritmo *K-means* (también denominado *C-means* o K-medias) es un método de agrupamiento por partición que se basa en la elección aleatoria e inicial de datos representativos (centros o centroides, habitualmente) de los k grupos construidos, y en la asignación de cada vector de entrada al *cluster* más semejante o cercano, para posteriormente computar de nuevo el centro y repetir el proceso de clasificación hasta que se alcance la condición de convergencia; esta técnica se ha aplicado con éxito a grandes volúmenes de datos de entrada, ya que su complejidad sería lineal una vez que se hayan determinado tanto el número de clases (k) como el número de ciclos del algoritmo. El método ISODATA constituye una variante del algoritmo *K-means* en la que se contempla la posibilidad de dividir o reunir las diferentes clases existentes en cada ciclo; de esta forma serán las clases con una varianza que supere un límite prefijado las que se subdividirán en dos nuevos grupos, y los pares de clases cuyos centros se encuentren a una distancia menor que otro valor predeterminado los que se reunirán en un único grupo en el siguiente ciclo de ejecución. El algoritmo Max-Min, en cambio, se basa en la combinación heurística de las distancias euclídeas máxima y mínima, verificándose en cada paso iterativo la viabilidad de construir un nuevo *cluster* con un elemento separado suficientemente de las clases ya existentes [Everitt 2009]. El algorit-

mo FKNN (*Fuzzy K-Nearest Neighbor*) formaliza una alternativa difusa a los métodos de análisis *cluster* denominados del vecino más cercano (KNN) en la que se determina la función de pertenencia de cada vector de entrada a los distintos grupos mediante el estudio de las distancias de tal elemento a un conjunto de muestras representativas de cada clase; a diferencia de los algoritmos anteriores, este método podría encuadrarse dentro del aprendizaje supervisado puesto que es necesario que se proporcionen externamente y con anterioridad los representantes de cada clase para que se pueda llevar a cabo correctamente el agrupamiento [Keller 1985].

Los algoritmos de *clustering* seleccionados varían entre sí por el mayor o menor grado de reglas heurísticas que aplican e, inversamente, por el nivel de procedimientos formales involucrados. Sin embargo, todos ellos se basan en el empleo sistemático tanto de la distancia entre los vectores u objetos a clasificar, como de la separación entre las clases que se van construyendo a lo largo del proceso de actuación de cada método concreto. En la etapa inicial del agrupamiento no jerárquico se elige un número arbitrario y temporal de clases, cuyos elementos constituyentes se determinarán mediante una medida de la distancia a cada uno de ellos. Tradicionalmente se ha utilizado la distancia euclídea para llevar a cabo esta asignación, siendo por tanto esta la que se ha seleccionado también para este desarrollo. Matemáticamente esta medida de la distancia entre clases podría expresarse como:

$$D_E(X_i, X_j) = \sqrt{\sum_{m=1}^{p} \left(X_{im} - X_{jm}\right)^2},$$

donde X_i y X_j son los dos vectores (formados por p componentes cada uno) entre los que se calcula la distancia euclídea: el vector que se desea clasificar y el considerado como representante de una clase particular (centro o centroide).

Los dos primeros métodos elegidos para efectuar el agrupamiento de los espectros estelares (*K-means* e ISODATA) suelen operar con centroides como prototipos de las clases, es decir, cada *cluster* tiene asociado un centroide o elemento representativo que varía en cada iteración y mediante el cual se van asignando nuevos vectores a cada grupo; sin embargo, el algoritmo Max-Min no presenta esta característica sino que trabaja con el primer vector que se asigna a cada clase, siendo éste fijo para todas las iteraciones. Por este motivo se ha diseñado una variante de este último algoritmo que, a similitud de los métodos anteriores mencionados, emplea los centroides de cada clase (en lugar del primer vector) con el objetivo de evaluar la influencia de los mismos en el agrupamiento, esto es, comprobar si se obtienen mejores resultados determinando a priori los centroides de cada *cluster* o bien utilizando de forma aleatoria los propios vectores de entrada. Además del método de *clustering* difuso FKNN, se ha incluido también en este desarrollo la variante difusa del algoritmo K-

medias (FCM), la cual permite especificar el grado de pertenencia de cada elemento de entrada a los diferentes *clusters* obtenidos. Asimismo, se han implementado diferentes versiones de cada algoritmo para abordar los distintos niveles de clasificación espectral: tipo espectral (con 3 y 6 *clusters* iniciales), subtipo espectral (con 30 y 60 clases iniciales) y clase de luminosidad (con 3 y 5 grupos iniciales).

En los epígrafes siguientes se expone la descripción teórica e implementación particular de cada algoritmo de *clustering* seleccionado para obtener la clasificación bidimensional de los espectros estelares, incluyéndose también una comparación coherente del rendimiento alcanzado por cada uno de ellos sobre el conjunto de espectros de evaluación. Por último, se proporcionan los detalles concernientes a la integración de esta técnica de clasificación en la aplicación global de análisis y clasificación espectral.

4.6.2 Algoritmo K-means

Dentro de la rama del análisis *cluster* que se basa en la división o partición de todo el conjunto inicial de datos en grupos (*Partitioning Clustering*), destaca el algoritmo *K-means* (*C-means* o K-medias) [MacQueen 1967]. Como su propio nombre indica, en esta técnica estadística de agrupamiento no supervisado se consideran inicialmente k *clusters*, por lo que será preciso por tanto conocer de antemano el número de grupos en los que se desea clasificar los vectores de entrada. Además, para propiciar el correcto funcionamiento del algoritmo, será asimismo imprescindible elegir convenientemente una primera muestra o ejemplo de cada una de estas k clases. En algunas implementaciones del algoritmo estas muestras iniciales no se eligen aleatoriamente sino que se proporciona previamente de forma supervisada un elemento lo suficientemente representativo de cada clase considerada; se ha demostrado que estos representantes constituyen un parámetro con gran influencia en la calidad del agrupamiento, por lo que es uno de los aspectos que deben tratarse con mayor cuidado. Partiendo entonces de estos condicionantes iniciales, en cada ciclo o iteración del algoritmo se distribuyen los vectores de entrada (X_1, X_2,...X_m) entre las k clases siguiendo un criterio preestablecido basado en la menor distancia (normalmente euclídea), el cual matemáticamente puede expresarse como sigue:

$$X \in \alpha_j(n) \quad \Leftrightarrow \quad \left\| X - C_j(n) \right\| < \left\| X - C_i(n) \right\| \quad \forall i = 1,2,.....,k \mid i \neq j,$$

donde α_i especifica la clase a la que se asignará el elemento de entrada X, que será aquella para la cual la distancia euclídea entre el vector de entrada y su centroide sea mínima en el ciclo de ejecución n del algoritmo, y C_i será el centroide o elemento representativo de dicha clase.

Una vez que se han distribuido los vectores de entrada que se desea agrupar entre las diferentes clases, se calculan de nuevo con estos datos los centroides o elementos representativos de cada *cluster* dinámicamente, esto es:

$$C_j(n+1) = \frac{\sum_{x \in \alpha j(n)} X}{N_j(n)}, \ j = 1,2,.....,k,$$

donde $N_j(n)$ sería el número de elementos de entrada asignados a la clase α_j durante la iteración n. El proceso de asignación y cómputo de los centroides continúa hasta que se alcanza la condición de finalización, es decir, cuando no se produce ninguna redistribución de los vectores de entrada entre una iteración y la siguiente ($C_j(n+1) = C_j(n)\ \forall j = 1, 2,...k$), o bien cuando la variación entre centroides no supera un cierto umbral aceptable. En la figura 77 se muestra el organigrama completo del algoritmo K-medias; como el agrupamiento se suele producir de forma bastante rápida, es práctica común ejecutar este algoritmo múltiples veces con condiciones de inicialización diferentes y contrastar los resultados.

Durante los últimos años se han desarrollado diferentes variantes del algoritmo de agrupamiento *K-means*, entre las que cabe destacar su versión difusa o FCM (*Fuzzy C-means*) [Bezdek 1984], la cual permite que cada vector de entrada se sitúe en dos o más *clusters* al mismo tiempo mediante la especificación de un grado de pertenencia para cada uno de ellos; esta característica convierte a este algoritmo de *clustering* en una técnica idónea para tratar de determinar el tipo espectral de las estrellas según el sistema MK, ya que en muchas de ellas los catálogos aportan una clasificación dual, es decir, en algunas ocasiones los expertos no son capaces de decidir entre dos subtipos consecutivos y concluyen una clasificación basada de alguna forma en ambos (A9B0, F89, etcétera). El algoritmo de división de conjuntos FCM generaliza el K-medias y se basa en el método iterativo de Picard, aproximando el cálculo del error mínimo cuadrado de la siguiente función objetivo:

$$F = \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{k} (mf_{ij})^r \left\| X_i - C_j \right\|^2, \quad 1 \le r \le \infty, \ mf_{ij} \in [0,1], \ \sum_{j=1}^{k} mf_{ij} = 1 \ \forall j,$$

donde r es un factor de ponderación que debe ser mayor que 1, k es el número de clases deseadas, m el número de vectores de entrada que se precisa clasificar, mf_{ij} equivale al grado de pertenencia del elemento X_i a la clase α_j, C_j es el centroide de dicha clase y con $\| * \|$ se especifica cualquier condición que exprese la semejanza entre los datos de entrada y los centroides o elementos representativos de cada clase. De este modo la partición del conjunto de entrada se efectúa mediante la optimización iterativa de tal función, con la actualización sucesiva tanto de las funciones de pertenencia (mf_{ij}), como de los centroides (C_j) [Bezdek 2005].

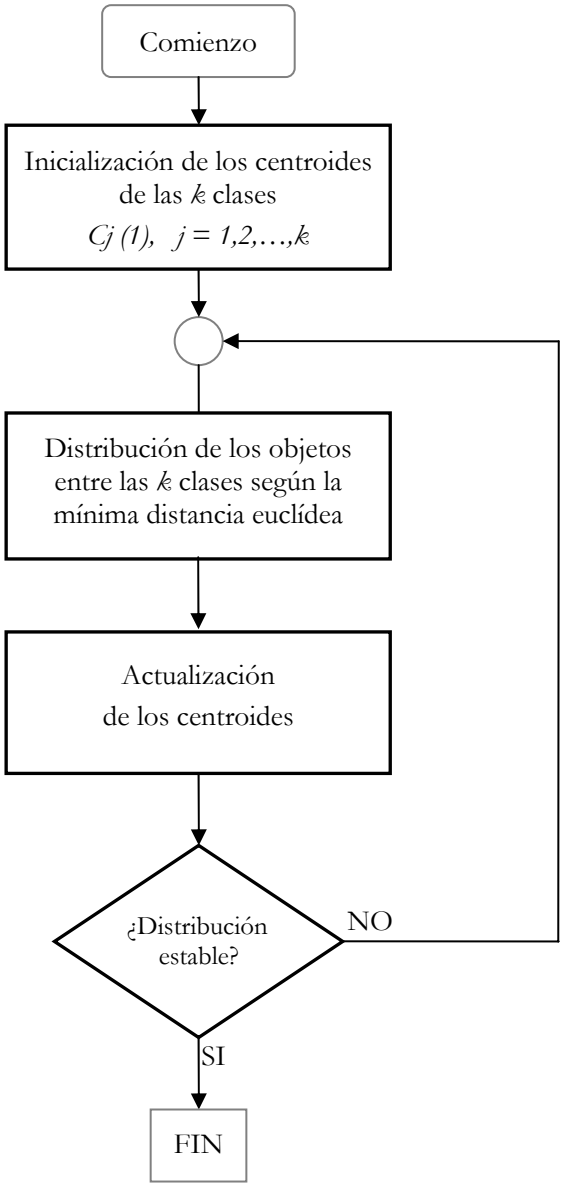


Figura 77. Organigrama de funcionamiento del algoritmo de agrupamiento *K-means*

Al igual que ocurría en la versión original *K-means*, en el algoritmo FCM se precisa conocer de antemano el número de clases (k) en que se va a dividir el conjunto inicial de datos de entrada y, aunque de nuevo los centroides iniciales pueden elegirse aleatoriamente, su funcionamiento es óptimo si se le proporciona tanto una muestra representativa de cada clase como el valor de pertenencia asociado para cada una de ellas. Así, los centroides iniciales podrían obtenerse combinando ambos en la forma:

$$C_j = \sum_{l=1}^{k} C_{inicial_l} \; mf_{inicial_{lj}}$$

4.6.3 Algoritmo ISODATA

El método ISODATA (acrónimo de la definición en lengua inglesa *Iterative SelfOrganizing Data Analysis Technique*) comparte con el algoritmo *K-means* el esqueleto básico de funcionamiento pero, como ya se indicó, incorpora una serie de parámetros heurísticos y estadísticos que posibilitan la realización de las operaciones de división o reunión de *clusters* en cada ciclo [Ball 1967]. Otra particularidad importante de esta variante que contrasta con la sencillez del algoritmo K-medias, es su naturaleza interactiva, ya que se obliga al usuario a participar activamente en el proceso de agrupamiento determinando ciertos umbrales para la subdivisión o unión de clases.

Así, en la primera etapa de este algoritmo es preciso adjudicar un valor inicial a los principales parámetros del mismo: número de clases que se forman en cada iteración, N_c (al que es conveniente asignarle inicialmente el número de clases k); centroides de dichas clases, C_j, que se escogen de forma aleatoria de entre los m vectores de entrada formándose con cada uno de ellos una de las clases iniciales; número mínimo de elementos de cada clase para constituirse como tal, θ_N; umbral de distancia para unir dos clases, θ_C; umbral de desviación típica para subdividir una clase en dos, θ_S; número máximo de fusiones entre clases que se pueden llevar a cabo en cada ciclo del algoritmo, L; y número máximo de iteraciones que se pueden completar o parámetro de finalización, I.

La distribución de los m elementos entre los N_c grupos formados en cada iteración se lleva a cabo siguiendo el mismo criterio de la mínima distancia euclídea que se empleaba en el algoritmo K-medias original. Asimismo, para la actualización de los centroides se utiliza también la media muestral de los vectores que constituyen cada clase. Sin embargo en este caso, en cada iteración del algoritmo se considera la posibilidad de subdividir aquellas clases, α_i, para las que se cumpla que su desviación típica máxima supere un cierto umbral ($\sigma_{maxj}>\theta_S$) y donde además se satisfaga alguna o ambas de las siguientes condiciones:

$$\overline{D_j} > \overline{D}, \quad N_j > 2(\theta_N + 1) \qquad (1)$$

$$N_c \leq k/2 \qquad (2)$$

$$\overline{D_j} = \frac{\sum_{i=1}^{N_j} \left\| X_i - C_j \right\|}{N_j}, \quad j = 1,2,.....,N_c, \quad \overline{D} = \frac{\sum_{j=1}^{N_c} N_j \overline{D_j}}{N_c}$$

La primera cláusula significa que la dispersión media de la clase candidata a dividirse en dos nuevas clases, α_i, debe ser superior a la media de las dispersiones de todas las clases y que, además, ésta está constituida por un número de miembros superior al doble del um-

bral mínimo de elementos necesarios para formar una clase, θ_N; la segunda condición hace referencia a que el número actual de clases debe ser menor o igual que la mitad de las clases que se estiman necesarias. Si se verifica alguno o ambos requisitos se inicia el procedimiento de división de clases, el cual básicamente consiste en la redistribución adecuada de los elementos de la clase en cuestión en dos nuevas subclases creadas a partir de los centroides C_{j+} y C_{j-}, derivados del centroide de la clase original (C_j) de forma que coincidan todas sus componentes excepto aquella de máxima dispersión, σ_{maxj}. Esto es:

$$C_{jq+} = C_{jq} + \gamma \sigma max_j$$
$$C_{jq-} = C_{jq} - \gamma \sigma max_j, \quad q = 1,2,....,p \quad 0 < \gamma \leq 1$$

Del mismo modo, si el número de grupos existentes en cada iteración supera al doble de las clases esperadas ($N_c \geq 2k$), se considerará la posibilidad de unificar algunas de ellas, en concreto las L representadas por centroides que se encuentren a menor distancia; el centroide de la nueva clase unión de las anteriores se calcula como sigue:

$$C_{ij} = \frac{(N_i C_i + N_j C_j)}{N_i + N_j},$$

donde N_i y N_j se corresponden con el número de muestras antes de la fusión de las clases α_i y α_j, respectivamente, y C_i, C_j con sus correspondientes centroides.

La figura 78 muestra el organigrama que permite entender el funcionamiento general del algoritmo de agrupamiento ISODATA.

4.6.4 Algoritmo Max-Min

El algoritmo de agrupamiento jerárquico Max-Min, inspirado en los métodos de análisis basados en distancias máximas y mínimas propuestos por S. C. Johnson, emplea como único elemento formal la distancia euclídea para comprobar en cada ciclo de ejecución la posibilidad de crear una nueva clase a partir de algún elemento que esté lo suficientemente alejado de las clases ya existentes, presentando así un carácter marcadamente heurístico [Johnson 1967].

Debido a su naturaleza jerárquica este algoritmo, a diferencia de los precedentes, no requiere ninguna información a priori respecto al número de clases en las que se desea agrupar los vectores de entrada. En primer lugar se escoge aleatoriamente un elemento individual de los m disponibles, por ejemplo X_i, para constituir una primera clase α_1, y a continuación se calculan las distancias euclídeas entre este vector y los m-1 vectores no

agrupados, tomándose la máxima distancia para formar una nueva clase con el elemento implicado, X_j. Esto es:

$$X_j \mid \max\{D_E(X_i, X_j)\}$$
$$D_E(X_i, X_j) = \sqrt{\sum_{k=1}^{p}\left(X_{ik} - X_{jk}\right)^2},$$

donde X_i y X_j se convierten en los centroides de las dos primeras clases creadas, es decir, α_1: $C_1 = X_i$ y α_2: $C_2 = X_j$.

Este método de análisis *cluster* está orientado fundamentalmente a crear (o no) una nueva clase en cada paso iterativo, calculándose para ello las distancias euclídeas mínimas a las clases ya existentes de manera que la máxima distancia entre ellas (que corresponde al elemento sin agrupar que está más alejado de una clase concreta, que a su vez es la clase más cercana a él) se compara con la distancia media entre las clases ya formadas para comprobar si es posible la creación de una nueva clase. Esto es, después de constituirse las dos primeras clases (α_1 y α_2), para cada vector X_k no agrupado se obtiene la pareja de distancias euclídeas a los centroides de las clases existentes, seleccionando de entre ellas la que sea mínima; de este conjunto de m-2 distancias mínimas se elige la distancia máxima, la cual se compara con la distancia entre centroides de las clases (X_i, X_i.) creándose una tercera clase si es superior a una determinada fracción de esta última. Matemáticamente este procedimiento podría expresarse como sigue:

$$\begin{aligned} &Dmin_k = \min\ \{D_E(X_k, C_1), D_E(X_k, C_2)\} \\ &Dmax\ = \max\ \{Dmin_k\} \qquad\qquad \forall k = 3,4,...,m \\ &\alpha_3 : C_3 \Leftrightarrow Dmax > f \cdot D_E(C_1, C_2), \qquad 0 < f < 1, \end{aligned}$$

donde f es un parámetro de entrada del algoritmo y, por tanto configurable, que equivale a la porción o fracción de la distancia entre centroides que debe superarse para formar una clase; el centroide de esta nueva clase creada será el elemento no agrupado al que le correspondía la distancia máxima anterior, D_{max}. El proceso de creación de clases continúa hasta que no se verifique la condición anterior, es decir, cuando ocurra que la distancia máxima perteneciente al elemento candidato para la creación de una nueva clase no supere la fracción necesaria de la distancia media entre todos los pares de centroides de las clases ya existentes hasta ese momento.

En la figura 79 se muestran, en forma de organigrama de funcionamiento, las distintas etapas de la operativa del algoritmo de agrupamiento Max-Min.

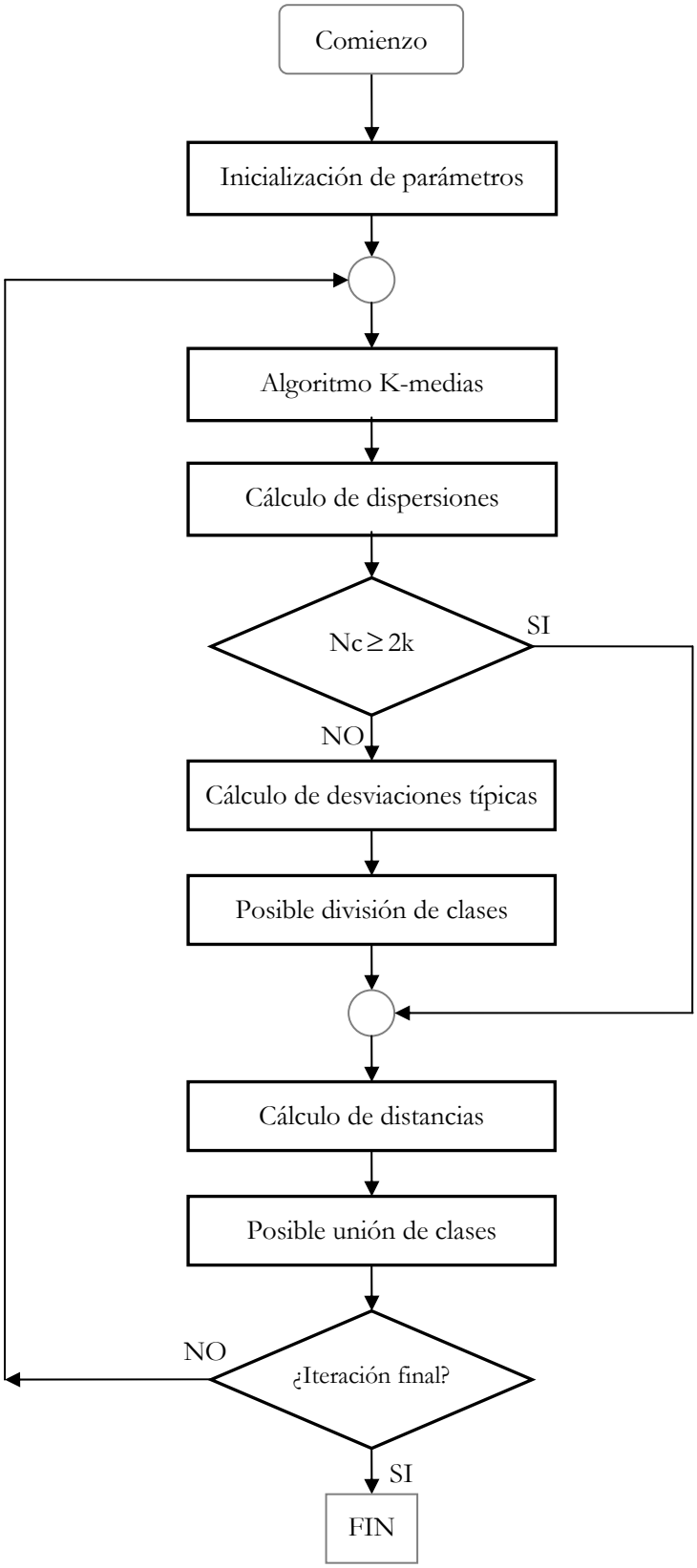


Figura 78. Organigrama de funcionamiento del algoritmo de *clustering* ISODATA

Uno de los inconvenientes principales de este algoritmo de agrupamiento es que es muy sensible al umbral de finalización del proceso de creación de clases (coeficiente f), por lo que es imprescindible una buena elección de este para el funcionamiento adecuado del mismo; por esta razón es recomendable realizar varios ciclos de ejecución ensayando sucesivos valores de este parámetro hasta que se obtenga una agrupación lo suficientemente adecuada. Además, a diferencia de lo que ocurre habitualmente en los algoritmos de *clustering* no jerárquicos (K-means, ISODATA, etc.) donde se trabaja con centroides o elementos representativos de cada clase que se recalculan en cada ciclo de ejecución, el algoritmo Max-Min mantiene siempre como prototipo de cada clase el primer vector asignado a la misma, el cual por otra parte es el que ha dado lugar a su creación.

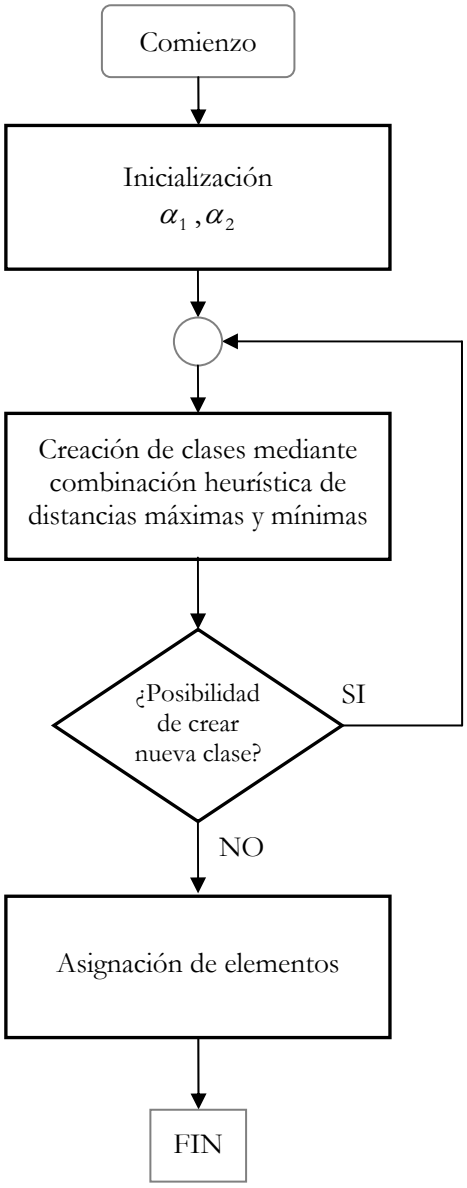


Figura 79. Organigrama de funcionamiento del algoritmo de *clustering* Max-Min

Para facilitar una comparación consistente del rendimiento alcanzado con este método y los precedentes, se ha diseñado una variante que actualiza dinámicamente los centroides de las clases en cada iteración; esta ampliación posibilita al mismo tiempo la realización de un estudio de la influencia de la elección de los centroides en la calidad del agrupamiento. El algoritmo Max-Min alternativo introduce la modificación fundamental en la elección del centroide de cada clase nueva que se va formando (según el procedimiento de creación de clases estándar del método original), ya que no se escoge el elemento correspondiente que ha provocado la creación de la clase, sino que se le asigna un centroide calculado previamente: se presupone que existe de este modo un representante preestablecido para cada una de las clases, que en el caso que nos ocupa estarían constituidas por los distintos tipos espectrales y niveles de luminosidad del sistema MK, y es este el que se asigna como centroide de la clase en lugar del elemento fundador de la misma; asimismo, cuando ya estén formadas todas las clases, se calculará la distancia de cada elemento que quede por agrupar con respecto a estos centroides (no al vector que mantiene hasta este momento cada clase como se realizaba en el algoritmo Max-Min estándar), y cada elemento se asignará a la clase para la cual dicha distancia sea mínima.

4.6.5 Fuzzy K-Nearest Neighbor (FKNN)

El algoritmo FKNN (*Fuzzy K-Nearest Neighbor*) constituye, como su propio nombre ya indica, una variante difusa de los algoritmos de agrupamiento del vecino más cercano (KNN o *hard* KNN) [Keller 1985], los cuales se basan en la determinación de la pertenencia de cada vector de entrada a las diferentes clases a través del estudio de la distancia a un conjunto de muestras representativas de las mismas; de este modo, cada elemento de entrada se asocia a la clase a la que pertenezca la muestra más similar a él de entre las k más próximas (vecinos). Además de conocer a priori el número de clases en las que se va a dividir el conjunto de datos que se pretende clasificar, este algoritmo precisa también que se le proporcione como parámetro de entrada el conjunto de muestras prototípicas de cada clase, el cual obviamente debería incluir al menos tantos elementos como vecinos se consideren.

En la versión difusa (FKNN o *fuzzy* KNN) la determinación de la pertenencia de los vectores de entrada se establece con respecto a todas las clases posibles: en lugar de asociar cada vector estrictamente a una clase, se calcula la función de pertenencia de dicho elemento a las distintas clases existentes. El conjunto de muestras representativas de cada clase que son necesarias para el correcto funcionamiento de este tipo de algoritmos también ha de estar clasificado de forma difusa, es decir, cada muestra debe tener asociado un grado de pertenencia a cada uno de los *clusters* considerados; además estas muestras deben

proporcionarse externamente, por lo que desde esta perspectiva se podría incluir a esta familia de algoritmos dentro del aprendizaje supervisado. Así, con el propósito de establecer los k vecinos más próximos a cada uno de los m vectores de entrada que se desea agrupar se obtienen las distancias que los separan del conjunto de muestras representativas de cada clase, a partir de las cuales se calculan los grados de pertenencia de dichos elementos a cada una de ellas considerando tanto la distancia de cada vector a todos sus vecinos, como el grado de pertenencia de cada uno de estos vecinos a las clases objetivo. Esto es:

$$mf_j(X) = \frac{\sum_{i=1}^{k} mf_{ji}\left(\frac{1}{\|X - X_i\|^{\frac{2}{n-1}}}\right)}{\sum_{i=1}^{k}\left(\frac{1}{\|X - X_i\|^{\frac{2}{n-1}}}\right)},$$

donde $mf_j(X)$ representa el grado de pertenencia a la clase j del elemento que se desea clasificar, X, mientras que mf_{ji} equivale al grado de pertenencia de la muestra prototípica i a la clase j (que en muchos casos será 0); X_i se corresponde con una de las k muestras más próximas al elemento que se desea clasificar y finalmente n es un factor de ponderación de la distancia del vector X a las muestras.

Aunque en esta técnica de agrupamiento es necesario un nivel de supervisión mayor que en las precedentes, pues es preciso seleccionar y proporcionar al algoritmo las muestras prototípicas de cada clase, una de sus ventajas principales es que permite establecer una medida de la confianza en los resultados obtenidos. De este modo, si por ejemplo uno de los elementos que se desea clasificar obtiene un grado de pertenencia de 0.85 a la clase A, 0.05 a la clase B y 0.1 a la clase C, la seguridad de su pertenencia al primer grupo es mayor que si se obtuviese un resultado discreto (pertenece o no al conjunto A); en cambio, si después del agrupamiento se obtiene un grado de pertenencia de 0.5 a la clase A, 0.45 a la clase B y 0.05 a la clase C, no se podría asegurar su pertenencia a las clases A o B, pero sí se podría afirmar con bastante confianza que dicho elemento no pertenece a la clase C. La figura 80 muestra el organigrama de funcionamiento general del algoritmo de agrupamiento difuso FKNN.

4.6.6 Implementación de los algoritmos

Los distintos algoritmos estadísticos de agrupamiento, cuyas bases teóricas se presentaron en los epígrafes precedentes, se han adaptado convenientemente al proceso de clasificación estelar automática mediante el desarrollo de versiones apropiadas implementa-

das, como ya se ha indicado, en el entorno *Matlab* 7.10 e integradas posteriormente dentro del módulo de clasificación del sistema global de tratamiento de espectros estelares. En esta sección se describe el proceso completo de diseño e implementación de los diferentes algoritmos de *clustering* que permitirán clasificar los espectros ópticos de las estrellas en el sistema bidimensional MK.

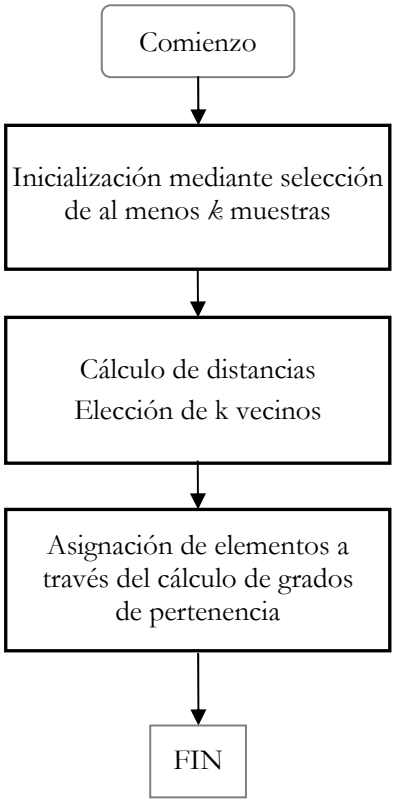


Figura 80. Organigrama de funcionamiento del algoritmo de *clustering* FKNN

Entre las funcionalidades especiales con las que cuenta el software *Matlab*, disponibles a través de diferentes paquetes dedicados, se encuentra el *Statistics Toolbox*, utilidad que combina poderosos algoritmos estadísticos para realizar cálculos intensivos desde un punto de vista numérico con interfaces gráficas de visualización avanzada; el conjunto de funciones de aplicación incluidas en este paquete concreto permiten aplicar métodos estadísticos comunes de forma fácil y consistente a través de despliegues gráficos interactivos, al mismo tiempo que el propio lenguaje de alto nivel de *Matlab* (basado en vectores y matrices) ofrece la posibilidad de desarrollar las funciones necesarias para acomodar las versiones estándares de los algoritmos de análisis *cluster* a la automatización de la clasificación de las estrellas. Estos procedimientos estadísticos propios, derivados de las funciones predefinidas y escri-

tos en código *Matlab* (ficheros con extensión .m o *M-files*), se convertirán de manera automática mediante el compilador integrado (*the Matlab Compiler*) y la librería matemática (*the Matlab C Math Library*) en código C optimizado y ejecutable en forma de aplicaciones independientes (*stand alone*): todo el proceso de conversión, compilación y enlazado (tanto con la librería matemática como con cualquier tipo de programas específicos definidos previamente) se inicia a través de una simple instrucción, ahorrándose así por lo tanto el alto consumo de tiempo asociado habitualmente a la traducción manual de código.

ALGORITMO K-MEANS (k=6)

Clase 1: 5 espectros tipo M, 3 espectros tipo F, 20 espectros tipo K

m1i (-6.77), f2iii (-5.32), k0iv (1.72), k1iv (3.41), k3i (4.82), k3v (3.48), k5iii (-5.2), m1i (-6), f2ii (3.27), f8iv (-3.28), m4v (2.45), k1iii (5.24), k2iii (3.53), k3iv (1.83), k4i (5.73), k7v (4.22), m6i (3.67), m4iv (-5.41), k1v (2.41), k3iii (2.4), k4v (1.74), k6i (-1.4), k0i (-3.6), k2i (-2.9), k9v (2.75), k1ii (1.2), k5v (5), k5i (1.2), k1i (1.5), k8iv (1.25)

Clase 2: 24 espectros tipo F, 5 espectros tipo A, 3 espectros tipo G

f3i (7.48), f3iv (2.24), f3v (3.94), f4i (6.23), f4iii (1.56), f4v (2.82), f5i (6.05), f5ii (4.22), f5iii (3.31), f5v (3.40), f6i (6.43), f6iii (5.93), f1ii (1.23), f2v (1.56), f6iii (3.4), f5i (1.3), f9i (-2.5), a2ii (-2.4), g1i (2.4), a6iii (2.68), f9i (1.42), f6iii (-4.22), f2i (1.67), f8v (1.78), g0i (6.4), f8v (3.59), f8v (1.57), f3i (1.96), a01 (-1.45), a4v (4.67), a9i (3.23), g2iii (6.45), f9i (5.6), f7iii (6.75), a9i (3.24), f8i (4.69)

Clase 3: 18 espectros tipo M, 1 espectro tipo G

m3ii (4.76), m4iii (7.10), m5iii (4.50), m7ii (5.20), m3iii (3.57), m4iii (4.54), m5iii (4.06), m6iii (5.84), m7iii (6.85), m0i (6.5), m2i (1.37), m0iii (4.22), m6i (-2.1), m5v (-5.4), m4iii (4.54), m5iii (4.06), m6iii (5.84), m7iii (8.85), g9v (7.89), m7iii (3.68), m2i (3.6)

Clase 4: 27 espectros tipo B, 2 espectros tipo A

b0v (5.67), b1iii (3.55), b2i (3.12), b2ii (4.69), b2iii (6), b1i (-5.78), b3i (2.92), b3iii (6.11), b3v (7.24), b4iii (7.25), b4v (6.43), a9i (6.5), b8v (1.24), b5i (3.41), a0v (2.58), b5iii (3.04), b7i (4.03), b8i (4.80), b6iii (1.67), b2ii (6.13), b9iii (2.56), b9v (-2.80), b1i (3.17), b1i (1.75), b4i (1), b7i (-3.46), b3i (4.67), b9i (1.23), b1v (-3.4), b1v (4.78), b5i (3.56)

Clase 5: 16 espectros tipo A, 3 espectros tipo B

a4v (2.42), a5iii (-4.61), a5iv (6.89), a3i (5.2), a5v (1.24), a0i (5.38), a1ii (4.65), b1v (-4.3), a2i (4.12), a3i (1.9), b8i (2), a2i (5.3), a3iii (1.51), a9i (1.56), a8i (-3.75), b5v (4.3), a9iii (6.21), a5v (1.3), a3v (6.1), a3i (3.6)

Clase 6: 26 espectros tipo G, 2 espectros tipo F, 3 espectros tipo K

g0v (1.23), g2i (1.47), g2iii (2.46), g5v (1.97), g8v (3.87), g0i (2.4), g9v (2.29), g6ii (1.69), g2iii (1.42), g0iii (4), g9iv (6.12), g8i (1.2), g5i (2.32), g2ii (5.41), f9v (3.45), g8v (-1.3), g9i (6.09), g8v (1.34), g1i (5.32), g7i (2.57), g0i (1.35), g3i (5.7), g8iv (2.75), g0i (1.37), k1i (3), g0i (3.46), g5i (3.67), g9i (2.89), f5v (7.1), k0i (1.45), k2i (2.45), g9i (3.5), g0i (3)

Figura 81. Ejemplo de resultados del agrupamiento en clases para el tipo espectral (en negro) y de la clasificación de nuevos espectros (en azul) mediante el algoritmo de *clustering K-means* en su versión estándar (sin selección previa de centroides), utilizando patrones de entrada formados por índices espectrales y considerando 6 clases iniciales

A partir de cada uno de los espectros procedentes de los catálogos principales de referencia (158 espectros seleccionados para propiciar el correcto funcionamiento de cada algoritmo durante la fase de diseño y 100 espectros de evaluación destinados a comprobar la excelencia de la clasificación con cada técnica de agrupamiento específica) [Silva 1992] [Pickles 1998] [Jacoby 1984], se han construido siete patrones o vectores de entrada para cada dimensión del sistema MK (temperatura y luminosidad): el primero de ellos almacena los espectros completos, el segundo se corresponde con los valores de flujo de algunas zonas espectrales relevantes (3900-4900 Å para estrellas tempranas, 3900-5500 Å para intermedias y 4800-7200 Å para las tardías), en el tercero se recoge el conjunto de 25 índices espectrales resultantes del proceso previo de análisis de sensibilidad, y en los cuatro restantes se incluyen diferentes subconjuntos del conjunto anterior (concretamente una selección de 23, 22, 21 y 16 parámetros de clasificación). Estos patrones en forma de diferentes vectores de características son los que se proporcionan como entrada a los diferentes algoritmos implementados para realizar el agrupamiento de los datos y la posterior evaluación de su rendimiento. De este modo, como paso previo a de la ejecución de la función específica desarrollada para cada técnica de *clustering*, se ofrece al usuario final a través de menús la posibilidad de elegir entre llevar a cabo la agrupación (definición de las clases) con un determinado algoritmo o clasificar los espectros del conjunto de evaluación a partir de los *clusters* definidos durante una ejecución anterior.

En la opción de establecimiento de las diferentes clases, es decir, durante la fase de agrupamiento, es preciso especificar de forma externa el algoritmo que se desea ejecutar y proporcionar a la aplicación los parámetros de entrada necesarios para el correcto funcionamiento del mismo: *K-means* estándar (número de clases), *K-means* con elección explícita de centroides iniciales (número de clases y espectros representativos de cada tipo espectral y/o clase de luminosidad), FCM (número de clases, espectros representativos de cada tipo espectral y/o clase de luminosidad y funciones de pertenencia de los mismos a las distintas clases), Max-Min en su versión original (parámetro f o fracción de la distancia entre centroides que es necesario superar para formar una nueva clase), Max-Min con la modificación basada en la actualización de centroides (parámetro f y espectros representativos de cada tipo espectral y/o clase de luminosidad), ISODATA (número de clases, θ_N o número mínimo de elementos de cada clase, θ_C o umbral de distancia para unir dos clases, θ_S o umbral de desviación típica para subdividir una clase en dos, L o número máximo de fusiones entre clases admitidas en cada ciclo e I o número máximo de iteraciones permitidas), FKNN (número de clases, parámetro k o número de vecinos, y un conjunto de al menos k espectros representativos de cada uno de los tipos espectrales y/o clases de luminosidad con sus correspondientes grados de pertenencia). Asimismo, también es necesario indicar el tipo de patrones de entrada especificando si se va a llevar a cabo el agrupamiento en función del espectro completo, de algunas zonas de interés o de un subconjunto de parámetros

espectrales formado por 25 índices espectrales (conjunto completo recogido en la tabla 4 de la sección 4.1), 23 (conjunto anterior eliminando el índice 24 que se corresponde con la suma de bandas secundarias, y la banda molecular situada en 7100 Å o índice 9), 22 (suprimiendo además de los índices anteriores el parámetro 8 equivalente a la banda de óxido de titanio ubicada en 6745 Å), 21 (prescindiendo de los tres índices indicados anteriormente y de la línea HI_α en 6563 Å correspondiente al índice 17) ó 16 índices espectrales (conjunto de parámetros de la tabla 4 no resaltados con *, los cuales se corresponden con las características espectrales observables dentro del rango del catálogo secundario de referencia).

Una vez que se han realizado las elecciones iniciales correspondientes al tipo de algoritmo y vectores de entrada, se leen los ficheros que contienen los espectros que se van a emplear en el agrupamiento y se lleva a cabo la ejecución del algoritmo en función de los parámetros proporcionados; al finalizar la misma, se mostrará la distribución en clases lograda mediante la visualización de los vectores (espectros) que se han ubicado en cada *cluster*, las distancias de cada uno a su centroide (o vector representativo de la clase, si existiese) y el número de espectros de cada tipo que contiene cada clase. La figura 81 recoge un ejemplo de los resultados obtenidos al efectuar la agrupación de los espectros de entrada mediante el algoritmo *K-means* con 6 clases, una por cada tipo espectral MK considerado.

Después de visualizar los resultados obtenidos con el algoritmo seleccionado, es posible conservar la distribución de clases generada para que posteriormente pueda ser recuperada y utilizada de nuevo en la clasificación de otros espectros de acuerdo a este agrupamiento; si se selecciona esta opción, se almacenará una matriz multidimensional con las distintas clases y sus correspondientes elementos, así como el tipo de patrones empleado y el valor de los diferentes parámetros de entrada proporcionados para esa ejecución concreta del algoritmo de agrupamiento.

Cuando se pretende llevar a cabo la clasificación de espectros estelares basándose en un agrupamiento en clases previo (obtenido en una ejecución anterior), es preciso indicarle a la aplicación tanto el algoritmo de *clustering* (*K-means*, ISODATA, Max-Min, etc.), como el número de clases y el tipo de patrones empleados (espectro completo, zonas espectrales, 25 índices espectrales, etcétera). Con esta información se está en condiciones de recuperar el fichero de configuración del algoritmo correspondiente y de dar comienzo al proceso de clasificación estelar, el cual en este punto consiste básicamente en emplazar cada vector de entrada en aquella clase para la que la distancia a su centroide o elemento representativo (tal y como se calculó durante la ejecución previa) sea mínima. En el momento en que finaliza el proceso de asignación anterior, se visualiza de nuevo la distribución en clases recuperada (los espectros de cada clase y el número de espectros de cada tipo) añadiendo ahora los espectros del conjunto de evaluación que acaban de ser clasificados, tal y como se muestra en azul en la figura 81; en las variantes difusas de los algoritmos

de *clustering* se proporcionará además una estimación de la confianza en la clasificación ofrecida, en forma de probabilidad o grado de pertenencia de cada espectro a la clase en la que se ha ubicado.

La clasificación MK obtenida con los diferentes métodos de análisis *cluster* implementados se muestra, junto con la medida de la probabilidad si está disponible, a través de la interfaz de la aplicación de análisis espectral. Una vez finalizada la etapa de diseño y experimentación preeliminar con los diferentes algoritmos estadísticos de *clustering* descritos, las configuraciones que lograron una agrupación en clases óptima se trasladaron, como ya se ha indicado, a código C automáticamente mediante el compilador y la librería matemática integrados en *Matlab*; estas herramientas proporcionan directamente archivos .c (con sus correspondientes cabeceras .h) fácilmente integrables en el sistema de procesamiento de espectros estelares desarrollado en *Builder C++*.

En la figura 82 se muestran las opciones correspondientes a las diferentes alternativas de clasificación mediante algoritmos de agrupamiento que se han incluido en la interfaz final de usuario del módulo de análisis. A través de los menús situados en la parte superior de la misma es posible seleccionar el método de clasificación, los espectros que se desea clasificar, el tipo de agrupamiento, los parámetros de control de los algoritmos, el tipo de patrones de entrada, el número de *clusters*, etc.; la clasificación MK de los espectros y su probabilidad asociada se muestran de nuevo, tal y como se observa en la figura, en la parte inferior de la interfaz del sistema de tratamiento de espectros estelares.

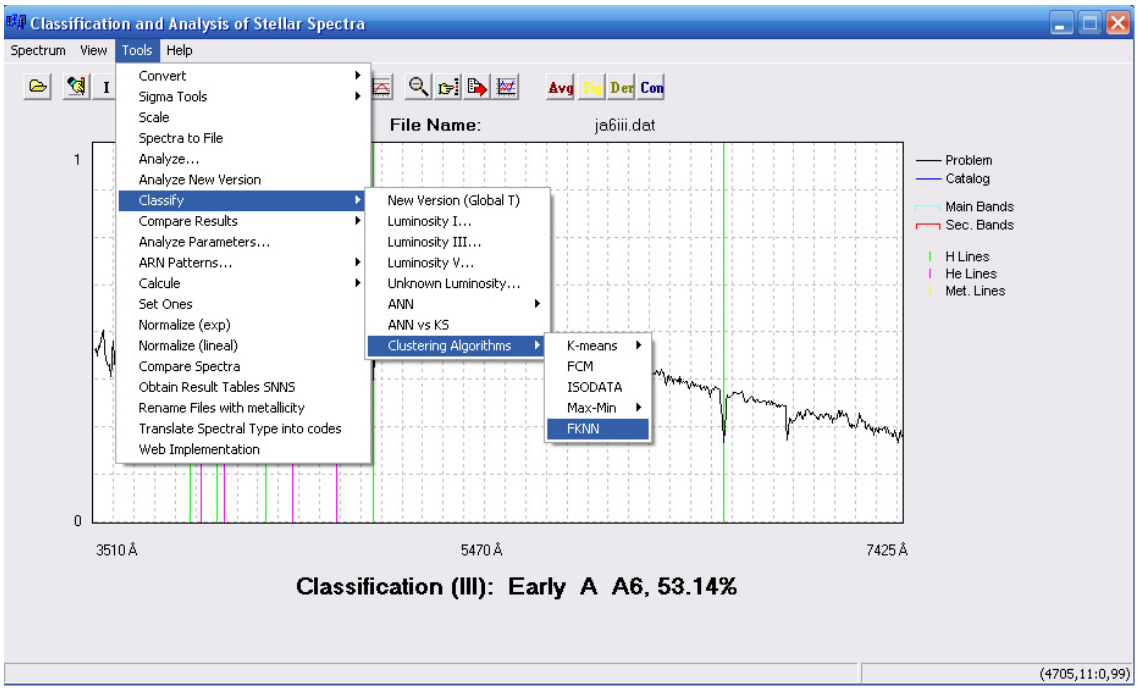


Figura 82. Implementación en C++ de los algoritmos de *clustering* para la clasificación en tipo y luminosidad

4.6.7 Evaluación de rendimiento y análisis de resultados

En este epígrafe se llevará a cabo un estudio completo del rendimiento y peculiaridades de los resultados obtenidos sobre los espectros de prueba con los algoritmos estadísticos de agrupamiento implementados para abordar la clasificación estelar automática; este conjunto de evaluación está formado por los 100 espectros ópticos que no se escogieron para realizar la agrupación previa en clases con las diferentes técnicas de *clustering*, cuya distribución en tipos espectrales y niveles de luminosidad es la que se ha incluido ya en las tablas 39 y 40 (v. sec. 4.6.1).

La mayor parte de los procedimientos que se utilizan habitualmente para efectuar la validación de las técnicas de agrupamiento son o bien de tipo analítico o bien pertenecen a la vertiente empírica. Los métodos analíticos examinan las propiedades y principios de los algoritmos con el objeto de predecir su comportamiento (máximo error esperado, estimación del error medio, etc.); los métodos empíricos, en cambio, juzgan la calidad de cada algoritmo a través de la observación y medición de su rendimiento sobre un conjunto de elementos de prueba, bien sea mediante la verificación de los resultados con diferentes parámetros de idoneidad (técnicas de bondad) o bien a través de la comparación de las salidas proporcionadas con alguna referencia de lo que constituiría la salida esperada o ideal (técnicas de discrepancia) [Zhang&Benveniste 1992].

El esquema utilizado para evaluar la eficacia de los procedimientos de *clustering* estadístico desarrollados para automatizar la clasificación estelar se encuadra dentro de los métodos de validación empírica por discrepancia, ya que su mecánica consiste fundamentalmente en comparar las estimaciones del tipo espectral y clase de luminosidad obtenidas por los diferentes algoritmos con la clasificación ideal o esperada proporcionada por los catálogos de referencia. Entre las posibles medidas del rendimiento que se podrían considerar, la más fiable y extendida en uso es el porcentaje de acierto por *cluster*, el cual se halla a partir del número de espectros pertenecientes a cada *cluster* que se han asignado correctamente a la clase a la que deberían pertenecer; el número de espectros asignados a otros *clusters* aporta el porcentaje de error para cada uno de ellos. Es decir, suponiendo que se dispone de k clases o *clusters* iniciales, esta medida de validación por discrepancia se podría desglosar en los kxk valores correspondientes a los coeficientes C_{ij}, que representan el número de espectros que se han clasificado dentro del *cluster* i cuando realmente pertenecen al *cluster* j; de este modo, el número total de espectros clasificados correctamente se podría obtener mediante la suma de aquellos coeficientes C_{ij} para los que coincida el valor de los índices i y j, pues se corresponderían con espectros clasificados dentro del *cluster* al que en realidad pertenecen. Si se estructurase la información aportada por esta medida de discrepancia de forma espacial, el resultado sería una matriz kxk muy similar a las matrices de confusión

[Kohavi 1998] manejadas en el análisis de resultados de las técnicas de clasificación desarrolladas previamente.

Así, con el objetivo de efectuar un análisis minucioso del rendimiento de esta técnica computacional en la clasificación bidimensional de las estrellas, se evaluarán los distintos algoritmos de *clustering* descritos (K-medias estándar y con selección previa de centroides, FCM, ISODATA, Max-Min estándar y con actualización dinámica de centroides y FKNN) a partir de configuraciones en las que se han incluido para el tipo espectral 3 (tempranas, intermedias, tardías) y 6 clases iniciales (B, A, F, G, K, M); para el subtipo espectral 30 *clusters* iniciales (cinco por cada tipo espectral, abarcando cada uno de ellos dos subtipos consecutivos: 0-1, 2-3, 4-5, 6-7, 8-9) y 60 grupos iniciales (comprendiendo los subtipos habituales 0-10 para cada tipo); y finalmente 3 (I, II-III, IV-V) y 5 (I, II, III, IV, V) clases iniciales para el nivel de luminosidad. El análisis comparativo del rendimiento alcanzado con las diferentes variantes adaptadas de los algoritmos de agrupamiento permitirá determinar los casos o supuestos de clasificación en los que sería más conveniente utilizar cada una de las técnicas consideradas.

Al igual que en la validación de los desarrollos previos efectuados con otras técnicas, se seguirá la estrategia de valoración de resultados que tiene en cuenta a la hora de determinar las tasas de acierto descritas la holgura de ±1 subtipo espectral que acostumbran a permitir los expertos cuando efectúan la evaluación de sus propias clasificaciones mediante la técnica tradicional. En este sentido, si el agrupamiento sitúa a un espectro en el grupo inmediatamente superior o inferior al que le correspondería (subtipos consecutivos), la clasificación se considerará consistente con la proporcionada por el catálogo de referencia y, por tanto, correcta; por el contrario, en la determinación de las clases de luminosidad solamente se considerará válido el agrupamiento que incluya a cada espectro exactamente en el grupo correspondiente al nivel de luminosidad coincidente con el que se especifica en el catálogo de referencia.

En la figura 83 se muestran los resultados obtenidos en los diferentes niveles de clasificación (tipo, subtipo y luminosidad) con los algoritmos estadísticos de *clustering* utilizando los valores de flujo energético del espectro completo para formar los patrones de entrada; la figura 84 contiene la comparativa del rendimiento de estos algoritmos para la opción que incluye como vectores de entrada las medidas del flujo espectral en determinadas zonas de interés (3900-4900 Å para estrellas B-A, 3900-5500 Å para los tipos F-G y 4800-7200 Å para los tardíos K-M); y finalmente en la figura 85 se recoge el análisis de resultados para el caso que considera el conjunto completo de 25 índices de clasificación como patrones de entrada de los algoritmos.

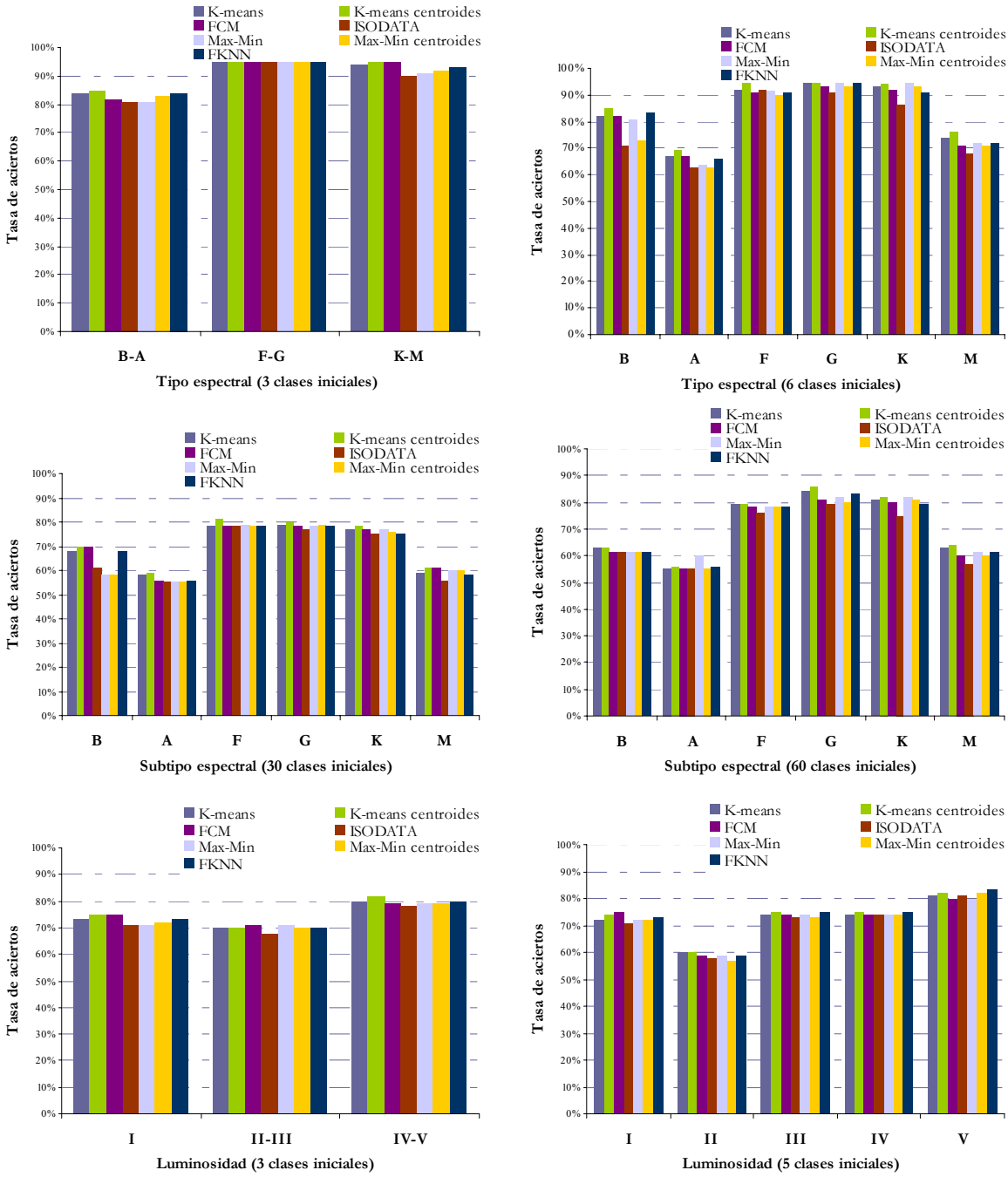


Figura 83. Análisis del rendimiento de los algoritmos de *clustering* para la clasificación en tipo espectral (3 y 6 clases iniciales), subtipo espectral (30 y 60 clases iniciales) y luminosidad (3 y 5 clases iniciales) utilizando espectros completos como patrones de entrada

Considerando de forma global estos resultados se observa que para clasificar las estrellas tanto en temperatura (tipo y subtipo espectral) como en luminosidad, parecen más adecuados los algoritmos basados en la división inicial del conjunto de datos de entrada o *Partitioning Clustering* (*K-means*, FCM, ISODATA, etc.) que aquellos que generan las clases de forma jerárquica en sucesivos ciclos de ejecución (Max-Min), independientemente de que

se haya realizado el agrupamiento a partir de vectores de entrada formados por los valores de flujo del espectro completo, de unas zonas espectrales específicas o de un conjunto de índices de clasificación.

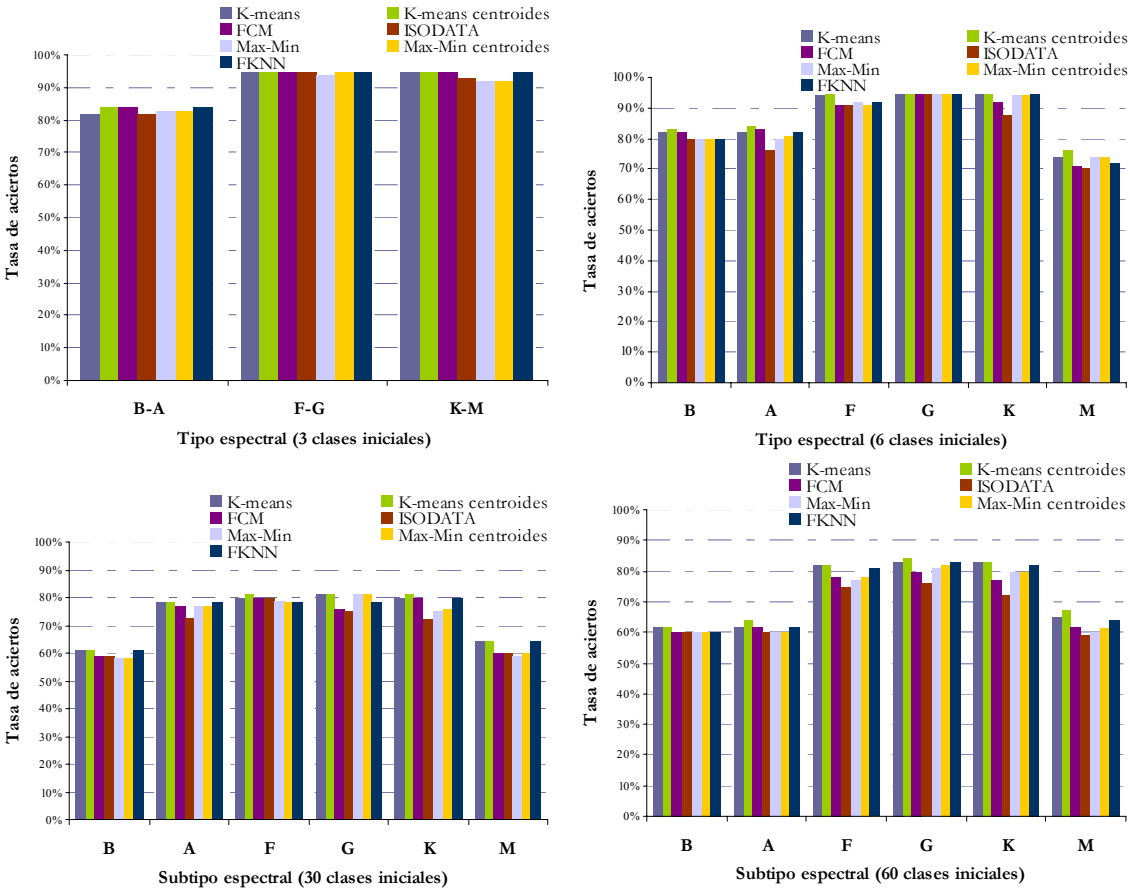


Figura 84. Análisis del rendimiento de los algoritmos de *clustering* para la clasificación en tipo espectral (3 y 6 clases iniciales) y subtipo espectral (30 y 60 clases iniciales) utilizando zonas espectrales relevantes como patrones de entrada

El algoritmo *K-means* presenta unas tasas de acierto en tipo espectral superiores al 80% para prácticamente todos los tipos (84%-89%), y por encima del 70% para el subtipo espectral y la clase de luminosidad (72-76%), mejorando incluso estas en la versión que utiliza espectros predeterminados como representantes iniciales de las clases (centroides), seleccionados antes de la ejecución de los algoritmos de acuerdo con el equipo de expertos en Astrofísica. El algoritmo ISODATA, similar al K-medias pero con la incorporación de la posibilidad de unir o dividir clases en cada paso iterativo, obtiene un rendimiento inferior en la mayoría de los grupos (en torno al 7% de descenso en el peor caso), mientras que en el algoritmo jerárquico Max-Min si bien la tendencia general es también al descenso en la tasa de éxito con respecto a la familia de algoritmos *K-means*, en algunos grupos concretos (por ejemplo con el espectro completo en subtipos de los tipos espectrales A y K agrupa-

dos a partir de 60 clases iniciales) proporciona una clasificación más acorde con la referencia que los anteriores; la versión alternativa del algoritmo Max-Min, que incorpora la actualización dinámica de los centroides en cada ciclo de ejecución, no introduce grandes cambios en la determinación del tipo espectral y la luminosidad estelares (incremento de la tasa de éxito en un 2% en el mejor de los casos), lo que indica que posiblemente la elección de algunos de los representantes iniciales de los *clusters* puede no haber sido la más adecuada. En cambio, en el algoritmo *K-means*, la selección a priori de muestras prototípicas en lugar de la elección aleatoria de las mismas parece concordar con la lógica subyacente en el proceso de clasificación, pues esta modificación (denominada en las gráficas *K-means* con centroides) iguala o supera el rendimiento obtenido con la versión original en todos los supuestos de clasificación, presentando en algunos casos un aumento de la tasa de éxito en torno al 5%.

Los algoritmos de *clustering* que integran lógica difusa (FCM y FKNN) obtienen unas tasas de acierto muy similares a las anteriores, superando en muchas ocasiones el rendimiento alcanzado utilizando los métodos Max-Min o ISODATA para llevar a cabo la división en tipos espectrales y clases de luminosidad. Además, la clasificación mediante algoritmos que incorporan funciones de pertenencia aporta la ventaja adicional de acompañar los resultados obtenidos de una estimación de la probabilidad de que cada espectro pertenezca realmente a la clase que se le ha asignado durante el agrupamiento; asimismo, en los casos en los que esta medida de la confianza asociada no supera cierto umbral (54%) se proporciona una clasificación alternativa a la principal, tratando de emular mediante este procedimiento el comportamiento que se sigue en la técnica tradicional de clasificación cuando se presentan situaciones en las que no es posible decidir entre dos clasificaciones consecutivas, optándose entonces por la asignación de una clasificación mixta (B9A0 V, K7 II-III, etc.)

La clasificación basada en 3 *clusters* iniciales puede interpretarse como una división preeliminar de las estrellas (tempranas, intermedias y tardías), tal y como se realizaba en el primer nivel de clasificación de las técnicas desarrolladas anteriormente y, de hecho, el rendimiento alcanzado con esta configuración (en torno al 90% para todos los grupos espectrales) es comparable al obtenido con aquellas.

La determinación del subtipo espectral partiendo de 30 clases iniciales podría entenderse como la incorporación directa dentro de la clasificación del criterio de holgura de ±1 subtipo que se considera tradicionalmente en la valoración de los resultados, es decir, cada tipo espectral estará constituido por 5 subtipos en lugar de 10, abarcando cada uno de ellos dos de los subtipos originales consecutivos; en algunos tipos espectrales (como por ejemplo B y F realizando el agrupamiento con espectros completos, el tipo A llevándolo a cabo con zonas de interés o los tipos B, A, F y G con índices espectrales) la capacidad de

discriminación en subtipos de esta configuración es mayor que si se emplean 60 clases iniciales en el agrupamiento (10 subtipos por cada uno de los 6 tipos espectrales), ya que una gran parte de los errores en la clasificación ocurren debido a la confusión entre subtipos consecutivos (problema de bordes), la cual se evitaría en gran medida agrupándolos de dos en dos dentro de cada tipo espectral tal y como se hace en esta configuración con 30 clases iniciales.

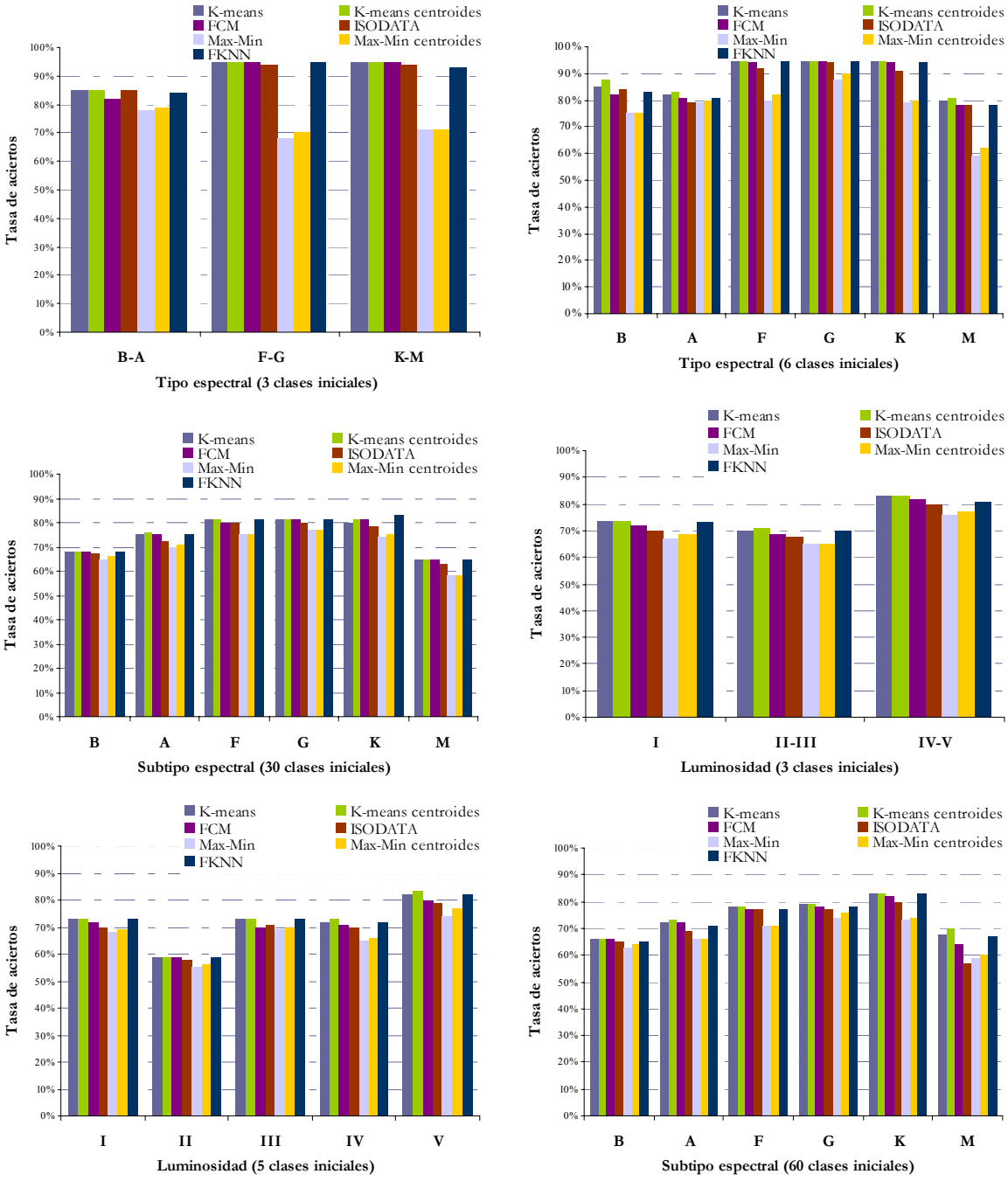


Figura 85. Análisis del rendimiento de los algoritmos de *clustering* para la clasificación en tipo espectral (3 y 6 clases iniciales), subtipo espectral (30 y 60 clases iniciales) y nivel de luminosidad (3 y 5 clase iniciales) utilizando un conjunto de 25 índices espectrales como patrones de entrada

Un análisis más detallado de los resultados revela que se produce de nuevo con esta técnica una correlación entre la tasa de éxito alcanzada y la composición y tamaño del conjunto de espectros con los que se ha llevado a cabo la agrupación pues, independientemente del número de clases iniciales, del tipo de patrones y del algoritmo utilizado, son las clases que incluyen un mayor número de representantes y una distribución más homogénea (tipos espectrales F, G y K, y clases de luminosidad I, III y V) las que invariablemente presentan unas tasas de acierto finales más elevadas (en torno al 80% para el subtipo espectral y alrededor del 75% para el nivel de luminosidad). Es preciso indicar también que con esta técnica computacional de clasificación tampoco se lograría mejorar significativamente los resultados obtenidos en desarrollos anteriores para los tipos A y F, es decir, no ha sido posible gestionar satisfactoriamente la confusión clásica debida al problema de degeneración de la temperatura superficial de las estrellas con la metalicidad de su espectro óptico.

La clasificación basada en la elección de unas regiones espectrales concretas y relevantes para cada uno de los grupos genéricos de estrellas (200 valores de flujo comprendidos entre las longitudes de onda 3900 Å y 4900 Å para las estrellas tempranas, 320 valores correspondientes al intervalo de 3900 Å a 5500 Å para las intermedias, y 480 muestras entre 4800 Å y 7200 Å para las tardías), consiguió incrementar significativamente la tasa de éxito (más de un 20%) en la determinación del tipo y subtipo espectral para las estrellas de tipo A (especialmente partiendo de 30 clases iniciales), lo cual indica que en este tipo espectral la inclusión en el vector de características de los valores de flujo del espectro completo no solamente no aporta una ventaja cuantificable sino que entorpece la clasificación; otros tipos espectrales, como por ejemplo el G o el K, obtuvieron también un mejor rendimiento con esta composición de los patrones de entrada, si bien el incremento en la tasa de acierto no fue tan espectacular (alrededor del 3% en las mejores configuraciones). En la figura 84 no se incluye la clasificación en luminosidad debido a que las zonas espectrales seleccionadas para formar los vectores de entrada están referidas específicamente al tipo espectral, pues en la otra dimensión del sistema MK se suele llevar a cabo la clasificación teniendo en cuenta el espectro completo para los diferentes niveles de luminosidad; estas regiones espectrales de interés se han seleccionado de forma que coincidan con aquellas que en determinadas ocasiones estudian visualmente los expertos durante la clasifica-

Real/Est.	B	A	F	G	K	M
B	16	4	0	0	0	0
A	1	10	3	0	0	0
F	0	3	16	0	0	0
G	0	0	1	17	1	0
K	0	0	0	1	12	1
M	0	0	0	1	3	10

Tabla 41. Matriz de confusión inicial para la clasificación en tipo espectral con el algoritmo de *clustering* estadístico óptimo

Real/Est.	B	A	F	G	K	M
B	18	2	0	0	0	0
A	1	11	2	0	0	0
F	0	1	18	0	0	0
G	0	0	1	18	0	0
K	0	0	0	0	13	1
M	0	0	0	1	1	12

Tabla 42. Matriz de confusión final para la clasificación en tipo espectral con el algoritmo de *clustering* estadístico óptimo

ción mediante la técnica manual, sobre todo cuando el ruido u otros factores de distorsión impiden la medición apropiada de los índices espectrales más significativos.

En la clasificación con parámetros espectrales como vectores de entrada se mantiene la tasa de éxito lograda con zonas espectrales para las estrellas de tipo A, aumentando ahora también ligeramente el rendimiento final (entre un 2% y un 7% para el subtipo espectral) en las estrellas de los extremos del sistema MK, esto es, las de los tipos más calientes y más fríos (B y M, respectivamente); el porcentaje de aciertos para los distintos niveles de luminosidad es muy similar al obtenido anteriormente empleando el espectro completo para construir los patrones de entrada de los algoritmos, lo cual parece indicar que los índices seleccionados no logran sintetizar apropiadamente todas las características espectrales necesarias para determinar la luminosidad de las estrellas a través de su espectro óptico mediante esta técnica computacional. Asimismo, en las gráficas se observa claramente un descenso pronunciado en la tasa de éxito del algoritmo Max-Min y su variante en todas las implementaciones, el cual puede atribuirse a la naturaleza jerárquica de los mismos, ya que a estos métodos no se les indica externamente el número de clases deseadas sino que ellos mismos van creando directamente los diferentes grupos en función de determinados criterios basados en la distancia a las clases ya existentes. Por este motivo, en muchas ocasiones estos algoritmos no son capaces de obtener una distribución en clases lo suficientemente apropiada como para determinar correctamente el tipo y la luminosidad estelares; presumiblemente con un conjunto de espectros más amplio, la creación de clases y la distribución de los espectros entre las mismas podrían llegar a ser más adecuadas al proceso de clasificación espectral.

El cómputo global de los resultados alcanzados con los diferentes modelos implementados indica que, si bien con algunas leves diferencias para algunos grupos, la familia de algoritmos *K-means* (estándar, con centroides predeterminados y versión difusa) es la que obtiene mejores tasas de éxito para todos los tipos espectrales y niveles de luminosidad, mostrando un comportamiento más congruente con el proceso clásico de clasificación estelar (90% de aciertos en tipo espectral, 75% en subtipo y 72% en clase de luminosidad); los algoritmos ISODATA y FKNN logran asimismo un rendimiento similar, aunque con tasas de acierto ligeramente inferiores en la mayoría de las configuraciones. En cuanto al tipo de vectores de características, los resultados óptimos se obtienen cuando estos se construyen con índices espectrales de clasificación en lugar de utilizar directamente los valores de flujo de algunas zonas espectrales específicas o incluso del espectro completo.

En la tabla 41 se recoge la matriz de confusión [Kohavi 1998] correspondiente a la clasificación en tipo espectral para el algoritmo de *clustering* con resultados óptimos, es decir, *K-means* con selección previa de los centroides iniciales y con 25 índices espectrales como vectores de características. Mediante este método de agrupamiento se determina correcta-

mente el tipo espectral del 81% de los espectros de evaluación, con un error medio de 0.2 tipos; tal y como puede observarse claramente en la matriz resultante, los errores se producen principalmente en tipos contiguos, por lo que pueden ser debidos al problema de bordes o resolución de la clasificación que se ha descrito en epígrafes anteriores. De hecho, considerando de nuevo una holgura de ±1 subtipo en el análisis de resultados, la matriz de confusión final (tabla 42) muestra una clara disminución de la tasa de error, pues el algoritmo de agrupamiento óptimo es ahora capaz de asignar un tipo espectral congruente con el del catálogo de referencia al 90% de los espectros de evaluación, con un error medio de 0.11 tipos en este caso.

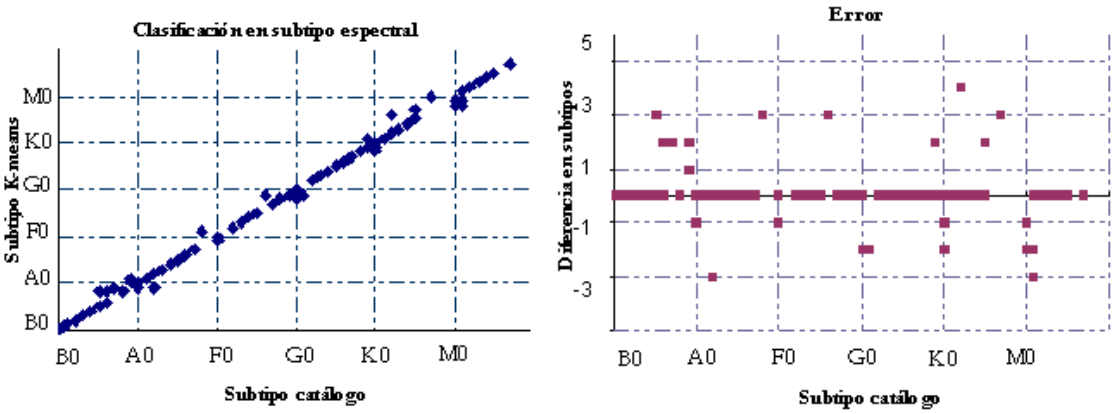
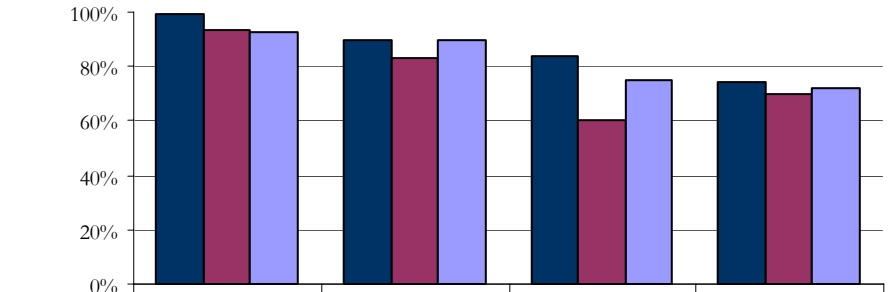


Figura 86. Comparación de la clasificación en subtipo espectral entre los catálogos de referencia y el algoritmo de *clustering* óptimo en la que se incluye la gráfica de discrepancias (error) entre ambos

En la figura 86 se muestran las gráficas de comparación entre el subtipo real de cada espectro y el que le adjudica el algoritmo *K-means* óptimo (con centroides y 30 clases iniciales), el cual es capaz de clasificar apropiadamente el 75% de los espectros del conjunto de evaluación (holgura de ±1 subtipo) con un error medio de 0.34 subtipos. Ocurre nuevamente que la mayoría de los errores se concentran en los subtipos que marcan el límite entre tipos espectrales (subtipos 0 y 9), por ello la primera gráfica presenta una tendencia diagonal en la que las variaciones suceden justamente en estas zonas limítrofes.

De acuerdo a la estrategia de validación adicional que se siguió en la etapa de evaluación del rendimiento de las técnicas de Inteligencia Artificial descritas en las secciones precedentes, se llevó a cabo en este punto un estudio basado en la comparación de las clasificaciones obtenidas con el algoritmo de agrupamiento óptimo y las conclusiones del grupo de expertos en clasificación, cuyos resultados se recogen en la figura 87. Asimismo, en la tabla 43 se incluyen los porcentajes de acuerdo que se obtuvieron tanto entre los propios expertos humanos, como entre estos y el algoritmo computacional cuando se les presentó un conjunto de espectros clasificados previamente (por otro experto

o por el propio método automático) con el fin de que verificasen simplemente la correción de las clasificaciones.



	Clasif. global	Tipo espectral	Subtipo espectral	Luminosidad
Experto A	99%	90%	84%	74%
Experto B	93,50%	83%	60%	70%
K-means	93%	90%	75%	72%

Figura 87. Cuadro comparativo de los resultados del algoritmo de *clustering* óptimo y de los dos expertos humanos para los niveles de clasificación considerados

A modo de procedimiento final de evaluación de las técnicas de análisis *cluster*, se llevó a cabo un estudio del rendimiento alcanzado con los algoritmos de agrupamiento óptimos en la clasificación de espectros diferentes, tanto en su procedencia como en sus características principales, a aquellos que se utilizaron durante la fase de creación de clases; de este modo se seleccionó un primer conjunto formado por 49 estrellas procedentes de campañas de observación propias, candidatas a ser incluidas dentro de la fase evolutiva post-AGB [Suárez 2006], un segundo conjunto constituido por los 78 espectros descartados inicialmente de los catálogos de referencia (por motivos diversos como presentar una metalicidad atípica, un elevado porcentaje de señal a ruido, clasificación ambigua, etc.) y el conjunto de los 500 espectros que constituyen el catálogo secundario de referencia [Prugniel 2001]. En las tablas 44 y 45 se muestran los resultados obtenidos en la clasificación de estos conjuntos de espectros con el algoritmo de agrupamiento óptimo, i. e. *K-means* con elección de centroides e índices espectrales como vectores de entrada, desglosados por la fuente de procedencia. Para posibilitar un análisis apropiado de la eficiencia de esta técnica, se utilizó como referencia para las estrellas post-AGB la clasificación manual llevada a cabo por nuestro grupo de expertos astrofísicos, y la proporcionada por los propios catálogos para los espectros pertenecientes a los otros dos conjuntos seleccionados, corroborada esta última mediante la consulta de las principales bases de datos estelares.

Tal y como cabía esperar, la tasa de error aumenta para este tipo de estrellas en comparación con la obtenida previamente sobre el conjunto estándar, formado por los 100

espectros de evaluación procedentes de los catálogos principales de referencia; en los espectros recogidos en campañas de observación este descenso en el rendimiento podría deberse a que estos son reales, no promediados, y por lo tanto están más influenciados por los efectos de la atmósfera (desplazamiento de líneas, emisiones, etc.) y son más sensibles a los errores de precisión que se producen con algunos aparatos de medición; en los espectros atípicos de la base de datos principal de referencia, las diferencias en el rendimiento se advierten principalmente en los tipos intermedios y tardíos (F-M), lo cual puede atribuirse al hecho de que muchos de ellos presenten niveles de metalicidad muy bajos, propios de tipos más tempranos; por el contrario, en los espectros del catálogo secundario de referencia estas discrepancias en las tasas de éxito ocurren únicamente en aquellos tipos espectrales (B, A y M, principalmente) que presentan valores característicos en los índices que se encuentran fuera del rango espectral que incluye este catálogo, esto es, algunas líneas metálicas y de la serie del hidrógeno anteriores a 4100 Å y algunas bandas de óxido de titanio ubicadas en regiones espectrales a partir de 6800 Å. En la determinación del nivel de luminosidad, en cambio, el algoritmo de *clustering* óptimo obtiene unos resultados muy similares a los conseguidos sobre el conjunto de evaluación estándar. Aun con las diferencias señaladas, las tasas de éxito alcanzadas (en torno al 70% para el tipo espectral y alrededor del 65% para la luminosidad) son indicativas de un rendimiento muy aceptable sobre todo si se tiene en cuenta que durante la fase de agrupamiento no se incluyó ningún espectro que presentase este tipo de peculiaridades para propiciar la creación de las clases.

	Exp. A	**Exp. B**	**K-means**
Exp. A	100%	78%	85%
Exp. B	87%	100%	86%
K-means	82%	76%	100%

Tabla 43. Resultados del estudio realizado para determinar el porcentaje de acuerdo entre los expertos y el algoritmo de *clustering* óptimo

El análisis detallado del comportamiento de esta técnica computacional sobre los diferentes conjuntos de evaluación, puso de manifiesto el hecho de que muchos de los algoritmos de agrupamiento son capaces de aislar de manera satisfactoria aquellos espectros especiales del conjunto de entrada que presentan propiedades diferentes o alguna singularidad, incluyéndolos generalmente en una clase separada. Esta particularidad observada durante el periodo de evaluación ha permitido que estos métodos, además de ser útiles para determinar la clasificación MK de los espectros con una tasa de error dentro de unos márgenes aceptables, puedan emplearse convenientemente para la verificación de los catálogos de referencia, es decir, para ayudar en la eliminación de espectros con características atípicas (nivel de metalicidad inusual, regiones espectrales vacías, ruido excesivo, etc.), tal y como se indicó en la sección 4.1.

El proceso de evaluación descrito condujo a la realización de un ajuste de los distintos parámetros configurables en los algoritmos de agrupamiento (número de clases, valor de los parámetros umbral, elección de centroides, etc.), cuyos detalles se recogen en el epígrafe siguiente y que tiene como objetivo último el logro de una mejor adaptación de estas técnicas de análisis *cluster* al proceso de clasificación espectral de las estrellas.

Tipo espectral MK	Espectros post-AGB	Espectros catálogo Prugniel 2001	Espectros catálogo principal
B	62%	60.88%	65%
A	71.5%	70%	73%
F	77%	75.66%	74.5%
G	78.65%	76.79%	75.68%
K	77%	75%	73.55%
M	63.75%	61.9%	60%
TOTAL	**71.5%**	**69%**	**70%**

Tabla 44. Resultados del algoritmo de *clustering* óptimo para el tipo espectral desglosados por la fuente de procedencia

Nivel luminosidad	Espectros post-AGB	Espectros catálogo Prugniel 2001	Espectros catálogo principal
I	68%	65%	65%
II	-	52.75%	50%
III	-	70%	72.35%
IV	-	68.47%	65%
V	-	70.23%	72%
TOTAL	**68%**	**66%**	**65.5%**

Tabla 45. Resultados del algoritmo de *clustering* óptimo para la luminosidad desglosados por la fuente de procedencia

4.6.8 Perfeccionamiento

En los algoritmos estadísticos de agrupamiento presentados en las secciones anteriores para automatizar el proceso de clasificación bidimensional de las estrellas existen, como ya se ha indicado, una serie de parámetros y premisas de inicialización sobre las que se pueden realizar los ajustes necesarios, de acuerdo al análisis de resultados llevado a cabo durante la fase de evaluación de los métodos implementados, con el fin de incrementar la eficiencia de los mismos en la determinación del tipo espectral y el nivel de luminosidad estelares.

Durante la fase de experimentación con las diferentes técnicas de agrupamiento consideradas se realizó un estudio previo en el que se modificó dinámicamente el contexto

inicial de ejecución, variando tanto el número de clases deseadas (obviamente solamente en aquellos métodos que precisan conocer esta información a priori) como el tipo de vectores de entrada (índices espectrales, valores de flujo en zonas espectrales específicas y valores correspondientes a todo el rango espectral). Partiendo pues de este ajuste inicial, se ha efectuado un análisis posterior del rendimiento de los diferentes algoritmos de *clustering* con el que se pretende evaluar la influencia de otras condiciones iniciales más específicas, como pueden ser el valor de los parámetros de finalización de la ejecución, la elección de diferentes elementos representativos de cada clase o, en el caso de las técnicas que incorporan lógica difusa, la elección de distintas funciones de pertenencia de estos centroides iniciales a sus correspondientes clases.

En la tabla 46 se muestran las tasas de éxito obtenidas sobre el conjunto estándar de 100 espectros de prueba con las diferentes alternativas de inicialización de los métodos que emplean elementos representativos o centroides, es decir, Max-Min, FKNN, ISODATA y la familia de algoritmos *K-means*. En este análisis de la influencia de la selección previa de elementos prototípicos se utilizó para cada algoritmo la implementación específica con el número de clases iniciales y el tipo de patrones de entrada que había alcanzado un rendimiento mayor durante el primer desarrollo. De este modo, tomando como base esta configuración óptima, se consideraron tres estrategias diferentes de selección de muestras representativas para cada clase: la elección aleatoria o versión estándar de los algoritmos; la determinación parcialmente aleatoria del elemento central de las clases en la que se asume que el espectro más representativo de cada tipo espectral o clase de luminosidad pertenece a un subtipo central (4-6), por lo que consecuentemente se eligen al azar los centroides de entre los elementos de la clase pertenecientes a estos subtipos; y finalmente la elección por consenso de los expertos en clasificación de un representante de cada clase extraído del conjunto formado por los 158 espectros iniciales de agrupamiento.

Como se advierte en el cuadro comparativo anterior, la mayoría de los algoritmos de agrupamiento presentan un comportamiento más eficiente cuando la determinación de los centroides iniciales se basa en la elección específica (en lugar de aleatoria) y externa de espectros apropiados de cada tipo y nivel de luminosidad como representantes de cada clase, conducida por el grupo de expertos que colaboran en el diseño del sistema de información y tratamiento de espectros estelares; una elección subscrita por todos los expertos en clasificación, fruto del análisis detallado del conjunto de espectros disponibles, debería ofrecer mejores resultados que el procedimiento aleatorio, ya que en definitiva se trata de determinar los mejores representantes de cada tipo espectral y nivel de luminosidad y, por consiguiente, es lógicamente esperable que sean los expertos, habituados a estudiar y clasificar espectros estelares, los que lleven a cabo una selección más adecuada y satisfactoria. Por estas razones evidentes, todas las implementaciones de los algoritmos que siguen esta

estrategia de elección previa de elementos representativos han logrado incrementar, en mayor o menor medida, la tasa de acierto global alcanzada por las configuraciones estándares, sobre todo en aquellos tipos espectrales (F, G) o clases de luminosidad (III, V) para los que se dispone de un conjunto más amplio de espectros de agrupamiento, pues es en ellos principalmente donde se percibe con más claridad que la técnica de selección aleatoria (o parcialmente aleatoria) de centroides no es capaz de designar satisfactoriamente un elemento lo suficientemente representativo del conjunto espectral completo.

Algoritmo de clustering	Clasif. global	Tipo espectral	Subtipo espectral	Nivel luminosidad
K-means centroides aleatorios	93%	90%	75%	72%
K-means centroides centrales	95%	90%	76%	73%
K-means centroides seleccionados	**95%**	**90%**	**76%**	**73%**
FCM centroides aleatorios	91%	85%	75%	71%
FCM centroides centrales	92%	87%	75%	72%
FCM centroides seleccionados	**93%**	**88%**	**76%**	**73%**
ISODATA centroides aleatorios	90%	86%	73%	71%
ISODATA centroides centrales	90%	88%	73%	71%
ISODATA centroides seleccionados	**90%**	**90%**	**73%**	**72%**
Max-Min centroides aleatorios	91%	86%	72%	72%
Max-Min centroides centrales	91%	86%	72%	72%
Max-Min centroides seleccionados	**91%**	**86%**	**72%**	**72%**
FKNN centroides aleatorios	93%	89%	75%	73%
FKNN centroides centrales	93%	90%	75%	73%
FKNN centroides seleccionados	**95%**	**91%**	**75%**	**73%**

Tabla 46. Estudio de la influencia de la selección inicial de centroides en el agrupamiento de los espectros estelares en tipos espectrales y niveles de luminosidad con los diferentes algoritmos de *clustering*

La tabla 47 recoge el análisis de la repercusión que tiene en el agrupamiento en clases la variación del valor de los principales parámetros de entrada de los algoritmos configurables, es decir: ISODATA (θ_N o número mínimo de elementos de cada *cluster*, L o número máximo de fusiones entre clases por cada ciclo de ejecución e I o número máximo de iteraciones del algoritmo), Max-Min (factor f o fracción de la distancia entre centroides que es preciso superar para formar una nueva clase) y FKNN (k o número de vecinos). En el proceso de ajuste dinámico de los parámetros de estos métodos de *clustering*, se han considerado como implementaciones de base aquellas en las que se realizó previamente una selección de centroides iniciales que condujo a unos resultados más satisfactorios, es decir, las etiquetadas como "centroides seleccionados" y cuyas tasas de acierto se han resaltado en la tabla precedente.

Algoritmo de clustering	Clasif. global	Tipo espectral	Subtipo espectral	Nivel luminosidad
ISODATA (θ_N=20; L=2; I=20)	84%	72%	55%	56%
ISODATA (θ_N=10; L=2; I=20)	90%	90%	73%	72%
ISODATA (θ_N= 8; L=2; I=20)	90%	85%	67%	65%
ISODATA (θ_N= 5; L=2; I=20)	81%	68%	59%	57%
ISODATA (θ_N=10; L=4; I=20)	**90%**	**91%**	**74%**	**72%**
ISODATA (θ_N=10; L=6; I=20)	90%	88%	73%	70%
ISODATA (θ_N=10; L=4; I=40)	90%	90%	74%	72%
ISODATA (θ_N=10; L=4; I=100)	90%	90%	73%	72%
Max-Min (f=0.25)	88%	82%	69%	65%
Max-Min (f=0.50)	**91%**	**86%**	**72%**	**72%**
Max-Min (f=0.75)	90%	82%	68%	68%
FKNN (k=2)	95%	91%	75%	73%
FKNN (k=4)	95%	92%	75%	73%
FKNN (k=6)	**96%**	**92%**	**75%**	**73%**
FKNN (k=8)	94%	90%	75%	72%

Tabla 47. Estudio de la influencia de los parámetros configurables de cada algoritmo en el agrupamiento de los espectros estelares en tipos espectrales y niveles de luminosidad

Atendiendo a los resultados obtenidos con las diferentes alternativas de implementación, se observa claramente que el parámetro que más afecta a la calidad del agrupamiento en el algoritmo ISODATA es el número mínimo de elementos necesarios para formar una clase ya que, como se aprecia en la tabla, la modificación de esta condición inicial suscita una disminución en la tasa de aciertos de más del 20% en algunos casos. Este descenso en el rendimiento puede atribuirse a la distribución en tipos espectrales y clases de luminosidad del conjunto de espectros utilizados, pues en algunos grupos (como por ejemplo la clase de luminosidad II o el tipo espectral A) ocurre que si se elige un número mínimo de elementos muy elevado este será superior al número de espectros integrantes de esas clases y, consecuentemente, el agrupamiento no se realizará de forma apropiada sino que forzosamente, y en el mejor de los casos, se incluirán dentro de ellas espectros no pertenecientes a esos tipos espectrales o niveles de luminosidad, creándose de este modo unas clases ficticias en las que se aglutinan espectros pertenecientes a dos o más subtipos/niveles consecutivos; igualmente, si se especifica un valor demasiado bajo para este parámetro se construyen las clases de forma que, si el número de *clusters* deseados es lo suficientemente elevado, cada subtipo inicial tiende a distribuirse entre dos o más clases. Los resultados correspondientes al algoritmo Max-Min muestran que este es muy sensible a la variación del parámetro f, pues se observa que si se seleccionan valores excesivamente altos o bajos del mismo se reduce la tasa de éxito final, especialmente en la determinación del subtipo espectral: con valores de f cercanos a 1 el algoritmo no es capaz de construir las suficientes clases para obtener una clasificación apropiada de los espectros, creándose en cambio demasiadas

cuando los valores de este parámetro tienden a 0; así, finalmente se optó por establecer su valor en 0.5 de modo que para formar una nueva clase sea necesario superar la mitad de la distancia media entre los centroides de las clases ya existentes. El aumento del número de vecinos en el algoritmo FKNN produce un ligero ascenso en las tasas de acierto de algunos niveles de clasificación estelar, el cual posiblemente se deba a que el incremento de k implica también un incremento del número mínimo de muestras representativas de cada clase que es necesario proporcionarle al algoritmo externamente y, como es obvio, cuantos más espectros de cada tipo y clase de luminosidad se incluyan en el agrupamiento mejor representado y delimitado resultará cada grupo.

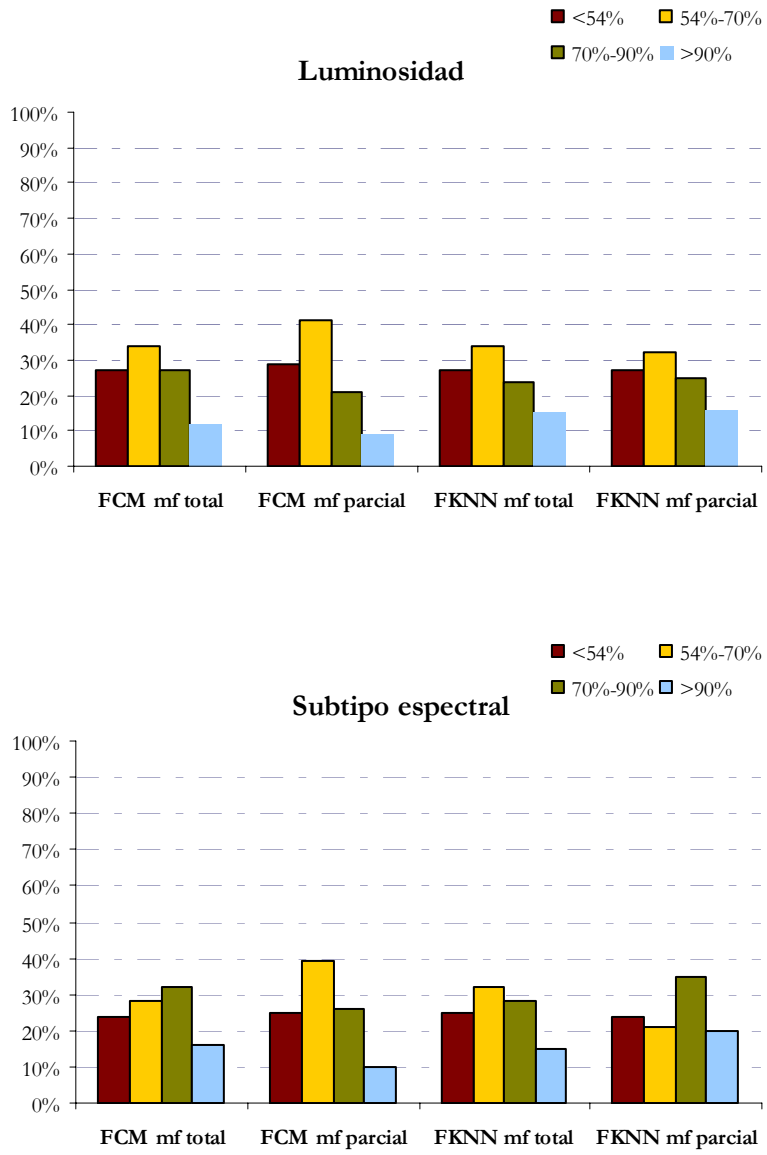


Figura 88. Estudio de la influencia de la elección de las funciones de pertenencia en el agrupamiento de los espectros estelares en tipos espectrales y niveles de luminosidad con los algoritmos de *clustering* FCM y FKNN

Esta primera fase de perfeccionamiento de las implementaciones de los algoritmos de agrupamiento, basada en el ajuste de las condiciones de inicialización de los mismos, se concluyó con un estudio sobre el efecto que causa en la tasa de éxito final el uso de diferentes estrategias en las funciones de pertenencia de aquellos métodos que incluyen lógica difusa, esto es, las versiones *fuzzy* de los algoritmo *K-means* (FCM) y *K-Nearest Neighbor* (FKNN). En la figura 88 se muestra el rendimiento alcanzado en la determinación del subtipo espectral y del nivel de luminosidad mediante estos dos algoritmos difusos, para los cuales se han empleado en una primera aproximación funciones de pertenencia exclusivas (identificadas como "mf total" en las gráficas), es decir, se diseñaron versiones alternativas en las que los expertos consideraron que los elementos representativos de cada clase pertenecen únicamente a dicha clase (mf = 1) y, por consiguiente, no pertenecen en grado alguno a las demás (mf = 0). Posteriormente se modificaron estas funciones para dar cabida a grados de pertenencia parciales, de manera que los representantes de las clases lleven ahora asociado un valor de pertenencia distinto de 0 tanto para su propia clase como para todas las demás. Las propias características conceptuales de estas segundas versiones de los algoritmos (identificadas en las gráficas como "mf parcial") obligan a reemplazar al mismo tiempo los representantes de las clases, puesto que en este caso parece más congruente elegir como tales un conjunto de espectros más controvertidos, a los que se les pueda asignar un grado de pertenencia parcial (distinto de 0, obviamente) a distintas clases.

Con el objetivo de examinar detenidamente la incidencia en la resolución de la clasificación espectral de estas dos alternativas de diseño de los algoritmos de *clustering*, se desglosaron los resultados obtenidos de acuerdo a la franja en la que se sitúa el grado de pertenencia o probabilidad final asignada a cada espectro, que es indicativa del nivel de confianza en la clasificación o probabilidad de que dicho espectro pertenezca realmente al grupo en el que lo incluye el algoritmo: menor del 54% que equivaldría a un error real de clasificación, entre el 54% y el 70% que se correspondería con un grado de confianza aceptable, del 70% al 90% que se ajustaría a un nivel de confianza alto, y por encima del 90% que sería equivalente a un acierto con probabilidad muy elevada. Tal y como se pone de manifiesto en las gráficas, en el algoritmo FCM la alternativa basada en funciones de pertenencia parciales empeora el rendimiento alcanzado utilizando únicamente funciones exclusivas pues, aunque no aumenta excesivamente la tasa de errores (confianza por debajo del 54%), disminuye significativamente el número de espectros para los cuales se obtiene una clasificación con un grado de confianza alto (mayor del 70%); en cambio en el algoritmo FKNN ocurre exactamente lo contrario, puesto que la incorporación de grados de pertenencia parciales produce un aumento importante (más del 10%) de las tasas de acierto para los niveles de confianza superiores al 70% (sobre todo en el caso del subtipo espectral), reduciéndose al mismo tiempo la tasa de error. Este comportamiento contradictorio puede explicarse por la propia concepción teórica de los algoritmos, ya que en el caso del FCM se

selecciona un único elemento prototípico de cada clase por lo que es necesario llevar a cabo una elección muy cuidadosa para obtener un espectro lo suficientemente representativo, cuestión que se dificulta si además se pretende que este mismo elemento pueda pertenecer de alguna forma a otras clases (grados de pertenencia parciales). Sin embargo, en el algoritmo FKNN lo que se selecciona es un conjunto de muestras representativas para cada clase, con lo que parece razonable que al incorporar grados de pertenencia parciales estas queden mejor delimitadas, ya que se podrán incluir apropiadamente en dicho conjunto tanto elementos muy comunes dentro de la clase como aquellos que, si bien siguen todavía perteneciendo a la misma, presentan algunas características que los vinculan en cierto modo a otros grupos; esta heterogeneidad propia de muchos grupos espectrales puede reflejarse sin más que asignar a estos elementos discordantes grados de pertenencia parciales a las clases contiguas, posibilidad que no podría tenerse en cuenta con la versión basada en funciones de pertenencia exclusivas.

Una vez que se han establecido las condiciones óptimas de entrada de los algoritmos de agrupamiento siguiendo el procedimiento descrito, con el fin de completar esta etapa de refinamiento de los mismos y al igual que ya se efectuó en su momento para la técnica de clasificación basada en redes neuronales, se ha llevado a cabo un nuevo estudio de sensibilidad de los índices espectrales de clasificación seleccionados previamente, en aras de lograr la mejor adaptación posible de estos métodos computacionales al proceso de clasificación MK de las estrellas. Para ello se fueron descartando progresivamente del conjunto inicial resultante del primer análisis de sensibilidad (véase tabla 4 de la sección 4.2 para más detalles) algunos índices que la teoría de clasificación señala como menos influyentes a la hora de determinar el tipo espectral o la clase de luminosidad; en concreto se prescindió de la línea HI_{α} en 6563 Å (índice 17), de las bandas de óxido de titanio situadas en 6745 Å (índice 8) y 7100 Å (índice 9), y de la suma de bandas secundarias (índice 24 de la citada tabla). Asimismo se implementó una versión de las configuraciones óptimas de cada algoritmo, fruto de los procesos de ajuste anteriores, en la que los patrones de entrada se construyeron con los 16 índices de clasificación (marcados con * en la tabla) ubicados en el rango espectral incluido en el catálogo secundario de referencia [Prugniel 2001].

En la figura 89 se muestra el rendimiento que se alcanza para los distintos niveles de clasificación espectral cuando se lleva a cabo nuevamente el agrupamiento utilizando las versiones óptimas de los algoritmos obtenidas en la fase de perfeccionamiento previa, pero construyendo en este caso los vectores de entrada a partir de 23 parámetros espectrales (eliminando los índices 9 y 24 del conjunto inicial incluido en la tabla 4), 22 (suprimiendo los índices 8, 9 y 24), 21 (prescindiendo de los índices 8, 9, 17 y 24) y finalmente 16 (descartando los índices 8, 9, 10, 11, 13, 14, 19, 20 y 21, que se corresponden con las características espectrales que quedan fuera del rango de longitudes de onda contemplado en la base de

datos secundaria). Este análisis ulterior de sensibilidad de los índices de clasificación se efectuó sobre el algoritmo *K-means* en sus versiones estándar y difusa (FCM con funciones de pertenencia total) modificadas de forma que los centroides de las clases sean seleccionados previamente por un grupo de expertos astrofísicos, y sobre los algoritmos ISODATA, Max-Min y FKNN (funciones de pertenencia parcial) configurados con los parámetros principales de entrada ajustados de forma óptima (θ_N=10; L=4; I=20; f=0.5; k=6) y adaptados asimismo para aceptar como centroides los espectros seleccionados por los expertos.

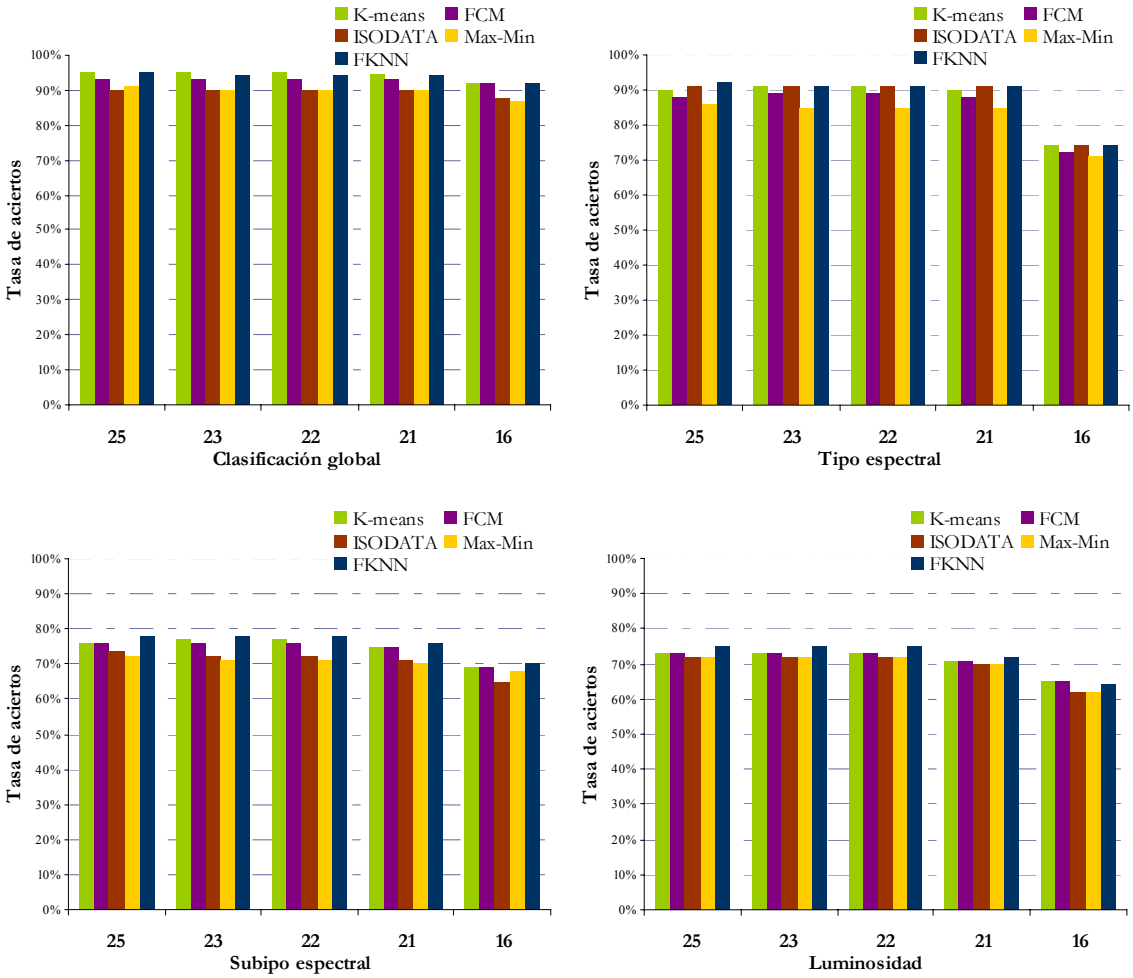


Figura 89. Estudio de la influencia de algunos índices espectrales en los distintos niveles de clasificación (global, tipo, subtipo y luminosidad) con las versiones optimizadas de los algoritmos de agrupamiento

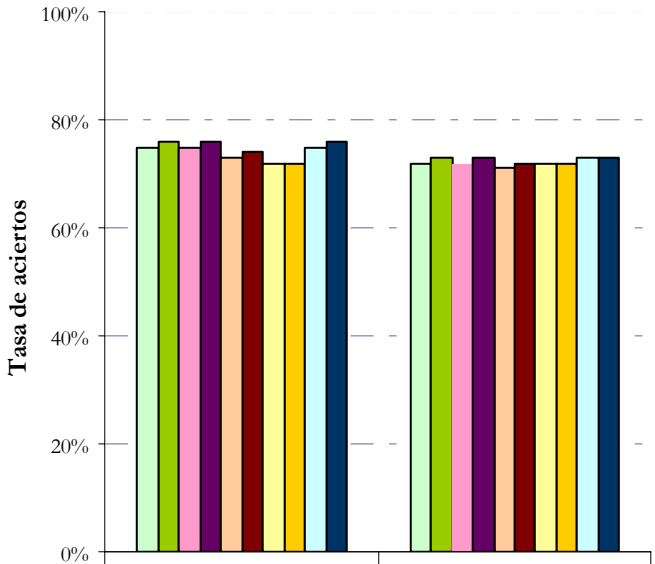
El análisis del comportamiento de los algoritmos de agrupamiento sobre los espectros de evaluación cuando se varía la composición de los patrones de entrada señala que prescindiendo de algunas bandas tardías de óxido de titanio (configuraciones con 23 y 22 parámetros) el rendimiento se mantiene o incluso mejora ligeramente (en torno a un 3%) con algunos algoritmos (*K-means*, FCM), lo cual pone de manifiesto que estos parámetros

morfológicos no serían imprescindibles para determinar el tipo o luminosidad estelares, pues estos podrían deducirse apropiadamente estudiando la presencia o ausencia de las características espectrales reflejadas en otros índices de clasificación; por el contrario, si se elimina la línea de hidrógeno en 6563 Å (configuración con 21 índices) decrecen levemente las tasas de acierto en prácticamente todas las implementaciones, por lo que puede concluirse que este parámetro espectral sí es lo suficientemente significativo como para que su exclusión implique un sesgo en la clasificación, siendo determinante en algunos casos como por ejemplo en la discriminación de los subtipos del tipo A. La configuración de entrada basada en las 16 características espectrales observables en el rango cubierto por el catálogo secundario, supone un descenso significativo en las tasas de acierto de los distintos niveles de clasificación de todos los algoritmos (en torno al 15% para el tipo espectral y al 8% para la luminosidad), lo cual puede atribuirse al decremento acusado del rendimiento que se produce en algunos tipos espectrales específicos (especialmente B, A y M) que se delimitan utilizando precisamente muchos de los índices espectrales que quedan excluidos del rango espectral considerado, como pueden ser las líneas de calcio y helio situadas alrededor de 4000 Å o algunas bandas moleculares de óxido de titanio ubicadas en longitudes de onda superiores a 6800 Å.

El estudio estadístico y pormenorizado de las clasificaciones obtenidas con los distintos algoritmos de agrupamiento ha permitido detectar algunas peculiaridades interesantes relacionadas con los índices empleados para sintetizar los espectros. Por ejemplo, se ha observado que muchas de las variantes basadas en la construcción de los patrones de entrada a partir de determinados parámetros espectrales incluyen erróneamente dentro de la misma clase espectros de los tipos B y M, es decir, los correspondientes a las estrellas más calientes y más frías contempladas y que, en principio, deberían ser los más disímiles.

El descubrimiento de este comportamiento anómalo condujo a la revisión de todos los índices espectrales involucrados en el proceso tradicional de clasificación de estos tipos espectrales concretos, constatándose finalmente de este modo que algunos de los parámetros seleccionados pueden llegar a interferir entre sí cuando se dan determinadas circunstancias. Así, algunas estrellas de tipo B presentan líneas intensas de emisión de hidrógeno (en lugar de absorción) en zonas donde lo que se espera, en todo caso, es alguna de las bandas moleculares de óxido de titanio características de las estrellas M; en consecuencia, tanto la ubicación como la morfología de estas líneas de emisión irregulares lleva a los algoritmos de *clustering* a confundirlas con bandas moleculares y, por tanto, a agrupar a las estrellas de los tipos involucrados de acuerdo a esta consideración errónea. Con la configuración de entrada formada por 21 parámetros en la que, además de eliminarse algunas bandas moleculares tardías, se suprime también la línea de hidrógeno situada en 6563 Å se soluciona parcialmente este problema: los algoritmos de agrupamiento dejan de confundir la emisión

pronunciada de hidrógeno de esta línea que ocurre en algunas estrellas de tipo B con una banda molecular propia del tipo M, y separan convenientemente en dos clases diferentes ambos tipos espectrales. Sin embargo, no sería posible prescindir completamente de este índice de clasificación ya que, como ha quedado patente en los resultados alcanzados con esta variante algorítmica de 21 parámetros de entrada, este sería determinante para discriminar debidamente otros tipos espectrales (como por ejemplo el A) y su exclusión provocaría además un descenso en la tasa de éxito global de la clasificación. Una posible solución a este dilema consistiría en considerar nuevamente una clasificación guiada o por niveles similar a la llevada a cabo con el sistema experto con la red de redes neuronales, de forma que sea posible separar primeramente las estrellas en tempranas, intermedias y tardías en base a determinados criterios entre los que, obviamente, no se incluirían los basados en las líneas o bandas que producen la confusión detectada, para posteriormente emplear estos de nuevo una vez que las estrellas de ambos tipos en conflicto se han segregado en dos *clusters* distintos.



	Subtipo espectral	Luminosidad
K-means original	75%	72%
K-means perfeccionado	76%	73%
FCM original	75%	72%
FCM perfeccionado	76%	73%
ISODATA original	73%	71%
ISODATA perfeccionado	74%	72%
Max-Min original	72%	72%
Max-Min perfeccionado	72%	72%
FKNN original	75%	73%
FKNN perfeccionado	76%	73%

Figura 90. Cuadro comparativo del rendimiento de los algoritmos de *clustering* originales y de las versiones perfeccionadas de los mismos

En la figura 90 se muestran los resultados obtenidos con las versiones finales y perfeccionadas de los algoritmos de agrupamiento en contraste con los alcanzados con la versión original de los mismos desarrollada previamente. De acuerdo con esta comparativa, se puede concluir que la revisión de las diferentes estrategias de diseño (selección de centroides, funciones de pertenencia, construcción de los vectores de entrada, etc.) y el ajuste fino de los parámetros de entrada de los algoritmos incide de forma significativa en la capacidad de estas técnicas de análisis *cluster* para automatizar de forma apropiada el proceso de clasificación de las estrellas.

Así, el más que adecuado comportamiento de las versiones depuradas de los distintos algoritmos de agrupamiento estadístico presentados en esta sección, confirma a esta técnica computacional como un medio altamente satisfactorio de simular el proceso manual de clasificación estelar, ya que en la mayoría de los casos su rendimiento es similar al obtenido por los expertos astrofísicos, quienes están de acuerdo en aproximadamente el 82% de las predicciones. Al mismo tiempo, estos algoritmos ofrecen una funcionalidad adicional relacionada con su capacidad para detectar espectros con características especiales, lo cual los convierte en un método idóneo para ayudar a construir catálogos de referencia consistentes, es decir, formados por un conjunto de espectros típicos y representativos de cada clase. Sin embargo, aunque las tasas de acierto finales (en torno al 75% para ambas dimensiones del sistema MK) son apropiadas y comparables a las obtenidas mediante otras técnicas, tal y como se ha expuesto parece aconsejable integrar estas implementaciones con los desarrollos previos, con el objetivo final de solventar algunos de los problemas detectados y obtener, en definitiva, una adecuación mayor al problema de sistematización de la clasificación estelar basada en el estudio de los espectros ópticos.

4.7 Redes funcionales

En el tratamiento de datos astronómicos, y concretamente dentro del campo de la automatización de la clasificación estelar, la gran mayoría de las aportaciones realizadas en las últimas décadas se han basado fundamentalmente en el diseño de procedimientos que incluyen sistemas de redes neuronales, como ya se ha indicado en los epígrafes precedentes donde se recoge la evolución histórica de los métodos y técnicas aplicados a esta área de conocimiento. Las redes de neuronas artificiales constituyen una línea de investigación que ha recibido una gran atención en años recientes, desarrollándose progresivamente nuevos procedimientos tanto de diseño de arquitecturas neuronales como de aprendizaje de los modelos; debido a este creciente interés de la comunidad científica, esta técnica se ha convertido, y así se la reconoce hoy en día, en una herramienta con un enorme potencial para aprender, simular el razonamiento humano y reproducir sistemas pertenecientes a diversos dominios de aplicación. Sin embargo, a pesar de su amplia difusión, el paradigma de redes neuronales es restrictivo y susceptible de perfeccionamiento en muchos aspectos, ya que en su formulación original puede en ocasiones ser insuficiente para proporcionar una solución satisfactoria a muchos problemas prácticos.

Los modelos conexionistas, como se ha señalado anteriormente, se inspiran en el comportamiento del propio cerebro humano y consisten en redes formadas por una o varias capas de neuronas conectadas entre sí. En una red neuronal de estas características cada unidad de procesamiento computa su salida o *output* a través de una función de activación escalar (igual para todas ellas) que suele ser combinación lineal convexa de sus propias entradas o *inputs*, utilizando asimismo unos vectores de pesos asociados para realizar los cálculos; las funciones de activación (con frecuencia de tipo sigmoidal) son fijas, con lo que el aprendizaje se lleva a cabo únicamente mediante la modificación de los pesos sinápticos y de la arquitectura neuronal (enlaces entre unidades) de acuerdo a la información recibida durante el proceso de entrenamiento [Haykin 2008]. El simple hecho de que las diferentes neuronas de la red empleen funciones de activación idénticas y que al mismo tiempo estas admitan un único parámetro, limita enormemente las posibilidades de esta técnica de Inteligencia Artificial. Para solventar estas y otras carencias, desde finales del siglo pasado se han propuesto diferentes extensiones de este modelo, tales como las redes neuronales probabilísticas [Specht 1990], las propias redes funcionales objeto de este capítulo [Castillo 1999a] o las redes basadas en *wavelets* [Zhang&Gerbrands 1992]; todos estos desarrollos tratan de romper con el paradigma original de redes de neuronas artificiales, generalizándolas con el objetivo de dar lugar a modelos mucho más potentes. No obstante, la mayoría de estas nuevas propuestas actúan aún como una caja negra sin tener en cuenta la estructura funcional ni las propiedades del objeto que se pretende modelizar.

Las redes funcionales constituyen, por lo tanto, una variación de las redes neuronales clásicas propuesta recientemente por E. Castillo et ál., la cual se caracteriza por incorporar funciones de activación dinámicas pertenecientes a una familia preestablecida que se determinan durante el proceso de aprendizaje. Esto es, las redes funcionales extienden el paradigma de redes neuronales permitiendo a las neuronas de las diferentes capas mantener no solamente funciones de activación diferentes que pueden aceptar múltiples argumentos y/o implicar una o más variables, sino que a su vez estas serían susceptibles de aprendizaje. Al mismo tiempo, este tipo de red permite conectar las salidas de varias neuronas forzándolas a ser coincidentes, lo cual conduce a ecuaciones o sistemas de ecuaciones funcionales que imponen algunas condiciones de compatibilidad sobre las funciones neuronales.

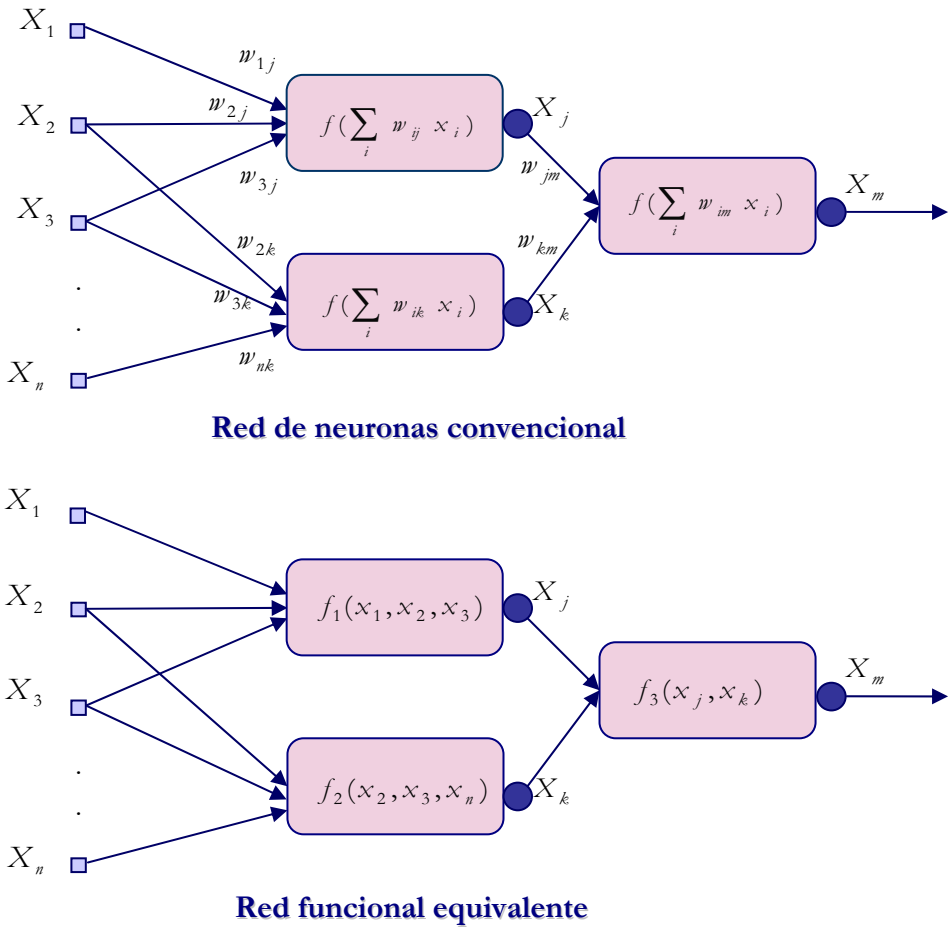


Figura 91. Arquitectura básica de una red de neuronas convencional y su equivalente funcional

Así, de una forma simple pero rigurosa, una red funcional se puede concebir como una red neuronal convencional en la que los pesos se han sustituido por un conjunto de funciones. La estimación de los parámetros específicos de la red se puede realizar entonces resolviendo un sistema lineal de ecuaciones, lo que implica llegar a una solución rápida y

única que vendría dada por el mínimo global de la función de error; esta particularidad constituye sin duda una clara ventaja de esta alternativa funcional frente al paradigma clásico, donde es probable que la solución final posea muchos mínimos relativos.

La arquitectura básica de una red funcional consiste en una capa de entrada, una capa de salida y una o varias capas intermedias de unidades de procesamiento encargadas de evaluar el conjunto de valores de entrada procedentes de la capa previa (de unidades intermedias o de entrada), para obtener un conjunto de valores de salida que serán utilizados por la capa siguiente (de unidades intermedias o de salida). A diferencia de las redes neuronales convencionales, en este tipo de redes se hace la distinción entre unidades procesadoras (intermedias) y unidades de almacenamiento (entrada y salida). Como se ha indicado, cada neurona tiene asociada una función de activación propia con uno o varios argumentos, de forma que en cada unidad de procesamiento se puede introducir parte del modelo matemático que ayude a modelizar el problema tratado; además, son también estas capas intermedias las que permiten forzar la coincidencia de las salidas de las unidades de procesamiento. Todos estos elementos conectados a través de un conjunto de enlaces dirigidos forman la arquitectura neuronal, que define a su vez la topología de la red y las propiedades funcionales asociadas a la misma [Castillo 1999a].

Uno de los rasgos fundamentales que diferencia las redes funcionales de las redes neuronales estándares es la selección de la topología de la red, ya que en ellas la información requerida puede derivar de los datos, del conocimiento previo del problema a resolver o incluso de la combinación de ambos. Esto implica que, además de la información obtenida directamente de los datos disponibles, las redes funcionales son susceptibles de ser construidas a partir de propiedades específicas de la función a reproducir (asociatividad, invariancia, etcétera). Por el contrario, en el paradigma convencional la topología de la red se selecciona de entre las posibles a través de un proceso de ensayo y error, es decir, implementando diferentes alternativas y evaluando su rendimiento hasta que los errores disminuyan suficientemente y se equilibren con respecto al número de grados de libertad. Otra de las diferencias fundamentales entre ambos modelos estriba en el proceso de aprendizaje, pues a diferencia de lo que ocurre en las redes neuronales clásicas donde sólo se modifican los pesos puesto que las funciones de activación se suponen conocidas e invariables, en las redes funcionales se pueden distinguir dos fases distintas: el aprendizaje estructural, en el que se determinan las funciones de activación adecuadas a partir de una estructura inicial de la red que se simplifica sucesivamente hasta obtener una arquitectura funcional eficiente, y el aprendizaje paramétrico que consiste en seleccionar las funciones neuronales óptimas dentro de unas familias predeterminadas; en estas redes no se emplean pesos sinápticos explícitamente, ya que estos se pueden incorporar en forma de parámetros dentro de las propias funciones neuronales. En las redes convencionales las funciones de activación son

idénticas y pertenecen a un tipo predefinido, como pueden ser las sigmoidales; además, son funciones que dependen de una sola variable y que aceptan un único argumento, aunque este sea una combinación lineal en forma de suma ponderada de los valores de entrada (funciones pseudo-multiargumento). En las redes funcionales, en cambio, las funciones de activación pueden ser multivariadas (dependientes de más de una variable), arbitrarias (de cualquier tipo) y diferentes para cada unidad de procesamiento; se permite, asimismo, que acepten múltiples argumentos si bien en muchos casos estas funciones complejas podrán reemplazarse por otras equivalentes de una única variable. En la figura 91 se muestra una red neuronal convencional de arquitectura básica y su equivalente funcional.

La formulación y resolución de un determinado problema mediante redes funcionales requiere, primeramente, definir una topología inicial de la red basada en el conocimiento previo del dominio de aplicación; esta selección se fundamenta normalmente en diversas propiedades del modelo que, usualmente, conducen a una única y clara estructura de red (diseño dirigido por el problema), la cual a través del proceso conocido como aprendizaje estructural puede simplificarse mediante ecuaciones funcionales hasta obtener una red funcional equivalente; por lo tanto, aunque la red funcional inicial podría proceder directamente del problema en cuestión, las restricciones impuestas por las ecuaciones funcionales permiten derivar una estructura funcional simplificada que normalmente transforma las funciones complejas iniciales en otras mucho más simples. De este modo, para una misma topología pueden existir varias funciones neuronales que conducen exactamente a la misma salida para cada entrada (redes equivalentes) por lo que, como etapa previa al proceso de aprendizaje estándar de una red funcional será conveniente comprobar que esta admite una representación única. Una vez establecida la estructura de la red, a continuación se estiman las funciones neuronales de activación a partir de los datos disponibles, considerando combinaciones lineales de familias funcionales apropiadas (polinómicas, exponenciales, etc.) y utilizando métodos estándares de minimización para obtener los coeficientes óptimos. Este proceso de aprendizaje paramétrico puede ser lineal, es decir, la función de optimización conduce a un sistema de ecuaciones lineales en los parámetros para el que existe una única solución, o por el contrario no lineal si pueden existir múltiples mínimos de la función de error, debiendo esta optimizarse entonces a través de algún método apropiado como el del descenso de gradiente.

Aun con las diferencias conceptuales descritas, las redes funcionales constituyen una generalización de las redes de neuronas clásicas en el sentido de que cualquier problema que estas resuelvan puede ser abordado por aquellas; no obstante, tal y como afirman los propios autores del modelo, no todos los casos que se pueden resolver con una arquitectura funcional podrían solventarse empleando el paradigma original de redes de neuronas artificiales [Castillo 2005]. Según los autores que proponen esta alternativa [Castillo

1999a], las redes funcionales podrían considerarse no solamente como una extensión del modelo neuronal clásico, sino también como generalizaciones de otros modelos de aproximación como el ACE (*Alternate Conditioning Expectation*) [Breiman 1985], el MARS (*Multivariate Adaptive Regression Splines*) [Friedman 1991], o el GAM (*Generalized Additive Models*) [Hastie 1990]. Consecuentemente desde su introducción a finales de la década de los 90, las redes funcionales se han aplicado exitosamente a diversos problemas en áreas en las que tradicionalmente se habían empleado los citados modelos, como puede ser la ingeniería estructural [Castillo 2001], el diagnóstico médico, las distribuciones bayesianas conjugadas, las series temporales [Castillo 1998], la resolución de ecuaciones diferenciales [Castillo 1999b], la ingeniería del software [El-Sebakhy 2009], la regresión no lineal o el reconocimiento de patrones [Lacruz 2006].

A diferencia de las redes neuronales tradicionales o incluso de muchas de las extensiones recientes mencionadas, las redes funcionales pueden reproducir propiedades físicas o estructurales del dominio que se pretende modelizar lo cual, como ya se ha indicado, puede conducir de una manera natural a la correspondiente red con una topología específica y con un sistema determinado de ecuaciones funcionales, siempre y cuando se emplee alguna expresión con significado relevante dentro de la base de funciones consideradas. Esta peculiaridad de inclusión de restricciones dictadas por el propio modelo del campo de aplicación, característica de las redes funcionales, convierte a priori a estas en una alternativa muy adecuada para implementar el reconocimiento y clasificación de espectros estelares en tiempo real. Cuando se trata de determinar la temperatura y luminosidad estelares es habitual simplificar el problema considerando que las estrellas se comportan como cuerpos negros y que, por consiguiente, su temperatura superficial y el flujo energético que emiten (energía por m^2 y por segundo) son constantes; de esta forma, la temperatura efectiva de una estrella podría estimarse como la de un cuerpo negro que emitiese su mismo flujo total. Esta simplificación teórica implica toda una serie de aproximaciones matemáticas que hacen uso de algunas leyes y ecuaciones físicas como la función de distribución de Planck o la ley de Stefan-Boltzmann (véase capítulo 2 para una descripción completa), razón por la cual la alternativa funcional podría adaptarse apropiadamente al problema de automatización de la clasificación estelar, al menos en cuanto a la determinación de la temperatura efectiva y, por ende, del tipo espectral, ya que en estos casos subyace el modelo físico del cuerpo negro.

Las características y propiedades específicas de las redes funcionales, especialmente su capacidad de reproducir condiciones procedentes del modelo físico del dominio considerado, convierten a esta técnica computacional en una buena alternativa para agilizar el estudio y clasificación de las estrellas a través del análisis de su espectro óptico, emulando

adecuadamente el razonamiento del ser humano en este campo y sustentándolo en un procedimiento automático que tiene en cuenta el fundamento físico del mismo.

En la sección 4.5 de este mismo capítulo se han recogido las principales contribuciones de esta tesis a la aplicación de redes de neuronas artificiales al problema de clasificación estelar, esquematizadas a través de un estudio exhaustivo de las diferentes configuraciones posibles (arquitectura, algoritmo de aprendizaje, modelo neuronal, etc.) cuyo objetivo final consistía en identificar el tipo de estructura neuronal óptima que se adapte eficientemente a las singularidades de este problema. Del igual modo, en esta sección se tratará de evaluar el paradigma de redes funcionales para comprobar si, puesto que estas tienen en cuenta las peculiaridades del modelo físico subyacente, son capaces de mejorar los resultados anteriores. A continuación se describe en detalle el proceso completo de diseño e implementación de los distintos tipos de redes funcionales seleccionados para llevar a cabo la clasificación estelar, concretamente se exponen los modelos de separabilidad y asociativo. Asimismo, tal y como se ha realizado para otros métodos evaluados previamente, se procederá a estudiar la influencia que ejercen en la clasificación los distintos índices resumen de los espectros que se han seleccionado para determinar el tipo espectral y la clase de luminosidad estelares siguiendo el sistema de clasificación estándar MK.

4.7.1 Consideraciones generales de diseño

En la aplicación del paradigma de redes funcionales al problema de la automatización de la clasificación estelar, de igual forma que en las técnicas de Inteligencia Artificial analizadas en desarrollos previos, se han empleado los 258 espectros ópticos pertenecientes a los catálogos públicos designados como guía principal [Silva 1992] [Pickles 1998] [Jacoby 1984] para construir apropiadamente los patrones de entrada de las diferentes arquitecturas consideradas (véase sección 4.1 para una descripción completa); estos espectros, como ya se ha indicado, constituyen un conjunto consistente, integral y, a priori, suficientemente representativo pues su elección se ha basado principalmente en la observancia de una continuidad en las características espectrales relevantes entre tipos espectrales y clases de luminosidad contiguas.

Aunque sería posible emplear el conjunto completo de espectros disponibles en el entrenamiento de las redes funcionales, siguiendo la estrategia practicada en el diseño de las redes de neuronas artificiales clásicas, los espectros elegidos para la experimentación se han distribuido en dos subconjuntos (entrenamiento y evaluación), con el objetivo expreso de facilitar la generalización óptima, es decir, potenciar la capacidad de las redes para clasificar correctamente espectros de entrada similares a los de entrenamiento pero que no se les han presentado previamente durante la fase de aprendizaje. De esta forma, para cada arquitec-

tura neuronal concreta se destinaron aproximadamente el 60% de los espectros de cada tipo para entrenar las redes, mientras que el 40% restante se dedicó a la evaluación del comportamiento final de cada red a través de la estimación de su capacidad real de generalización en la clasificación de un conjunto de patrones desconocido y distinto al utilizado durante el proceso de aprendizaje.

Tipo espectral MK	Conjunto Entrenamiento	Conjunto Evaluación
B	30	20
A	23	14
F	29	19
G	30	19
K	23	14
M	23	14
TOTAL	158	100

Tabla 48. Distribución de tipos espectrales en los conjuntos espectrales de las redes funcionales de clasificación

Clase luminosidad MK	Conjunto Entrenamiento	Conjunto Evaluación
I	36	23
II	11	5
III	47	31
IV	13	8
V	51	33
TOTAL	158	100

Tabla 49. Distribución de clases de luminosidad en los conjuntos espectrales de las redes funcionales de clasificación

Las tablas 48 y 49 reflejan la composición específica de ambos conjuntos de espectros seleccionados para entrenar y validar las redes funcionales diseñadas, en los cuales se ha tratado de lograr una distribución lo más homogénea posible para que todos los tipos espectrales y clases de luminosidad se hallen convenientemente representados. Aparte del criterio de minimización del error enunciado en el epígrafe precedente, es fundamental que los espectros de entrenamiento abarquen todo el espacio de entradas esperable, pues si se utiliza para este fin un conjunto de patrones poco representativo o demasiado heterogéneo, la red funcional entrenada generalizaría de forma errónea o parcial al dificultarse en demasía la determinación de la clasificación correcta de los patrones de evaluación pertenecientes a las clases peor muestreadas o menos favorecidas durante el entrenamiento.

En la mayoría de las redes funcionales de clasificación diseñadas, las fases de entrenamiento y de evaluación de rendimiento se llevaron acabo construyendo los patrones de

entrada a partir del conjunto espectral descrito, pero utilizando únicamente los 25 índices resumen (energía de algunas bandas moleculares relevantes, anchura equivalente o intensidad de determinadas líneas de absorción, ratios entre líneas espectrales significativas, etc.) obtenidos durante el análisis de sensibilidad previo realizado sobre los criterios de clasificación sugeridos por los expertos astrofísicos (v. tab. 4). En este desarrollo no se ha empleado directamente el flujo energético en zonas espectrales de interés ni el propio espectro completo, pues así lo desaconseja la experiencia con otras técnicas tales como los algoritmos de agrupamiento o las redes neuronales convencionales, donde se corroboró que con esta opción de construcción de los patrones de entrada no solamente no se consigue mejorar el rendimiento del modelo sino que, en la mayoría de los casos, los resultados empeoran.

La estimación del valor de los parámetros espectrales que forman los distintos patrones de entrenamiento y prueba de las redes se ha obtenido de forma automática a través de los algoritmos de análisis morfológico que se incluyen en la aplicación global de tratamiento y clasificación de espectros estelares (véase capítulo 3 para una descripción completa). Además, estos índices de clasificación seleccionados se han normalizado mediante una función sigmoidal específica y contextualizada para cada uno de ellos, similar a la utilizada en las redes neuronales clásicas (v. sec. 4.5.1), la cual centra y escala la función de distribución de cada parámetro convenientemente adaptándolo para su oportuna presentación a la capa de entrada de las redes funcionales.

En general no se efectuó una selección previa de los parámetros que presentan mayor influencia teórica sobre cada tipo espectral o nivel de luminosidad, por lo que la mayor parte de las redes diseñadas constan de una capa de entrada en la que se incluyen 25 neuronas de almacenamiento, una por cada índice espectral procedente del análisis preeliminar practicado; no obstante, con el objetivo de estudiar la influencia de los diferentes parámetros en la clasificación estimada mediante esta técnica, en fases avanzadas de diseño se construyeron redes adicionales que emplean un subconjunto de estas características espectrales relevantes, es decir, en algunos casos específicos se realizó una preselección de parámetros espectrales acorde con la teoría de clasificación estelar y con la experiencia del grupo de expertos astrofísicos que colabora en este desarrollo.

Los modelos neuronales que se han analizado para efectuar la clasificación automática de espectros ópticos mediante redes funcionales son el modelo separable y el asociativo [Castillo 1999a], analizando para cada uno de ellos las diferentes alternativas de funciones y topologías posibles con el objetivo de optimizar la red y determinar la estructura funcional que presenta una mayor adaptación al problema en cuestión. Así, considerando las variables de entrada $X = \{X_1, X_2,...X_n\}$ y la variable de salida z relacionadas ambas a través de una función f conocida (usualmente la función identidad o la inversa de la función sigmoi-

dal) mediante la ecuación $f(z) = h(X_1, X_2,...X_n) + \varepsilon$, siendo ε un error aleatorio de media 0, los modelos funcionales propuestos se diferencian principalmente en la estimación de la función h desconocida por medio de una red neuronal específica [Castillo 2005]. En el modelo asociativo generalizado esta función se aproxima mediante la suma de funciones arbitrarias en cada predictor o variable de entrada en la forma:

$$h(X_1, X_2, ..., X_n) = h_1(X_1) + h_2(X_2) + ... + h_n(X_n)$$

En el modelo separable, por el contrario, se considera una función h más genérica que puede aproximarse a través de conjuntos de funciones linealmente independientes $\phi_i = \{\phi_{ipi}(X_i) \mid p_i = 1, 2,...q_i; i=1, 2,...n\}$ y de unos coeficientes $\beta_{p1...pn}$ que deben ajustarse durante el proceso de aprendizaje:

$$h(X_1, X_2, ..., X_k) = \sum_{p_1=1}^{q_1} ..... \sum_{p_n=1}^{q_n} \beta_{p_1 ..... p_n} \varphi_{1p_1}(X_1) ..... \varphi_{np_n}(X_n)$$

Una vez que se ha seleccionado el modelo adecuado, el aprendizaje paramétrico consistirá únicamente en la estimación de los coeficientes $\beta_{p1...pn}$ para el modelo de red funcional separable, y en la aproximación de las funciones $h_1, h_2,...h_n$, habitualmente mediante una combinación lineal de funciones linealmente independientes, ϕ_{ipi}, para el modelo asociativo. Esto es:

$$f(z) \cong \sum_{p_0=1}^{q_0} \alpha_{p_0} \varphi_{0p_0}(z)$$

$$h_i(X_i) \cong \sum_{p_i=1}^{q_i} \beta_{ip_i} \varphi_{ip_i}(X_i), \quad i = 1,...., n$$

De esta forma se simplifica el problema de aproximación funcional reduciéndose ahora a la estimación de los parámetros α_{p0} y β_{ipi} Los conjuntos de funciones linealmente independientes suelen pertenecer a familias específicas muy conocidas como pueden ser la polinómica ($\phi = \{1, X, X^2,...X^q\}$), la exponencial ($\phi = \{1, e^x, e^{-x},...e^{qx}, e^{-qx}\}$) o la serie de Fourier ($\phi = \{1, \sin x, \cos x,...\sin qx, \cos qx\}$).

El diseño y evaluación de las distintas variantes de redes funcionales de clasificación se ha formalizado mediante la codificación en *Matlab* (v7.10) [Hahn 2007] y *Mathematica* (v5) [Wellin 2005] de los modelos teóricos considerados para resolver las ecuaciones funcionales.

Matlab es un software interactivo orientado a la realización de proyectos que supongan la ejecución de elevados cálculos matemáticos y su visualización gráfica a través de un entorno sencillo de desarrollo de aplicaciones en un lenguaje de alto nivel basado en matrices y vectores [Matlab 2010]; además, esta herramienta dispone de un compilador que permite crear automáticamente código C optimizado (*the Matlab Compiler*), característica que resulta muy conveniente para obtener de forma directa los módulos correspondientes a la gestión de redes funcionales en C++, haciendo posible su integración inmediata junto a las demás técnicas de clasificación en el sistema de tratamiento de espectros estelares desarrollado.

Mathematica es asimismo un entorno integrado para el desarrollo de proyectos en áreas científicas o técnicas, el cual combina en un único sistema flexible e interactivo computación numérica y simbólica (incluyendo una extensa librería de funciones matemáticas elementales y complejas, soporte para operaciones matriciales y capacidades para la resolución de sistemas de ecuaciones ordinarias o diferenciales), facilidades de visualización 3D y un lenguaje funcional de propósito general [Mathematica 2010]; al igual que *Matlab*, esta herramienta dispone de una utilidad (*MathCode C++*) que permite compilar las funciones creadas con el entorno y transformarlas en código C++ altamente eficiente y directamente reutilizable para trasladar los modelos funcionales óptimos a la aplicación global de análisis y clasificación estelar. Los propios autores del paradigma de redes funcionales facilitan una exposición completa de la codificación en *Mathematica* de algunos de los algoritmos desarrollados para efectuar la simplificación y resolución de los modelos funcionales, especialmente los de tipo asociativo [Castillo 1999a]; de este modo, aparte de por sus características idóneas, se ha seleccionado este entorno para poder aprovechar al mismo tiempo la ventaja adicional que supone poder trasladar directamente a código estos procedimientos facilitados, lo cual simplifica en gran medida el desarrollo de las redes funcionales de clasificación estelar.

En las secciones siguientes se expone la descripción teórica general, los detalles concernientes al diseño (arquitecturas neuronales, familias de funciones base, simplificación funcional, aprendizaje estructural, aprendizaje paramétrico, estudio de la influencia de los índices espectrales, refinamiento de los diseños, etc.) y la implementación específica de los modelos de redes funcionales que se analizaron durante la etapa de experimentación en función del nivel de clasificación tratado en cada momento (global, tipo, subtipo espectral y luminosidad), así como una comparativa del rendimiento final alcanzado sobre el conjunto de espectros de evaluación por cada uno de estos enfoques propuestos.

4.7.2 Modelo Separable

El aprendizaje estructural o aproximación funcional en el modelo separable se lleva a cabo mediante la definición de un conjunto de funciones de activación linealmente independientes, $\{f_1(x), f_2(x),...f_r(x)\}$, $\{g_{r+1}(y), g_{r+2}(y), g_k(y)\}$. Si se considera, a efectos de simplificación del desarrollo teórico, una red neuronal básica que acepta patrones formados por dos variables de entrada, x e y, y que posee una única variable de salida, z, relacionadas las tres a través de la siguiente ecuación funcional:

$$z = f(x, y) = \sum_{i=1}^{n} f_i(x)\, r_i(y) = \sum_{j=1}^{m} h_j(x)\, k_j(y),$$

entonces en base a los dos conjuntos de funciones definidos, la igualdad anterior podría reescribirse como sigue:

$$\sum_{i=1}^{k} f_i(x)\, g_i(y) = 0, \quad f_i(x) = h_{i-n}(x);\ g_i(y) = -k_{i-n}(y)$$

La estimación de las distintas funciones de activación en este modelo vendría dada por la resolución del sistema de ecuaciones planteado, esto es:

$$f_j(x) = \sum_{j=1}^{r} a_{jk} f_k(x), \qquad j = r+1,.....k$$
$$g_s(y) = -\sum_{j=1}^{k-r} a_{js} g_{r+j}(y), \quad s = 1,.....r$$

Finalmente la salida global de la red neuronal se obtendrá mediante la ecuación funcional siguiente, en la que β_{ij} son los coeficientes que han de estimarse durante el aprendizaje paramétrico del modelo:

$$z = f(x, y) = \sum_{i=1}^{r} \sum_{j=1}^{k-r} \beta_{ij} f_i(x)\, g_j(y)$$

Teniendo en cuenta las simplificaciones anteriores, el propósito del proceso de aprendizaje en este modelo se circunscribe ahora a la determinación óptima de los parámetros β_{ij} tales que minimicen la función de error, es decir, la diferencia entre la salida teórica o deseada y la realmente obtenida por la red funcional. Así, partiendo de los dos conjuntos de funciones linealmente independientes $\{f_1(x), f_2(x),...f_r(x)\}$, $\{g_1(y), g_2(y), g_{s-r}(y)\}$ que se han definido en la fase anterior de aprendizaje y que, en consecuencia, son ahora conocidos, y considerando un conjunto de entrenamiento con n patrones de entrada, $\{x_{0i}, x_{1i}, x_{2i} \mid i = 1,$

2,...n}, el error de la aproximación funcional podría estimarse a través del método de mínimos cuadrados clásico como sigue:

$$e_i = x_{0i} - \sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{s-r}\beta_{ij} f_i(x_{1i}) g_j(x_{2i}),$$

donde $\{x_0, x_1, x_2\}$ equivalen a la salida anterior z y a las entradas x e y, respectivamente. Por lo tanto, para encontrar los coeficientes óptimos es preciso minimizar la suma del cuadrado de los errores anteriores (Q), lo cual al no existir condiciones adicionales simplemente implica la resolución del siguiente sistema de ecuaciones lineales en el que las incógnitas serán únicamente los coeficientes β_{ij}:

$$Q = \sum_{k=1}^{n} e_k^2$$

$$\frac{\delta Q}{\delta \beta_{pq}} = 2\sum_{k=1}^{n} e_k f_p(x_{1k}) g_q(x_{2k}) = 0, \quad p = 1,...r;\ q = 1,...s-r$$

En la figura 92 se incluye la arquitectura inicial de la red funcional del modelo separable tal y como se deduce del primer sistema de ecuaciones planteado (a la izquierda en la gráfica), y la red final (situada a la derecha) en la que se ha simplificado la topología siguiendo el procedimiento descrito.

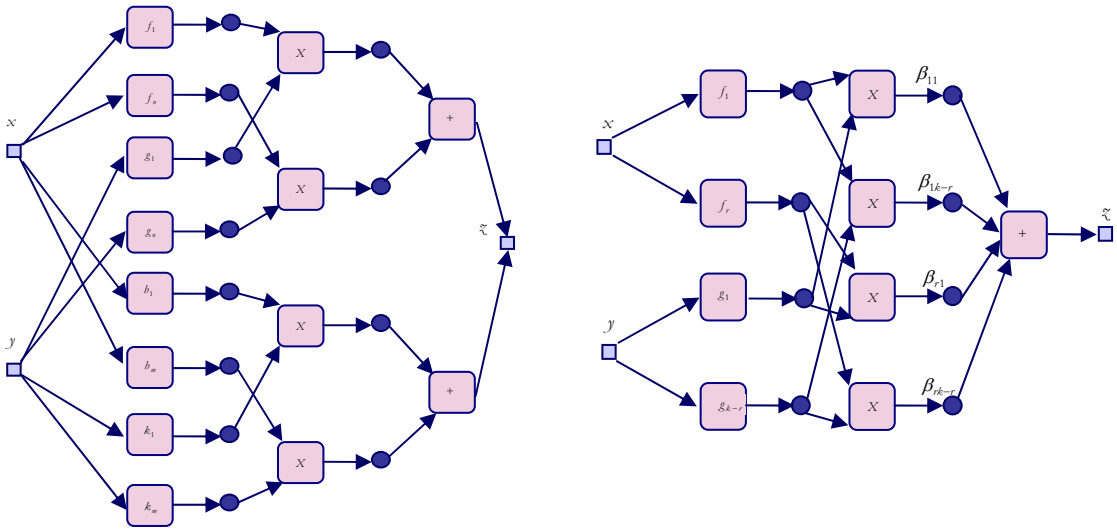


Figura 92. Arquitecturas original y simplificada de una red funcional separable

4.7.3 Modelo Asociativo

Las redes funcionales de tipo asociativo se caracterizan por aproximar las funciones de activación neuronales a través de una función asociativa, generalmente la suma o el producto, aplicada sobre las variables de entrada. La estructura inicial de este tipo de redes, mostrada en la figura 93, involucra una función F de dos argumentos que permite operar pares consecutivos de operandos en cualquier orden (propiedad asociativa), es decir, se cumpliría que $F(F(x_1, x_2), x_3) = F(x_1, F(x_2, x_3))$. La solución general, continua e invertible en ambas variables sobre un rectángulo real, de la ecuación funcional anterior podría expresarse como sigue:

$$F(x_1,x_2) = f^{-1}[f(x_1) + f(x_2)],$$

donde f(x) es una función continua y estrictamente monótona que únicamente podría reemplazarse por $c \cdot f(x)$ siendo c una constante arbitraria. De este modo, ambas partes de la ecuación funcional anterior, $F(F(x_1, x_2), x_3) = F(x_1, F(x_2, x_3))$, podrían escribirse de la forma $f^{-1}[f(x_1)+f(x_2)+f(x_3)]$. La función bidimensional inicial F queda así completamente determinada por medio de una función f que reduce los grados de libertad iniciales transformando una función con dos argumentos en una función específica con un único argumento; además, ninguna otra forma funcional de F satisface la ecuación anterior y, por consiguiente, las neuronas que la incluyan como función de activación no se podrían reemplazar por ninguna otra. A partir de la ecuación funcional anterior no sería posible identificar la constante c, por lo que debería definirse alguna condición adicional para estimarla; sin embargo no es relevante especificar un valor concreto para dicha constante, pues su desconocimiento únicamente implicaría la existencia de diversas redes funcionales asociativas definidas a partir de la función unidimensional f que serían equivalentes.

Las funciones asociativas que se emplean con mayor frecuencia en este modelo neuronal son la suma, $F(x_1, x_2) = x_1 + x_2$ y el producto, $F(x_1, x_2) = x_1 \cdot x_2$, para las cuales la función f vendría especificada por la función identidad y la función logarítmica, respectivamente. Esto es:

$$\begin{aligned} f(x) = x \quad &\Rightarrow \quad F(x_1,x_2) = f^{-1}[f(x_1) + f(x_2)] = f^{-1}[x_1 + x_2] = x_1 + x_2 \\ f(x) = \log(x) \quad &\Rightarrow \quad F(x_1,x_2) = f^{-1}[\log(x_1) + \log(x_2)] = \exp[\log(x_1) + \log(x_2)] = x_1 \cdot x_2 \end{aligned}$$

El aprendizaje en este tipo de redes consiste en la obtención de las funciones f específicas que permitan obtener una predicción aceptable de la variable de salida z con el objetivo de llegar a una solución única, tal que $z = F(x_1, x_2) \Leftrightarrow f(z) = f(x_1) + f(x_2)$. Este planteamiento sugiere aproximar la función f utilizando una combinación lineal de funciones

linealmente independientes y conocidas, pertenecientes a una familia concreta $\phi = \{\phi_1(x), \phi_2(x),...\phi_m(x)\}$, que pueden representar modelos parciales del problema físico que se está analizando. De esta forma, la función unidimensional f estimada a través de esta base de funciones podría expresarse matemáticamente como sigue:

$$f'(x) = \sum_{i=1}^{m} a_i \varphi_i(x)$$

Los coeficientes a_i se podrían calcular por medio de conjuntos de datos de entrada en forma de tripletas, $\{x_{1j}, x_{2j}, x_{3j}\}$, de forma que el error de esta aproximación pueda obtenerse como $e_j = f'(x_{1j}) + f'(x_{2j}) - f'(x_{3j})$; así, la suma de los cuadrados de los errores de la estimación funcional quedaría entonces definida en términos de la familia de funciones base tal y como se recoge a continuación:

$$Q = \sum_{j=1}^{n} e_j^2 = \sum_{j=1}^{n} \left(\sum_{i=1}^{m} a_i [\varphi_i(x_{1j}) + \varphi_i(x_{2j}) - \varphi_i(x_{3j})] \right)^2$$

Finalmente será también necesario definir unas condiciones auxiliares que garanticen la unicidad deseada de la solución, de forma que si el conjunto de conjunto de funciones base, $\phi = \{\phi_1(x), \phi_2(x),...\phi_m(x)\}$ es linealmente independiente, la matriz del sistema de ecuaciones anterior será no singular y, por tanto, este presentará una única solución, que es lo deseable en este tipo de problemas [Castillo 1999a].

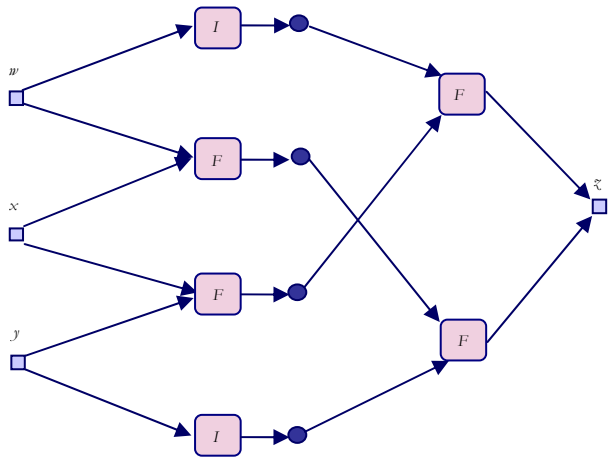


Figura 93. Arquitectura básica de la red funcional asociativa

4.7.4 Implementación de las redes

Los modelos teóricos enunciados matemáticamente en los epígrafes anteriores para resolver las ecuaciones funcionales se han adaptado al proceso de clasificación estelar automática a través del diseño e implementación de redes neuronales capaces de llevar a cabo la categorización de los espectros, las cuales posteriormente se integrarán en la aplicación global de tratamiento de datos astronómicos. En esta sección se incluyen los detalles del proceso de desarrollo de los dos modelos funcionales seleccionados (separable y asociativo) para abordar la clasificación en el sistema MK de los espectros ópticos de las estrellas.

Las redes basadas en el modelo funcional de separabilidad se han resuelto a través de la implementación de los procedimientos necesarios en *Matlab* v7.10, aprovechando para la resolución de los diferentes sistemas de ecuaciones tanto el lenguaje de alto nivel basado en matrices como los procedimientos matemáticos predefinidos de este entorno de desarrollo; las funciones codificadas correspondientes a las redes neuronales diseñadas pueden trasladarse automáticamente a código C optimizado y ejecutable mediante el compilador que para tal efecto incorpora esta herramienta (*the Matlab Compiler*), lo cual facilita en gran medida su posterior e inmediata integración con las restantes técnicas de clasificación en el sistema global.

Las peculiaridades del proceso tradicional de clasificación MK, tratadas en capítulos anteriores, aconsejan una topología inicial de red para el modelo funcional separable como la mostrada en la figura 95, si bien esta podría simplificarse posteriormente mediante las ecuaciones funcionales descritas en el desarrollo teórico de este modelo. Como ya se ha indicado, en este enfoque la estimación de las funciones de activación neuronales se lleva a cabo mediante la elección de dos familias de funciones linealmente independientes, $\{f_1(x), f_2(x),...f_r(x)\}$, $\{g_1(y), g_2(y), g_{k-r}(y)\}$ a partir de las cuales la salida de la red, Q, puede calcularse como sigue:

$$
\begin{aligned}
Q = &\sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{k-r} a_{ij} f_i(a)\, g_j(b) + \sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{k-r} b_{ij} f_i(c)\, g_j(d) + \sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{k-r} c_{ij} f_i(e)\, g_j(f) \\
&+ \sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{k-r} d_{ij} f_i(g)\, g_j(h) + \sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{k-r} e_{ij} f_i(i)\, g_j(j) + \sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{k-r} h_{ij} f_i(k)\, g_j(l) \\
&+ \sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{k-r} k_{ij} f_i(m)\, g_j(n) + \sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{k-r} l_{ij} f_i(o)\, g_j(p) + \sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{k-r} m_{ij} f_i(q)\, g_j(r) \\
&+ \sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{k-r} n_{ij} f_i(s)\, g_j(t) + \sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{k-r} o_{ij} f_i(u)\, g_j(v) + \sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{k-r} p_{ij} f_i(w)\, g_j(x)
\end{aligned}
$$

Por lo tanto, el proceso de aprendizaje paramétrico de la red propuesta será equivalente a la obtención de los coeficientes adecuados a_{ij}, b_{ij}, c_{ij}, d_{ij}, etc. Si se define el error de cada patrón como la diferencia entre la salida esperada y la obtenida por la red, i. e. $e_k = X_{0k} - Q$, el objetivo entonces del proceso entrenamiento será minimizar la expresión E o suma de los errores así calculados de todos los patrones de entrada; aplicando ahora el método descrito de mínimos cuadrados, el conjunto de parámetros que minimiza E debe necesariamente ser solución al siguiente sistema de ecuaciones:

$$\frac{\delta E}{\delta a_{pq}} = 2\sum_{k=1}^{n} e_k f_p(a_k) g_q(b_k) = 0$$

$$\frac{\delta E}{\delta b_{pq}} = 2\sum_{k=1}^{n} e_k f_p(c_k) g_q(d_k) = 0$$

.

.

$$\frac{\delta E}{\delta p_{pq}} = 2\sum_{k=1}^{n} e_k f_p(w_k) g_q(x_k) = 0$$

$$E = \sum_{k=1}^{n} e_k^2$$

Como primera experimentación con el modelo separable se optó por el diseño de redes para clasificar el tipo espectral (B, A, F, G, K, M), las cuales fueron entrenadas y evaluadas con un conjunto de patrones formado por índices resumen de los espectros indicados en la tabla 48; de este modo se implementaron diversas redes en las que se variaron únicamente las dos familias de funciones linealmente independientes, con el objetivo de realizar un análisis a priori de la calidad de la aproximación funcional obtenida con cada una de ellas. En los diseños iniciales se consideraron las siguientes familias de funciones no polinómicas (FNP, en adelante), presentes en algunas de las simplificaciones teóricas del dominio de la clasificación estelar:

$$\text{FNP1}: \; f_i = \{\log x\}, \quad g_i = \{\sqrt{x}\}$$

$$\text{FNP2}: \; f_i = \{\log x\}, \quad g_i = \{\log x\}$$

$$\text{FNP3}: \; f_i = \{\sin x\}, \quad g_i = \{\sin x\}$$

$$\text{FNP4}: \; f_i = \{\cos x\}, \quad g_i = \{\cos x\}$$

$$\text{FNP5}: \; f_i = \{\exp x\}, \quad g_i = \{\exp x\}$$

$$\text{FNP6}: \; f_i = \{|x|\}, \quad g_i = \{|x|\}$$

$$\text{FNP7}: \; f_i = \{\sin x\}, \quad g_i = \{\cos x\}$$

$$\text{FNP8}: \; f_i = \{\log x\}, \quad g_i = \{\exp x\}$$

En todos los casos anteriores, la tasa de acierto en la clasificación obtenida por la red funcional fue inusitadamente baja, sobre todo si se compara con las alcanzadas durante la fase de experimentación con otras técnicas computacionales. En el análisis de resultados se tuvo de nuevo en cuenta la holgura típica de ±1 subtipo que se contempla habitualmente en el proceso manual de clasificación, la cual trata de dar satisfacción al ya descrito problema de bordes que hace referencia a la dificultad de afinar la clasificación, incluso para los expertos, en las zonas limítrofes entre tipos espectrales (subtipos 0 y 9). Esta restricción conduce a considerar como acierto cualquier valor estimado que difiera en menos de 0.0285 de su valor real, límite fijado por la holgura indicada con los patrones normalizados. Para las familias funcionales FNP6 y FNP7, la tasa de éxito se sitúa en torno al 30%, siendo inferior en el resto de los casos hasta llegar incluso a situaciones en las que la red no es capaz de resolver como ocurre con las familias FNP2, FNP4 y FNP5. En cuanto a las condiciones de finalización del entrenamiento, al igual que en las redes neuronales convencionales se utiliza el criterio de estabilización del error cuadrático medio (*Mean Square Error*, MSE), considerando que el proceso de aprendizaje puede darse por concluido cuando este parámetro se sitúa por debajo de 0.05, ya que es a partir de este punto cuando la mayor parte de las redes convergen sin llegar a estados de sobreentrenamiento.

Familia funcional	MSE Entrenamiento	MSE Evaluación
FNP1	0.0241	0.0284
FNP2	17.2951	13.8836
FNP3	0.0496	0.0602
FNP4	0.5109	0.4664
FNP5	11.5294	10.5155
FNP6	0.0325	0.0384
FNP7	0.0934	0.099
FNP8	3.1759	6.8683

Tabla 50. MSE de entrenamiento y de validación para las familias funcionales no polinómicas en el modelo separable

En la tabla 50 se muestra el valor de MSE final para los conjuntos de entrenamiento y evaluación de las redes funcionales descritas. Estos resultados corroboran la escasa tasa de aciertos obtenida en la clasificación, pues el elevado MSE de los casos FNP2, FNP5 y FNP8 se traduce en la incapacidad de la correspondiente red para extraer el conocimiento necesario para predecir las salidas apropiadas a partir de las entradas; aunque en el resto de los casos el valor de esta medida del error disminuye considerablemente, sigue siendo excesivamente alto, con lo que no es sorprendente que estas redes únicamente fueran capaces

de clasificar correctamente aproximadamente el 30% de los patrones presentados, en el mejor de los casos.

En vista de esta pobre capacidad de generalización, se optó por seleccionar un conjunto de familias funcionales más sencillas y comunes para llevar a cabo la estimación, como pueden ser las funciones polinómicas elementales. Es necesario tener una especial precaución a la hora de escoger las funciones específicas de este tipo, pues podría suceder que el determinante de la matriz de coeficientes resultante contuviera dos columnas idénticas, lo cual no es en absoluto deseable; para evitar esta complicación, en las distintas opciones polinómicas evaluadas la familia funcional g_i no contiene la función elemental 1. Considerando estas restricciones, en la segunda etapa de experimentación con el modelo funcional separable se consideraron las siguientes alternativas:

$$\begin{aligned}
&\text{FP1}: && f_i = \{x, x^2\}, && g_i = \{x^2, x^3\} \\
&\text{FP2}: && f_i = \{x, x^2\}, && g_i = \{x, x^2\} \\
&\text{FP3}: && f_i = \{1, x, x^2\}, && g_i = \{x^2, x^3, x^4\} \\
&\text{FP4}: && f_i = \{1, x, x^2\}, && g_i = \{x, x^2, x^3\} \\
&\text{FP5}: && f_i = \{x, x^2, x^3\}, && g_i = \{x^3, x^4, x^5\} \\
&\text{FP6}: && f_i = \{x, x^2, x^3\}, && g_i = \{x^2, x^3, x^4\} \\
&\text{FP7}: && f_i = \{x, x^2, x^3\}, && g_i = \{x, x^2, x^3\} \\
&\text{FP8}: && f_i = \{x, x^2, x^3, x^4\}, && g_i = \{x, x^2, x^3, x^4\}
\end{aligned}$$

En la figura 94 se presentan las tasas de acierto logradas con cada uno de los casos anteriores. Como puede constatarse fácilmente observando los resultados obtenidos, a medida que se aumenta el grado en las funciones polinómicas, también se incrementa progresivamente el número de aciertos de la red, correspondiendo a priori el mejor aprendizaje a las funciones de los casos FP4, FP6 y FP7. Sin embargo, este análisis del número de aciertos es meramente orientativo pues puede ocurrir que, aun obteniendo una elevada tasa de éxito, el error global sea demasiado alto, razón por la que se ha optado por utilizar también el parámetro MSE como criterio adicional para evaluar el aprendizaje de los sistemas funcionales estudiados. En la tabla 51 se muestra, para cada una de las ocho variantes funcionales analizadas, esta estimación del error medio tanto del conjunto de espectros de entrenamiento como del utilizado para validar las redes implementadas.

Con la información aportada por ambos descriptores, tasa de éxito y error cuadrático medio, se observa ahora que cuanto mayor es el grado de las funciones empleadas, mayor es también el índice de aproximación del modelo resultante de la red funcional durante el entrenamiento. Sin embargo, el objetivo perseguido es que la red sea capaz de extraer el

conocimiento necesario para predecir las salidas adecuadas a partir de entradas desconocidas, por lo que ha de evaluarse también el MSE del conjunto de validación, puesto que para que el modelo implementado pueda considerarse un buen predictor sería recomendable conseguir un error bajo para ambos conjuntos. En los resultados se puede observar que esta estimación del error es inferior a 0.05 para la mayoría de las funciones consideradas y, por lo tanto, está dentro del margen aceptable y permitido. No obstante, en algunos casos este valor es significativamente superior al obtenido para el conjunto de entrenamiento, tal como ocurre en la familia FP8 donde la tasa de aciertos en el entrenamiento es del 96% con un MSE asociado muy bajo y, sin embargo, el MSE de validación asciende considerablemente, lo que se traduce en un tasa de aciertos de sólo el 22%, datos que combinados apuntan a un claro caso de sobreajuste o sobreentrenamiento.

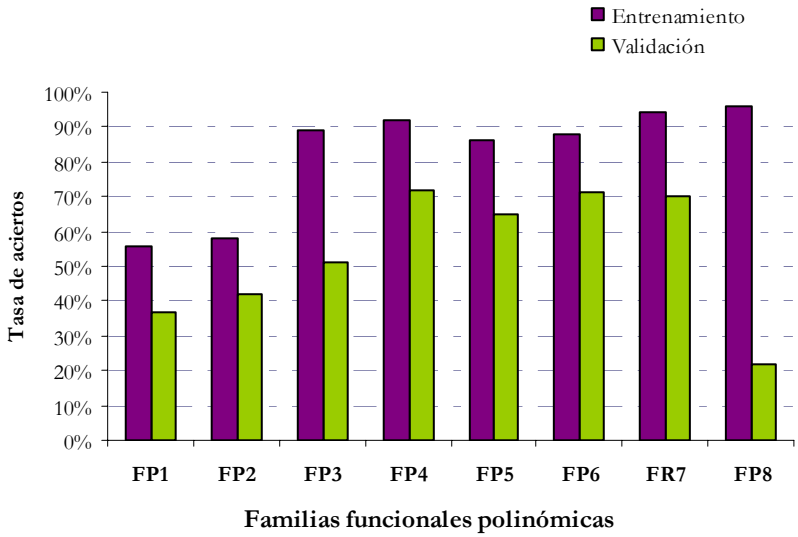


Figura 94. Análisis del rendimiento del modelo funcional separable en la clasificación del tipo espectral utilizando para el ajuste familias funcionales de tipo polinómico

En estadística es bien conocido que cuando se emplea un modelo con muchos parámetros para ajustar un conjunto de datos procedente de un proceso con pocos grados de libertad, el prototipo resultante puede no descubrir las tendencias reales del proceso original, incluso aunque presente un error pequeño de ajuste de datos: el problema radica en el excesivo número de parámetros utilizados. Durante la experimentación se corroboró que este fenómeno de sobreajuste aparece inicialmente al emplear como funciones de estimación polinomios de cuarto grado, y se intensifica a medida que se añaden polinomios de grado mayor. Se verificó asimismo que ocurre también el efecto contrario cuando se consideran como funciones de referencia polinomios de segundo grado, pues la tasa de acierto desciende apreciablemente tanto en el conjunto de entrenamiento como en el de prueba; en

este caso se lleva a cabo una clasificación de los espectros estelares mucho más difusa que en los casos anteriores, debido a que las funciones elegidas son demasiado sencillas para la obtención de un ajuste óptimo. Será por tanto preciso encontrar modelos funcionales donde se alcancen cotas interesantes de aciertos en ambos conjuntos de forma simultánea, buscando un equilibrio entre la sencillez de las funciones y el número de parámetros a ajustar [Castillo 2001].

Familia funcional	MSE Entrenamiento	MSE Evaluación
FP1	0.0067	0.032
FP2	0.0038	0.047
FP3	0.0008	0.045
FP4	0.0007	0.022
FP5	0.0009	0.051
FP6	0.0009	0.032
FP7	0.0007	0.021
FP8	0.0004	0.523

Tabla 51. MSE de entrenamiento y de validación para las familias funcionales polinómicas en el modelo separable

El análisis minucioso del comportamiento de las redes funcionales separables con las distintas familias consideradas puso de manifiesto que las funciones que mejor cumplen con los requisitos enunciados son los polinomios de tercer grado y, en particular, los utilizados en los casos FP4, FP6 y FP7, pues se alcanza un mayor equilibrio entre el proceso de entrenamiento y el de validación, reflejándose tanto en la tasa de acierto como en la estimación del error de los respectivos conjuntos (MSE). De esta forma, serán estos tres conjuntos de familias polinómicas los seleccionados para llevar a cabo estudios posteriores, pues el resto ofrecen unos resultados poco satisfactorios que desaconsejan su elección para continuar la experimentación.

La alternativa funcional basada en redes asociativas se ha codificado en el lenguaje de alto nivel y funcional que incorpora el entorno *Mathematica* v5, tomando como base los procedimientos predefinidos por los propios autores del modelo [Castillo 1999a]. De igual modo que en el caso de redes separables, los módulos de gestión de redes funcionales asociativas implementados pueden traducirse directamente a código C reutilizable por medio del compilador específico para este fin que incluye esta herramienta (*MathCode C++*), agilizándose así la integración de las arquitecturas neuronales óptimas en el sistema global de clasificación estelar desarrollado.

En el proceso de adaptación del paradigma de asociatividad al proceso de clasificación estelar, la primera experimentación se llevó a cabo mediante el diseño de una red para estimar el tipo espectral que, a semejanza de la construida para el caso separable, acepta como entradas los parámetros de clasificación resultantes del análisis de sensibilidad previo (v. tab. 4), los cuales se han medido sobre los conjuntos de espectros de entrenamiento y validación incluidos en la tabla 48. La topología de esta red inicial para el modelo asociativo se refleja en la figura 96.

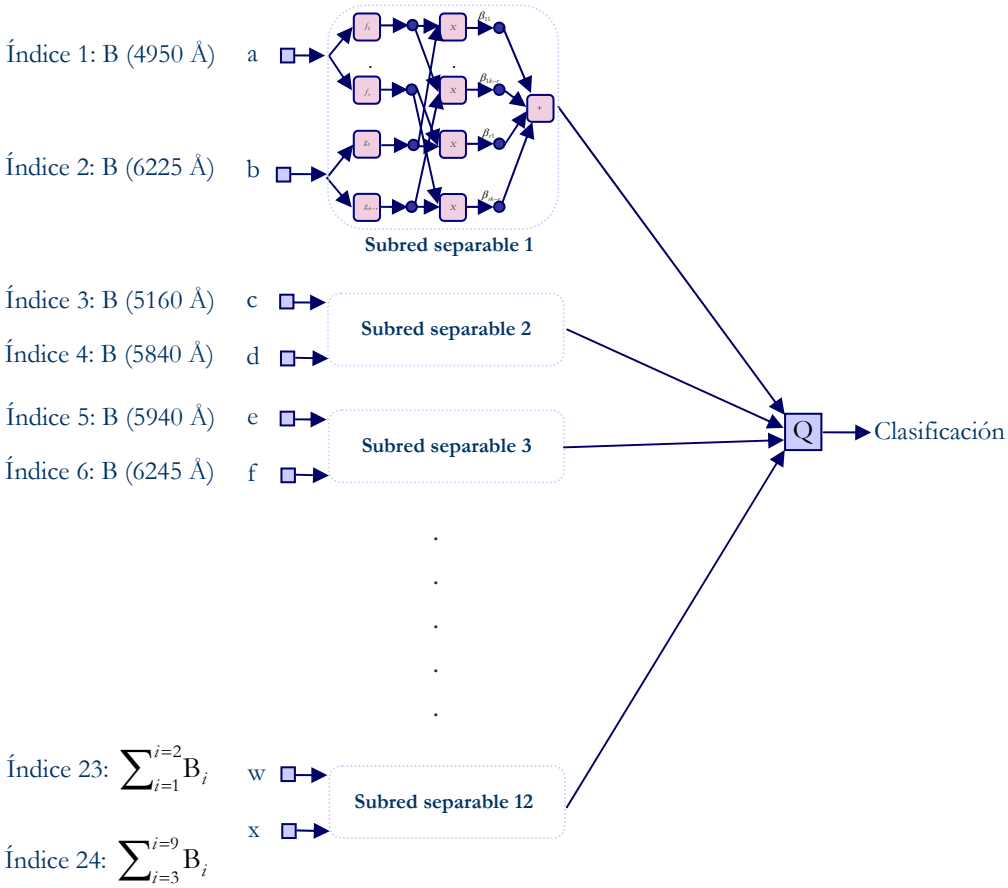


Figura 95. Arquitectura de la red funcional separable para la clasificación espectral

Las funciones linealmente independientes seleccionadas para realizar la aproximación mediante este modelo se corresponden con los dos conjuntos considerados en el enfoque basado en redes separables, es decir, las familias funcionales no polinómicas acordes al modelo físico (FNP1-FNP8), y las familias más sencillas de funciones polinómicas (FP1-FP8). Sin embargo, a diferencia de lo que ocurría en el caso anterior, los resultados son muy desfavorables independientemente de la familia funcional utilizada para llevar a cabo la estimación, con valores de MSE muy superiores tanto para el conjunto de entrenamiento

como para el de validación, y tasas de acierto reducidas para todos los tipos espectrales. Es interesante resaltar que se mantiene la tendencia reflejada en los resultados de las redes separables entrenadas con familias polinómicas, ofreciendo mejor rendimiento aquellas arquitecturas neuronales para las que se emplearon funciones polinómicas de tercer grado, si bien la tasa de éxito alcanzada aun en los mejores casos no llega al 20%.

El análisis de los resultados obtenidos en esta primera fase de diseño de redes funcionales asociativas conduce a descartar este método como posible técnica de clasificación estelar satisfactoria. Como ya se ha indicado, la falta de un modelo matemático preciso provoca, en muchas ocasiones, que el proceso de búsqueda de las funciones de ajuste adecuadas sea muy complejo e incluso no fructífero, tal y como ha ocurrido en este caso, donde no ha sido posible mejorar significativamente la capacidad de las redes asociativas para discriminar los diferentes espectros ni siquiera en implementaciones posteriores más específicas, en las que se han empleado familias funcionales diferentes a las descritas y extraídas del desarrollo de aplicaciones exitosas basadas en esta aproximación funcional para resolver casos reales de clasificación o reconocimiento de patrones [Castillo 2001] [Lacruz 2006].

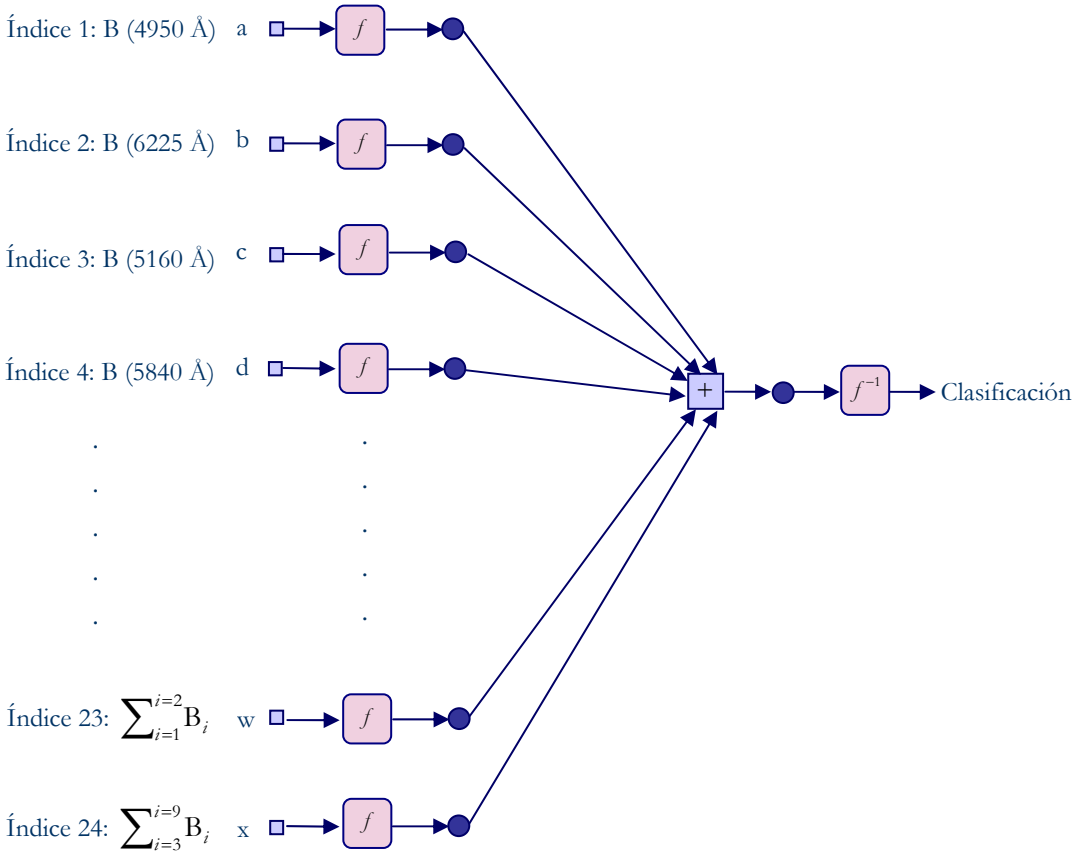


Figura 96. Arquitectura de la red funcional asociativa para la clasificación espectral

El hecho de que no exista un modelo matemático concreto explicativo del problema en cuestión puede contribuir a la obtención de estos resultados, sensiblemente peores a los alcanzados con otras técnicas de clasificación, ya que las redes funcionales estarían especialmente indicadas para aquellos supuestos que poseen un modelo robusto subyacente y la clasificación estelar, si bien basa muchas de sus simplificaciones en el modelo físico del cuerpo negro, no dispone de un modelo matemático claro y preciso que permita relacionar de forma concreta las diferentes entradas y formalizar, de este modo, el proceso de razonamiento llevado a cabo en este campo por los expertos astrofísicos.

Las configuraciones de redes funcionales separables que aporten un rendimiento óptimo durante las fases de experimentación serán susceptibles de ser trasladadas a código C++, obtenido automáticamente mediante los compiladores de los entornos de desarrollo seleccionados (*Matlab* v7.10 y *Mathematica* v5). Una vez concluido el proceso de entrenamiento de cada arquitectura neuronal diseñada, y habiéndose logrado por tanto una capacidad de generalización conveniente, se crearán mediante estas herramientas disponibles (*Matlab Compiler*, *MathCode C++*) los ficheros .c y sus correspondientes cabeceras .h que incluyen los módulos de gestión de los diferentes modelos neuronales implementados, los cuales podrán por consiguiente integrase fácilmente en el sistema de general de procesado y análisis de espectros estelares desarrollado en *Builder C++* (v. cap. 3).

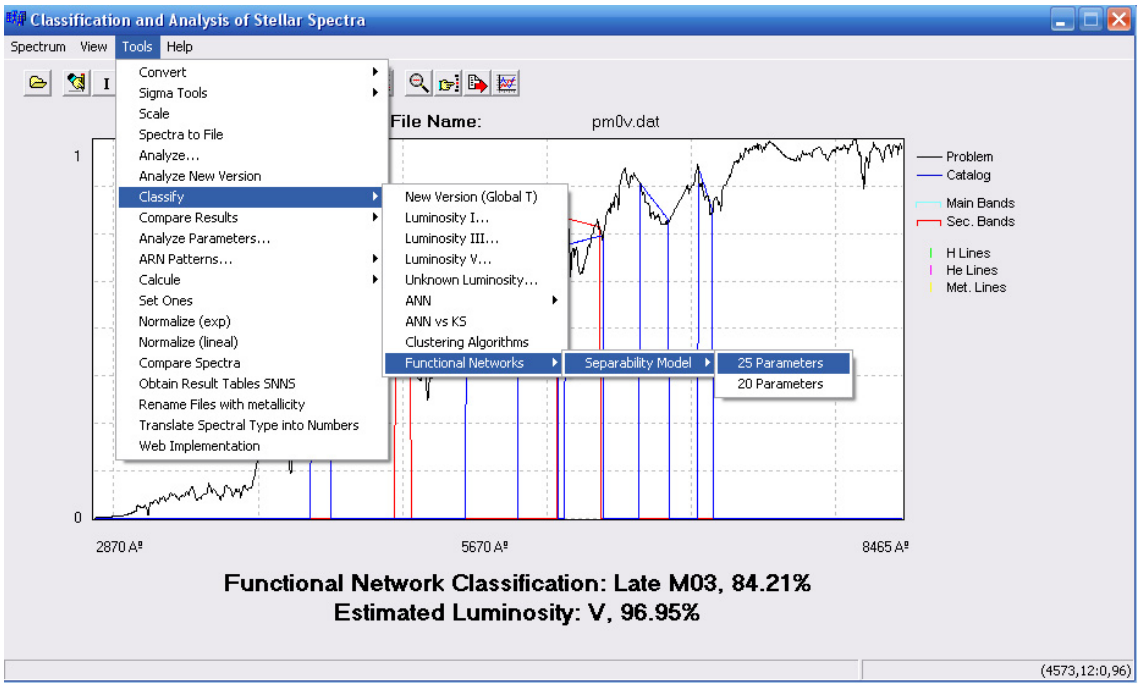


Figura 97. Implementación en C++ de las redes funcionales de clasificación en tipo espectral y luminosidad

La implementación final de los módulos de clasificación referentes a las redes funcionales se llevará a cabo mediante el análisis de los objetos y clases existentes en la aplicación desarrollada previamente, determinando sobre cuáles de ellos es preciso realizar las pertinentes modificaciones, que se plasmarán en forma de métodos específicos y complementarios para regular el comportamiento de los objetos implicados.

La clasificación MK obtenida con las diferentes redes funcionales implementadas, al igual que la aportada por las restantes técnicas integradas en el sistema, se mostrará a través de la interfaz de la aplicación de análisis espectral. Además de indicar para cada espectro la estimación del subtipo espectral y de la clase de luminosidad, se proporcionará una medida de probabilidad, calculada mediante el mismo procedimiento empleado en las redes de neuronas convencionales (v. sec. 4.5.5), que informa sobre la confianza que se puede depositar en el propio método de clasificación y que sirve asimismo de orientación para evaluar la corrección de los resultados presentados. Cuando esta probabilidad asociada sugiera que la clasificación de la red funcional no es lo suficientemente concluyente (confianza inferior al 54%), se mostrará una clasificación alternativa a la principal; esta clasificación mixta (generalmente del tipo F9G0 IV, A7 I-II, etc.) presentada para los supuestos de especial complejidad reproduce en cierta forma el comportamiento de los expertos ante situaciones semejantes, pues ellos mismos consideran que en estos casos no hay suficiente información disponible como para aventurar una clasificación más precisa.

La figura 97 muestra las opciones correspondientes a los modelos funcionales en la interfaz final de usuario del sistema global de tratamiento de espectros estelares. Como puede observarse, el método de clasificación, los espectros de evaluación y las diferentes opciones específicas (nivel de clasificación, red funcional, etc.) pueden seleccionarse a través de los menús incluidos en la parte superior de la interfaz, mientras que la clasificación MK obtenida como resultado de la ejecución de los módulos funcionales se muestra en la parte inferior de la misma.

4.7.5 Evaluación de rendimiento y análisis de resultados

En esta sección se efectuará un análisis del rendimiento de los modelos específicos de redes funcionales que se han trasladado a la implementación, describiendo y contrastando los resultados que con ellos se ha obtenido sobre el conjunto de 100 espectros ópticos de evaluación, formado concretamente por aquellos que no se emplearon durante la fase de entrenamiento de las diferentes arquitecturas neuronales, y cuya distribución en tipos espectrales y clases de luminosidad puede consultarse en las tablas 48 y 49 de la sección 4.7.1.

El estudio exhaustivo del comportamiento de esta técnica permitirá identificar los supuestos más adecuados para su aplicación, determinándose el tipo de red de neuronas particular que mejor se adapta a cada nivel de clasificación estelar. La estrategia utilizada para evaluar los modelos funcionales implementados consiste, al igual que en los procesos previos de verificación de otras técnicas, en un método sencillo de validación empírica por discrepancia, es decir, las estimaciones en tipo espectral y clase de luminosidad obtenidas como salida de las diferentes redes se contrastan con la clasificación correcta proporcionada por los propios catálogos espectrales. De igual forma, se tendrá de nuevo en cuenta la holgura de ±1 subtipo espectral permitida en los procesos de clasificación manual tradicionales para la estimación de la temperatura, asumiendo como aciertos aquellas clasificaciones que sitúen a un espectro en su propio subtipo o en el inmediatamente inferior o superior; sin embargo, en la determinación de la luminosidad únicamente se considerarán correctas las clasificaciones que asignen a cada espectro la clase de luminosidad exacta que se especifica en el catálogo de referencia al que este pertenece. Asimismo, para evitar ambigüedades, no se considerarán válidas las clasificaciones procedentes de salidas cercanas a 0.5, en concreto las pertenecientes al intervalo [0.45, 0.55].

Siguiendo esta estrategia de validación por discrepancia, se han evaluado las arquitecturas neuronales basadas en el modelo de separabilidad en donde la estimación se lleva a cabo mediante funciones polinómicas de tercer grado (familias FP4, FP6 y FP7), pues son estas las que alcanzaron mejor rendimiento en la fase previa de experimentación descrita en la sección precedente. En la figura 98 se muestran los resultados de este proceso valorativo para las diferentes variantes implementadas del modelo separable, desglosados por nivel de clasificación (global: estrellas tempranas, intermedias o tardías; tipo espectral: B, A, F, G, K, M; subtipo espectral: 0-10; y nivel de luminosidad: I-V).

En la determinación de la clasificación global o discriminación entre grupos espectrales (tempranas: B-A, intermedias: F-G y tardías: K-M), las tres aproximaciones funcionales proporcionan un rendimiento muy similar que se traduce en tasas de éxito superiores al 80% en la mayoría de los casos, porcentaje indicativo de una buena aproximación de la clasificación espectral en este nivel. La familia polinómica FP4 ($\{1, x, x^2\}$, $\{x, x^2, x^3\}$) es la que ofrece mejores resultados para cualquiera de los tres grupos, si bien las diferencias no son realmente significativas con respecto a las otras dos alternativas en estrellas tempranas e intermedias (B-G); en cambio, en las estrellas tardías estas discrepancias ya comienzan a ser notables (alrededor del 15% en algunos casos), resultando además su clasificación bastante más costosa como atestigua el descenso del rendimiento en todas las implementaciones, lo cual puede atribuirse al hecho de que este tipo de estrellas estén representadas por un número menor de espectros en el conjunto con el que se ha llevado a cabo el proceso de entrenamiento de las redes neuronales.

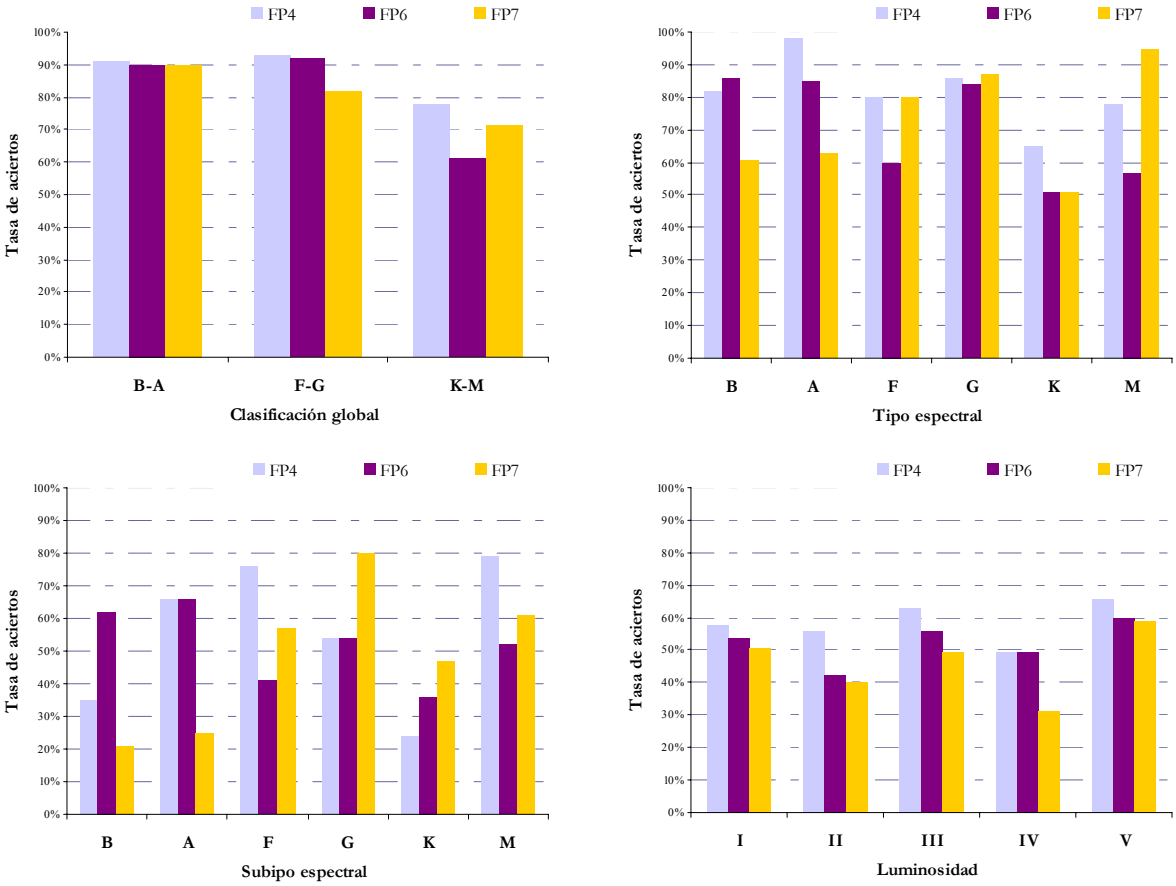


Figura 98. Análisis del rendimiento de las redes funcionales para los distintos niveles de clasificación espectral (global, tipo, subtipo y luminosidad) utilizando 25 índices espectrales como patrones de entrada

La clasificación en tipo espectral se resuelve satisfactoriamente con una tasa de aciertos superior al 70% para la mayoría de los tipos espectrales, siendo las estrellas de tipo K las que resultan más difíciles de delimitar independientemente de la función de estimación seleccionada durante el entrenamiento, lo cual corrobora que es la diferenciación de los espectros de este tipo la que produce el descenso anterior en las tasas de acierto globales para estrellas tardías. Nuevamente la familia polinómica FP4 alcanza un rendimiento global más elevado, con tasas de éxito superiores al 80% para todos las estrellas excepto para las pertenecientes al ya señalado tipo K. Cuando se establece un nivel de clasificación más restrictivo por subtipos espectrales, los resultados empeoran considerablemente (con una tasa de acierto media en torno al 60%) presentando además una alta variabilidad entre los subtipos para todas las alternativas neuronales estudiadas. Este nivel de clasificación resulta también complejo de predecir para los expertos astrofísicos cuando llevan a cabo las tareas del proceso manual clásico, ya que existe un margen de diferenciación realmente pequeño entre un subtipo y sus adyacentes. Debido a este comportamiento tan voluble de las redes funcionales, podría ser interesante en este caso seleccionar previamente la familia polinómica adecuada en función del tipo espectral, construyendo una arquitectura en forma

de árbol similar a la propuesta para la técnica de clasificación basada en redes neuronales convencionales.

En lo referente a la otra dimensión del sistema MK, i. e. la luminosidad, es de nuevo la familia polinómica FP4 la que obtiene unos resultados más satisfactorios para la mayoría de las clases, con tasas de acierto en torno al 60%. Como ocurría en la clasificación mediante otros métodos (sistema experto, redes neuronales clásicas, etc.), en la gráfica se observa claramente que es en las clases más favorecidas durante el entrenamiento, en cuanto a número de espectros y a distribución homogénea de los mismos (I, III, V), donde se alcanza un porcentaje de éxito más elevado en todas las implementaciones.

El análisis de los resultados obtenidos con los diversos modelos neuronales implementados revela que la aproximación funcional es óptima cuando se emplean familias polinómicas de tercer grado, como las seleccionadas en el caso FP4, alcanzándose unas tasas de éxito mayores y una estimación del error (MSE de entrenamiento y de validación) menor para todos los tipos espectrales y clases de luminosidad, lo que permite concluir que sería este el modelo funcional separable que presenta un comportamiento más consonante con el proceso tradicional de clasificación estelar (82% de aciertos en tipo espectral, 56% en subtipo y 58% en clase de luminosidad).

En la tabla 52 se incluye la matriz de confusión inicial [Kohavi 1998] correspondiente a la clasificación en tipo espectral para esta configuración de red funcional óptima, con la que se ha obtenido una tasa de acierto del 74% con un error medio de 0.29 tipos. Tal y como indica la tendencia diagonal de la matriz, las confusiones ocurren principalmente entre tipos contiguos, por lo que de nuevo podrían atribuirse al ya mencionado problema de bordes que se produce por las diferencias en la resolución del nivel de clasificación: al considerar una holgura de ±1 subtipo en el análisis de resultados, las estimaciones del tipo espectral para las estrellas pertenecientes a subtipos limítrofes (0 ó 9) deberían considerarse correctas siempre y cuando respeten esta restricción, así por ejemplo un espectro de tipo A9 que estaría correctamente clasificado como B0 en cuanto a subtipo, debería también evaluarse como un acierto para el nivel de tipo espectral, pero en cambio se contabiliza como error pues la red le asignaría tipo B en lugar de A, lo cual no es en absoluto deseable. Teniendo en cuenta esta peculiaridad, en

Real/Est.	B	A	F	G	K	M
B	16	4	0	0	0	0
A	1	10	3	0	0	0
F	0	4	14	1	0	0
G	0	0	1	17	1	0
K	0	0	1	4	7	2
M	0	0	0	2	2	10

Tabla 52. Matriz de confusión inicial para el tipo espectral con la red funcional óptima del modelo separable

Real/Est.	B	A	F	G	K	M
B	16	4	0	0	0	0
A	0	13	1	0	0	0
F	0	3	16	0	0	0
G	0	0	1	17	1	0
K	0	0	1	3	9	1
M	0	0	0	2	1	11

Tabla 53. Matriz de confusión final para el tipo espectral con la red funcional óptima del modelo separable

la matriz de confusión final construida (tabla 53) se percibe una disminución más que apreciable en la tasa de error, de forma que la red funcional óptima es capaz en este caso de adjudicar al 82% de los espectros de evaluación un tipo espectral consistente con el consignado en los correspondientes catálogos de referencia (con un error medio de 0.21 tipos). Aun cuando con esta técnica mejora significativamente la predicción para las estrellas de tipo A, en la matriz final se observa que sigue persistiendo la confusión típica con el tipo F debida al efecto de degradación de la temperatura superficial con la metalicidad. En la figura 99 se muestra la comparación entre las clasificaciones completas en temperatura especificadas en los catálogos y las que adjudica la red funcional óptima, que es capaz de determinar apropiadamente el subtipo para el 56% de los espectros de prueba, con un error medio de 0.52 subtipos (holgura ±1). Al igual que en técnicas de clasificación anteriores, la mayor parte de los fallos se registran en los subtipos limítrofes, lo que explica las alteraciones en la tendencia diagonal de la primera gráfica justamente en estas zonas (subtipos 0 y 9).

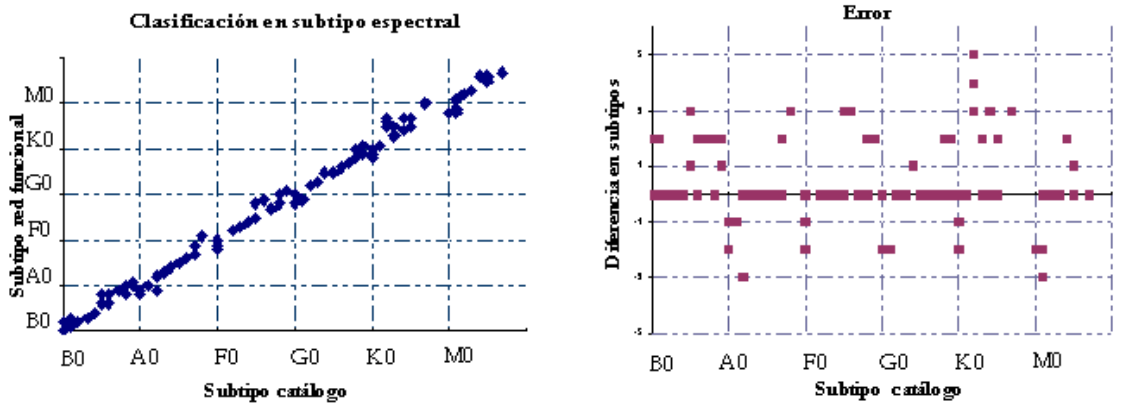


Figura 99. Comparativa de la clasificación en subtipo espectral entre los catálogos de referencia y la red funcional separable óptima en la que se incluye la gráfica de discrepancias (error) entre ambos

La última fase de la validación de las redes funcionales como técnica de clasificación de espectros estelares se llevó a cabo a través de un análisis comparativo de los resultados obtenidos con las configuraciones neuronales óptimas y las clasificaciones formuladas por el grupo de expertos astrofísicos; en la figura 100 se incluyen los resultados de este estudio de contraste expresados en términos de tasa de éxito, mientras que en la tabla 54 se muestran los porcentajes de acuerdo entre los distintos expertos humanos y entre estos y la red neuronal, cuando la tarea consistió en expresar únicamente la conformidad con la clasificación previa otorgada a cada espectro por otro experto o por el propio método computacional.

Con el objetivo de finalizar la evaluación de los modelos de redes funcionales se aplicaron estos a la clasificación de conjuntos espectrales con una composición más

heterogénea y sensiblemente diferentes, tanto por sus características específicas como por su origen de procedencia, a los empleados durante las fases de entrenamiento de las distintas topologías. Se construyo así un primer conjunto de patrones de entrada compuesto por 49 estrellas reales procedentes de campañas de observación propias, realizadas en el Instituto Astrofísico de Canarias (encuadradas inicialmente por los expertos en la fase evolutiva post-AGB) [Suárez 2006], un segundo conjunto formado por los 78 espectros descartados por diversas razones (nivel de metalicidad atípico, excesivo ruido, clasificación incompleta, etc.) de los catálogos de referencia, y un último conjunto compuesto por los 500 espectros pertenecientes al catálogo secundario de referencia [Prugniel 2001]. Las tablas 55 y 56 muestran los resultados que se obtuvieron en la clasificación de estos patrones de entrada utilizando la red funcional separable óptima (FP4), desglosados estos por fuente de procedencia; en las estrellas post-AGB la comparación se ha establecido con la clasificación formulada por el grupo de expertos astrofísicos que colabora en este desarrollo, y en los otros dos conjuntos considerados se ha empleado como referencia la clasificación de los propios catálogos contrastada con la información disponible en las principales bases de datos estelares.

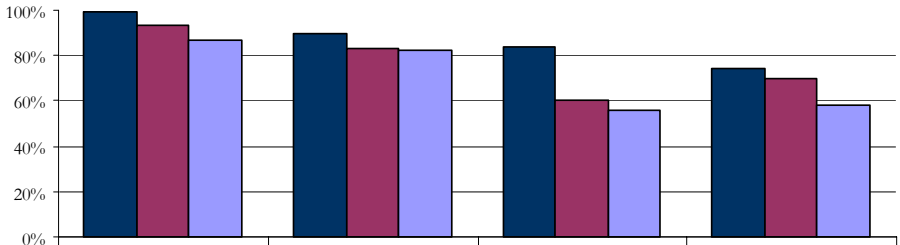
En comparación con el rendimiento alcanzado sobre los espectros de evaluación originales, la tasa de éxito disminuye para estos tres conjuntos tal y como era esperable, pues los espectros reales acusan en mayor medida los efectos de distorsión provocados por la atmósfera (emisiones de elementos, desplazamientos inesperados de líneas, etc.) y los errores de precisión introducidos por algunos aparatos de medida; en los espectros atípicos del catálogo principal de referencia se advierte que las tasas de acierto de las estrellas intermedias (tipos F y G) decrecen considerablemente, debido probablemente a que los espectros de este conjunto presentan niveles de metalicidad anormalmente bajos que conducen a su confusión con otros de tipos más tempranos; en el conjunto constituido por los espectros del catálogo secundario de referencia, los decrementos en el rendimiento se concentran en aquellos tipos espectrales para cuya discriminación se emplean mayoritariamente los índices espectrales situados fuera del rango espectral de este catálogo (algunas líneas metálicas y de absorción de hidrógeno situadas antes de 4100 Å y algunas bandas moleculares que aparecen en longitudes de onda superiores a 6800 Å).

	Exp. A	**Exp. B**	**Red óptima**
Exp. A	100%	78%	71%
Exp. B	87%	100%	82%
Red óptima	78%	72%	100%

Tabla 54. Resultados del estudio realizado para determinar el porcentaje de acuerdo entre los expertos y la red separable óptima

En la discriminación de los distintos niveles de luminosidad, la red neuronal óptima presenta un comportamiento más estable, es decir, no se ve tan afectada por la composi-

ción específica del conjunto de entrada y, de hecho, las tasas de éxito son muy similares a las obtenidas anteriormente sobre el conjunto de evaluación estándar. Incluso con estos descensos en la eficiencia de las redes para la clasificación de conjuntos espectrales diferentes, el rendimiento alcanzado (en torno al 70% para el tipo espectral y alrededor del 60% para la luminosidad) es bastante aceptable especialmente si se tiene en cuenta el hecho de que no se empleó espectro alguno de estos tipos peculiares durante la fase de aprendizaje de los diferentes modelos neuronales.



	Clasif. global	Tipo espectral	Subtipo espectral	Luminosidad
Experto A	99%	90%	84%	74%
Experto B	93,50%	83%	60%	70%
Red funcional (FP4)	87%	82%	56%	58%

Figura 100. Análisis del rendimiento de la red funcional óptima y de los dos expertos humanos para los cuatro niveles de clasificación considerados

Las conclusiones extraídas del estudio valorativo de la eficiencia de la técnica de redes funcionales tratado en esta sección condujeron de forma natural a un proceso de optimización progresivo, cuyos detalles se exponen en el epígrafe siguiente, que se basa principalmente en la ampliación de los conjuntos espectrales de entrenamiento y en el diseño de nuevas arquitecturas neuronales que sean capaces de adaptarse de forma más satisfactoria a la clasificación de las estrellas a través del análisis de su espectro óptico.

Tipo espectral MK	Espectros post-AGB	Espectros catálogo Prugniel 2001	Espectros catálogo principal
B	73%	68.25%	71%
A	88%	76%	81%
F	74%	72%	64.50%
G	77%	75%	68.24%
K	58%	56%	57
M	69%	67%	71.5%
TOTAL	**73.20%**	**69%**	**69%**

Tabla 55. Resultados de la red funcional separable óptima para el tipo espectral desglosados por la fuente de procedencia

Nivel luminosidad	Espectros post-AGB	Espectros catálogo Prugniel 2001	Espectros catálogo principal
I	58%	56%	57%
II	-	51%	50%
III	-	58%	60%
IV	-	47%	47%
V	-	64%	65%
TOTAL	**58%**	**55.2%**	**55.58%**

Tabla 56. Resultados la red funcional separable óptima para la luminosidad desglosados por la fuente de procedencia

4.7.6 Perfeccionamiento

Durante la fase de análisis de resultados y evaluación del comportamiento de los modelos neuronales de tipo funcional presentados en los epígrafes precedentes se verificó que, si bien el porcentaje de éxito alcanzado con las mejores configuraciones neuronales en la determinación de la clasificación global (87%) y del tipo espectral (82%) es comparable al obtenido previamente con otras técnicas de Inteligencia Artificial, el rendimiento de este tipo de redes disminuye sensiblemente con respecto a estos otros métodos en cuanto a la discriminación de los subtipos espectrales (56%) y de las clases de luminosidad (58%). Por esta razón, y con el objetivo último de aumentar la eficiencia de esta técnica en la resolución de los citados niveles de clasificación espectral, se construyeron nuevas redes a partir de la arquitectura confirmada como óptima en la fase de diseño anterior para llevar a cabo la aproximación funcional (modelo separable con las familias polinómicas FP4, FP6 y FP7), pero extendiendo el conjunto de entrenamiento en la forma que se muestra en las tablas 57 y 58, de modo que ahora incluya los 500 espectros del catálogo secundario de referencia [Prugniel 2001]. Es preciso indicar que estas redes funcionales ampliadas presentan una capa de entrada constituida solamente por 16 neuronas, pues aceptan como entrada únicamente aquellos índices de clasificación que se ubican dentro del rango de longitudes de onda de este segundo conjunto de patrones procedentes del catálogo secundario (señalados con * en la tabla 4 de la sección 4.2); asimismo, a causa del incremento del número de espectros de entrada y de la disparidad de los mismos, en algunos casos (tipos F y G, ó clase V) ha sido preciso modificar la estructura neuronal incluyendo un número mayor de unidades en las capas intermedias.

En la figura 101 se muestran las gráficas comparativas de los resultados obtenidos con los dos procesos de entrenamiento, indicando para cada subtipo espectral y clase de luminosidad la referencia a la familia funcional que ha producido un rendimiento óptimo. Como puede observarse, las redes funcionales en las que se ha añadido el conjunto de es-

pectros del catálogo secundario alcanzan una mejor y mayor generalización, lo cual se traduce en unas tasas de acierto más satisfactorias (superiores al 70% para el subtipo espectral y alrededor del 65% para el nivel de luminosidad) y acordes con las de técnicas anteriores, logrando reducir en más de un 5% la tasa de error de las redes entrenadas únicamente con el conjunto principal de espectros estelares.

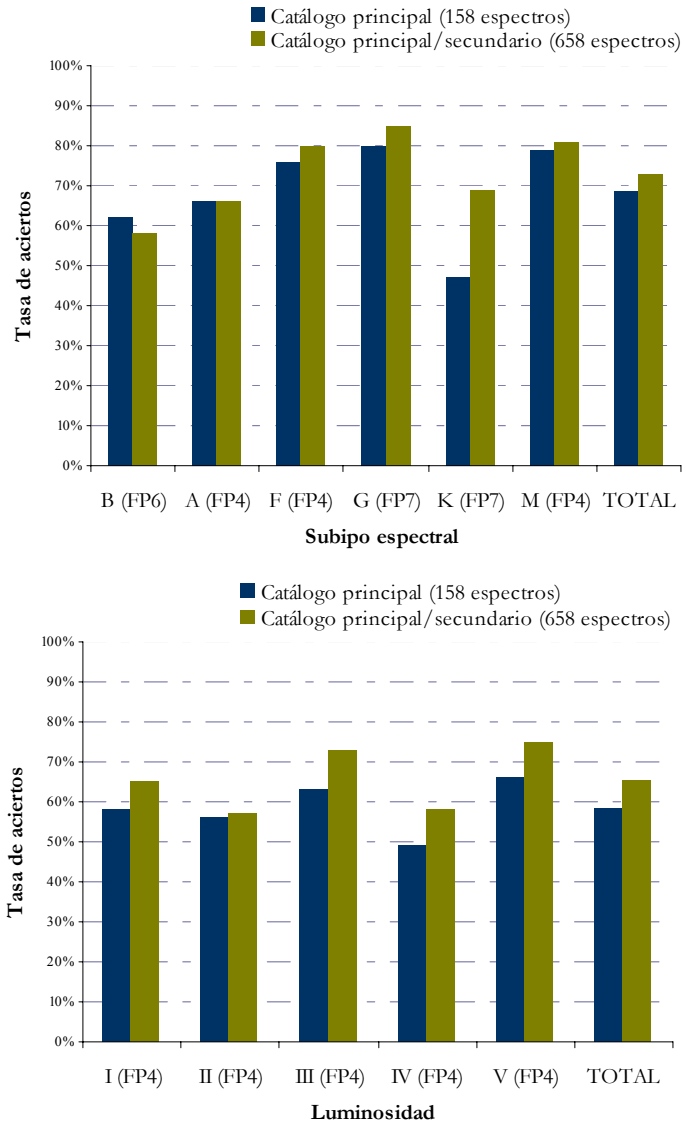


Figura 101. Análisis de rendimiento de las redes funcionales entrenadas con los catálogos espectrales principal y secundario

Tal y como cabía esperar, las diferencias más relevantes entre ambas variantes de entrenamiento se producen en los grupos en los que el número de espectros secundarios añadidos es muy elevado (tipos F, G y K, y clases III y V), mientras que las tasas de acierto se mantienen prácticamente iguales o incluso disminuyen para aquellos tipos espectrales (B,

A y M, principalmente) cuya discriminación depende fuertemente de alguno de los índices que se han excluido del proceso de aprendizaje por encontrarse fuera del rango del catálogo secundario (especialmente algunas líneas significativas de absorción de hidrógeno y helio situadas en torno a 4000 Å, y algunas bandas de óxido de titanio que aparecen en longitudes de onda superiores a 6800 Å).

Subtipo espectral MK	Conjunto Entrenamiento	Conjunto Evaluación
B	50	20
A	35	14
F	251	19
G	191	19
K	101	14
M	30	14
TOTAL	**658**	**100**

Tabla 57. Composición de los conjuntos de espectros para las redes funcionales de subtipo espectral ampliadas

Clase luminosidad MK	Conjunto Entrenamiento	Conjunto Evaluación
I	46	23
II	25	5
III	136	31
IV	91	8
V	360	33
TOTAL	**658**	**100**

Tabla 58. Composición de los conjuntos de espectros para las redes funcionales de luminosidad ampliadas

Evidentemente, la mejora experimentada en el rendimiento y en la capacidad de adaptación de las redes funcionales ampliadas se debe fundamentalmente a las peculiaridades del conjunto espectral con el que se ha llevado a cabo la fase de aprendizaje, ya que la inclusión del catálogo secundario de referencia no solamente supone un aumento sustancial del número de patrones disponibles, sino que implica asimismo una mayor heterogeneidad en el sentido de que sus integrantes presentan una mayor variación de características observables al ser en su mayoría espectros reales que pueden, por lo tanto, verse afectados por factores de distorsión como el enrojecimiento interestelar o incluso acusar la falta de precisión de algunos instrumentos de medida; la incorporación de esta base de espectros adicional posibilita una delimitación más adecuada de cada tipo espectral y nivel de luminosidad, pues el conjunto final de entrenamiento incluye de este modo espectros mucho más representativos del total de peculiaridades que pueden ocurrir dentro de cada grupo específico.

El estudio del rendimiento de las redes funcionales ampliadas en cuanto a la discriminación de los subtipos espectrales ha confirmado el comportamiento irregular advertido ya en fases de diseño y experimentación previas puesto que, como se aprecia en las gráficas, la eficiencia en la obtención de la clasificación varía considerablemente de unas familias funcionales a otras, no siendo capaz ninguna de ellas de ofrecer unas tasas de éxito óptimas para todos los tipos espectrales. Debido a esta alta variabilidad, en esta etapa de refinamiento de las arquitecturas neuronales se estimó oportuno implementar nuevamente una estructura inspirada en el modelo de red de redes, de forma que sea posible obtener gradualmente una clasificación en distintos niveles: en primer lugar se determinará el tipo espectral con una red global de temperatura como la propuesta en la sección anterior dedicada a las redes convencionales; seguidamente, en función de esta estimación inicial, se encaminarán los diferentes patrones de entrada a la red específica de subtipo que permita obtener una clasificación apropiada mediante la familia funcional que ha demostrado que alcanza un rendimiento óptimo en cada caso (FP4 para los tipos espectrales A, F y M; FP6 para el tipo B; y FP7 para los tipos G y K).

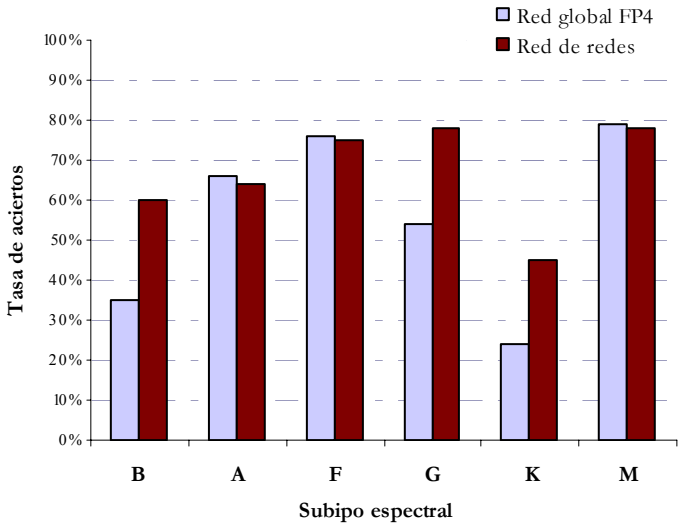


Figura 102. Análisis de rendimiento de las dos redes funcionales implementadas para la clasificación en subtipo espectral

En la figura 102 se incluye una comparación, desglosada por tipo espectral, entre la implementación anterior basada en una red global en la que la aproximación funcional se realiza a través de la familia polinómica FP4 (por ser la que ha obtenido una tasa de acierto media más elevada), y la alternativa constituida por una red de redes en la que la estimación se efectúa mediante las familias funcionales más adecuadas para cada tipo espectral. Como se observa claramente en los resultados, la opción de clasificación por niveles supone un aumento significativo del rendimiento en la determinación del subtipo espectral (superior al

10% por término medio), aunque en los casos en los que la aproximación óptima ya era la lograda por la familia funcional FP4 (tipos A, F y M) se produzca un ligero descenso en la tasa de éxito debido fundamentalmente a los posibles errores que se arrastran del nivel de clasificación anterior en el que se decide el tipo espectral de la estrella. No obstante, con esta variante de implementación se consigue una tasa de acierto global similar a la lograda a través de otros métodos de clasificación implementados previamente (alrededor del 67%), en especial aquellos que se basan en redes de neuronas artificiales de las cuales las redes funcionales no serían más que una generalización.

Después de haber determinado las arquitecturas óptimas de las redes funcionales mediante los procedimientos descritos, con el objetivo de concluir esta fase final de revisión y optimización de las implementaciones, y al igual que ya se llevó a cabo anteriormente para otras técnicas de clasificación, se efectuó en este punto un nuevo análisis de sensibilidad a posteriori de los índices espectrales seleccionados para construir los patrones de entrada. En una red neuronal convencional es posible realizar la selección o eliminación de parámetros a través de un estudio progresivo de las conexiones neuronales en las que los pesos sinápticos alcanzan valores más altos, el cual debe efectuarse desde la capa de salida hasta la de entrada de la red final entrenada pues, tal y como se indicó en la sección correspondiente a esta técnica, los índices implicados en dichas conexiones podrían considerarse como los más influyentes en la determinación de los distintos tipos de clasificación; sin embargo, en las redes funcionales no se dispone de dicha información debido al hecho de que los pesos sinápticos están incluidos en forma de coeficientes dentro de las propias funciones de activación, con lo cual en este caso será preciso considerar otros criterios para la elección de los diferentes conjuntos que constituirán los patrones de entrada, tales como la opinión experta de los especialistas en clasificación, la literatura disponible en este campo o la experiencia previa adquirida mediante la experimentación con otras técnicas computacionales.

Siguiendo por tanto esta estrategia de selección combinada se diseñaron en esta fase nuevas redes funcionales separables que aceptan como entrada patrones construidos a partir de 18 y 20 índices espectrales. El primer subconjunto está formado únicamente por los 18 parámetros correspondientes a las principales líneas de absorción y a las bandas de óxido de titano (índices 1 al 18 de la tabla 4), es decir, del conjunto inicial se han eliminado aquellos índices que son combinación de otros, como por ejemplo los ratios entre líneas o la agregación de bandas moleculares. Para confeccionar el segundo conjunto de patrones se añadieron a los 18 parámetros anteriores el ratio K/H y la energía espectral (índices 19 y 25 de la tabla 4, respectivamente). Se han incluido estos dos parámetros en particular y no cualquier otro, debido a los resultados obtenidos en un estudio previo sobre el modelo separable en el que se llevó a cabo un análisis de la influencia que ejercen en la clasificación

la energía espectral y cada uno de los ratios considerados individualmente. En la figura 103 se muestran las tasas de acierto globales alcanzadas con las diferentes configuraciones consideradas en esta experimentación, en la que se diseñaron y entrenaron redes funcionales que aceptan 22 parámetros de entrada, de forma que se incluyan los 18 índices espectrales anteriores y un subconjunto de cinco índices adicionales del que se ha ido excluyendo bien la energía espectral o bien uno de los ratios cada vez; la evaluación del rendimiento de estas alternativas de diseño de la capa de entrada confirma que la tasa de éxito solamente disminuye de forma apreciable cuando se eliminan el ratio K/H o la energía espectral, especialmente para las estrellas tempranas e intermedias (B-G), manteniéndose en los demás casos en porcentajes muy similares a los obtenidos con la implementación original basada en el conjunto completo de 25 índices de clasificación.

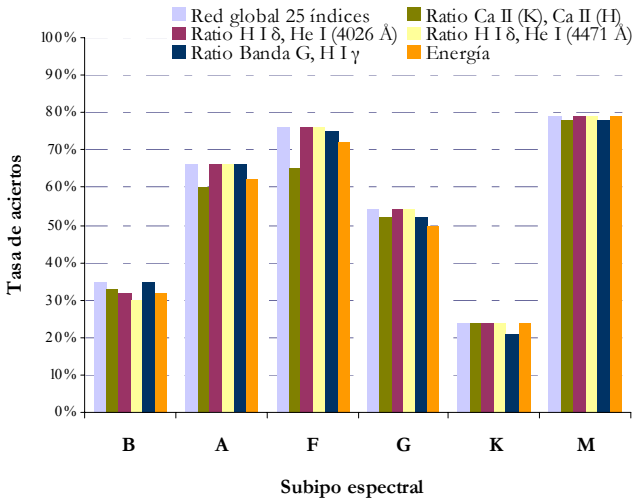


Figura 103 Análisis de sensibilidad parcial de algunos índices (ratios y energía espectral) para el subtipo espectral

En la figura 104 se recoge el análisis de los resultados desglosado por nivel de clasificación para las redes funcionales en las que se ha variado la composición de la capa de entrada en la forma descrita. En ambas implementaciones (18 y 20 parámetros) se han utilizado durante el entrenamiento los espectros procedentes de los dos catálogos de referencia (principal y secundario) si bien, a diferencia de lo que ocurría con el conjunto completo de índices espectrales, no ha sido necesario en este caso emplear distintos tipos de funciones para realizar la aproximación, ya que al disminuir tangiblemente el número de entradas de la red se alcanza un mayor equilibrio y un rendimiento óptimo con funciones polinómicas más complejas, como por ejemplo con la familia polinómica de tercer grado FP7 con la que se lograrían ya unos resultados satisfactorios y homogéneos para todos los niveles de clasificación, evitándose asimismo la construcción de una arquitectura neuronal más complicada como la basada en una red de redes descrita anteriormente.

El comportamiento de las redes funcionales entrenadas con conjuntos parciales de índices de clasificación como patrones de entrada, revela que en la mayoría de los supuestos de clasificación estas no logran un rendimiento óptimo sin la contribución aportada por alguno de los parámetros eliminados, confirmando así las conclusiones derivadas del análisis de sensibilidad efectuado sobre las redes convencionales donde se puso de manifiesto que, para que las arquitecturas neuronales definitivas fuesen capaces de generalizar apropiadamente, era necesaria tanto la información sobre la presencia de determinadas características espectrales como la referente a la ausencia de rasgos distintivos en otras zonas a priori no especialmente relevantes.

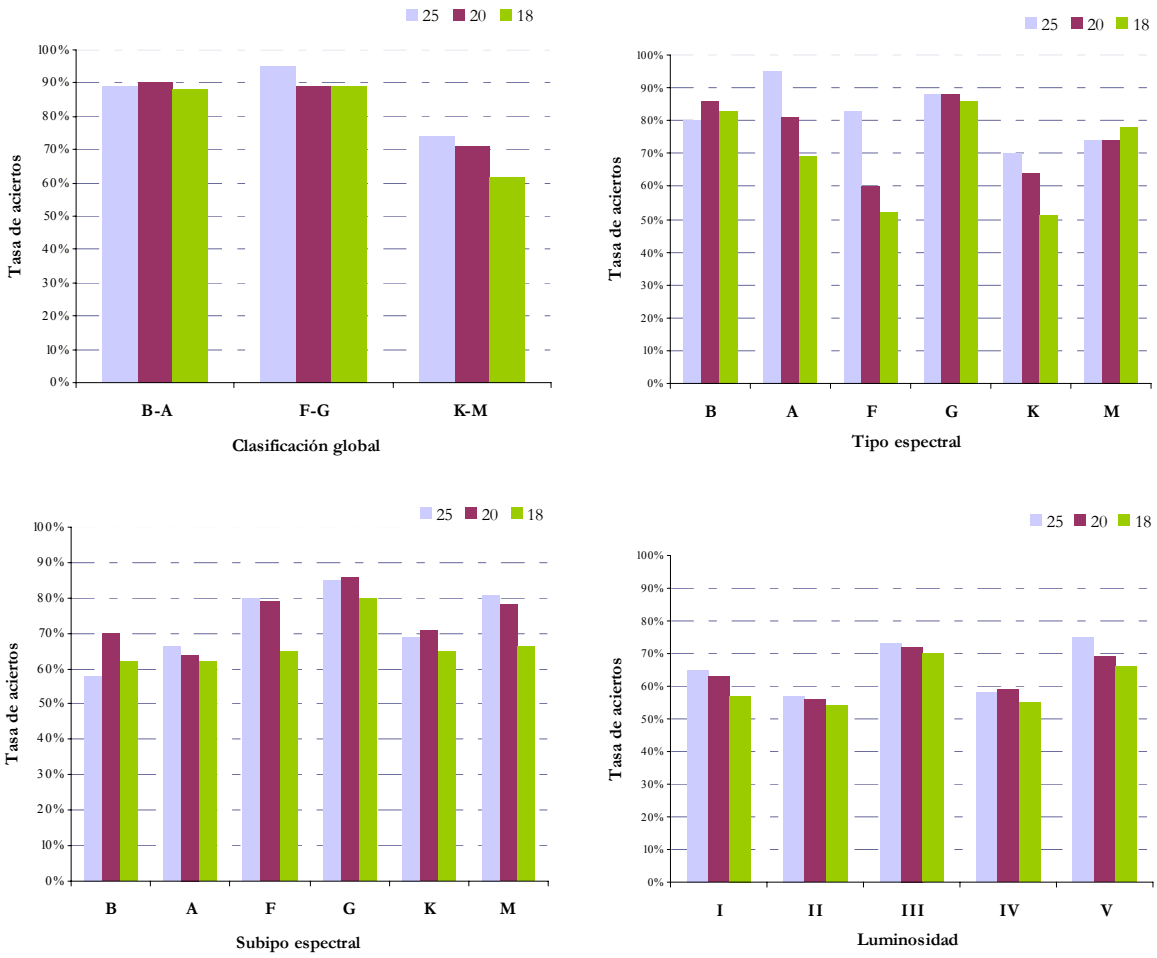


Figura 104. Estudio de la influencia de algunos índices espectrales en los distintos niveles de clasificación (global, tipo, subtipo y luminosidad) con las redes funcionales del modelo separable

En el nivel de clasificación global, como se deduce del análisis de las gráficas comparativas, se podrían emplear únicamente los índices simples basados en la medición de líneas de absorción o bandas moleculares para diferenciar las estrellas tempranas, ya que las configuraciones que incluyen parámetros adicionales no logran un aumento significativo en las tasas de éxito; en cambio, para las estrellas intermedias y tardías el rendimiento es mayor si se utiliza el conjunto completo de 25 índices espectrales, puesto que la ausencia de algu-

nos de ellos provoca en este caso descensos significativos en las tasas de acierto (de más de un 10% en algunos supuestos específicos). En la determinación del tipo espectral se obtiene una predicción global más adecuada con la configuración de 25 parámetros de entrada, pues es esta opción la única capaz de conseguir cotas de acierto superiores al 70% para todos los tipos espectrales; no obstante, los resultados muestran que la clasificación de las estrellas más calientes y más frías (tipos B y M) se realizaría de forma más satisfactoria con las implementaciones de 20 y 18 parámetros, respectivamente, lo cual indica que en estos casos algunos de los índices que incluye el conjunto completo resultante del proceso de análisis de sensibilidad interfieren entre sí provocando este comportamiento anómalo, observado y descrito en detalle en los epígrafes dedicados a la clasificación mediante algoritmos de *clustering* (v. sec. 4.6.8). En el nivel de clasificación correspondiente al subtipo espectral se mantienen las tendencias mencionadas, si bien se advierte que las diferencias entre las configuraciones con 25 y 20 parámetros se suavizan notablemente, especialmente para los tipos A, F y K donde eran muy pronunciadas, alcanzándose una tasa de éxito media más elevada (alrededor del 75%) con la opción en la que se prescinde de todos los parámetros compuestos excepto del ratio K/H y de la energía espectral (configuración con 20 patrones de entrada). Finalmente para estimar la luminosidad espectral no sería recomendable descartar ninguno de los 25 índices de clasificación, ya que es con esta configuración de entrada con la que se obtiene una tasa media de acierto más elevada (en torno a un 66%).

En la etapa final del proceso de perfeccionamiento de los modelos funcionales se diseñaron nuevas redes basadas en algunos de los parámetros espectrales que los expertos aseguran que presentan una mayor influencia en los diferentes grupos espectrales, con el objetivo expreso de completar el estudio de sensibilidad a posteriori de los índices de clasificación. Como ya se ha indicado anteriormente, en las estrellas tardías (tipos K y M) la clasificación manual se centra principalmente en la zona en la que suelen abundar las bandas moleculares de óxido de titanio, es decir, aproximadamente a partir de 5000 Å; por el contrario, en los tipos espectrales correspondientes a estrellas tempranas e intermedias (B, A, F y G), los expertos analizan visualmente las zonas en las que se produce una mayor absorción y emisión de elementos químicos, que se corresponden generalmente con el intervalo de longitudes de onda comprendido entre 3900 Å y 5500 Å. En la tabla 59 se incluyen los subconjuntos de índices seleccionados para discriminar adecuadamente cada tipo espectral siguiendo el consejo de los expertos, así como la tasa de acierto obtenida con cada una de estas variantes sobre el conjunto de 100 espectros de evaluación. En todas las configuraciones se ha empleado de nuevo el conjunto de entrenamiento completo compuesto por los 658 espectros procedentes de los catálogos principal y secundario de referencia; asimismo, la aproximación funcional en estas redes pudo realizarse mediante polinomios de cuarto grado, debido fundamentalmente a que el número de índices espectrales considera-

dos en este último análisis es mucho menor y, por lo tanto, es la familia polinómica FP8 la que consigue un mejor equilibrio entre el número de entradas y el grado de las funciones disponibles, el cual se refleja en un rendimiento más elevado y una capacidad de aprendizaje óptima.

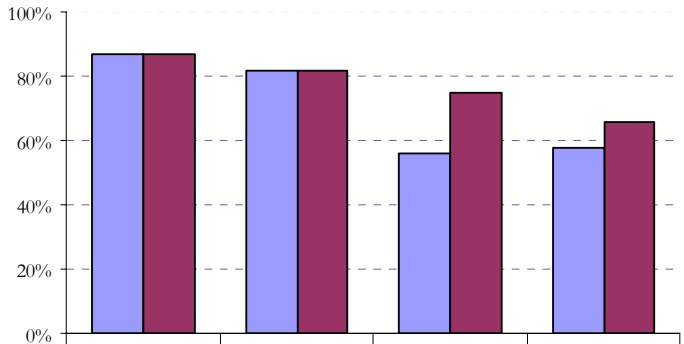
Parámetros B-A	Tasa acierto	Parámetros F-G	Tasa acierto	Parámetros K-M	Tasa acierto
Líneas H I, He I (índices 12-18)	85.29%	Líneas Ca II, H I (índices 10-13, 16-18)	89.47%	Bandas moleculares (índices 1-9)	67.85%
Ratios entre líneas (índices 19-22)	76.47%	Ratios entre líneas (índices 19-22)	76.31%	Suma de bandas (índices 23-24)	67.85%
Líneas + Ratios (índices 12-22)	81%	Líneas + Ratios (índices 10-13, 16-22)	84.21%	Suma + Líneas HI (índices 12-13, 16-17, 23-24)	67.85%

Tabla 59. Rendimiento de las redes funcionales diseñadas con los distintos conjuntos de índices espectrales

Aunque en la mayoría de los casos se obtiene una clasificación orientativa bastante fiable siguiendo el consejo de los expertos, un análisis pormenorizado de los resultados alcanzados con las diferentes composiciones de la capa de entrada de las redes funcionales permite constatar que la variación de los índices espectrales no influye significativamente en la diferenciación de las estrellas tardías (tipos K y M), puesto que el rendimiento alcanzado considerando como patrones de entrada la anchura equivalente de las bandas moleculares o únicamente la suma de sus valores es idéntico, si bien la tasa de acierto disminuye (en torno a un 4%) con respecto a la que se obtuvo en la discriminación de estas estrellas utilizando el conjunto completo de parámetros espectrales; en cambio, para los tipos tempranos B y A se confirmó que la introducción de cocientes entre líneas afecta negativamente a la capacidad de las redes para resolver la clasificación de estas estrellas, pues los mejores resultados se alcanzaron cuando estas aceptan como entrada únicamente los 7 índices referidos a las líneas de absorción de hidrógeno y helio, logrando en este caso una tasa de acierto muy similar, aunque ligeramente inferior, a la de la configuración completa con 25 parámetros espectrales; finalmente, en los tipos espectrales F y G se consigue un rendimiento óptimo, superior incluso al de la configuración que incluye el conjunto completo, con la opción de construcción de los patrones de entrada basada solamente en el subconjunto de parámetros formado por las líneas de absorción, hecho que es claramente indicativo de que existen algunos índices de clasificación, como por ejemplo la medida de determinadas bandas moleculares, que podrían estar obstaculizando la determinación correcta del tipo espectral en estas estrellas, al eclipsar la influencia de otros parámetros espectrales que han demostrado poseer una mayor capacidad de discriminación para estos tipos.

En la figura 105 se incluye un cuadro comparativo final de los resultados logrados en los diferentes niveles de clasificación estelar con las versiones perfeccionadas y definitivas de las redes funcionales del modelo separable en contraste con los obtenidos con la

implementación original de las mismas. Tal y como sugieren las tasas de acierto finales, la revisión de la composición de la capa de entrada de las redes y la ampliación del conjunto de espectros empleados durante el proceso de aprendizaje ha afectado de forma relevante a la capacidad de los modelos implementados para abordar de forma satisfactoria el proceso de clasificación estelar. Asimismo, se ha verificado que las redes funcionales optimizadas obtienen un rendimiento perfectamente comparable con el del resto de las técnicas analizadas respecto a ambas dimensiones del sistema MK (en torno al 75% para el subtipo espectral y superior al 65% para la luminosidad), lo cual permite concluir que esta técnica de Inteligencia Artificial constituye un método más que apropiado para automatizar el proceso de clasificación manual, razón última por la que las configuraciones neuronales óptimas (redes del modelo separable con 25 y 20 índices espectrales como patrones de entrada) se han incluido en el sistema global de tratamiento de espectros estelares, integrándose de este modo con los procedimientos de clasificación desarrollados previamente mediante otras técnicas computacionales.



	Clasif. global	Tipo espectral	Subtipo espectral	Luminosidad
Redes funcionales originales	87%	82%	56%	58%
Redes funcionales perfeccionadas	87%	82%	75%	66%

Figura 105. Cuadro comparativo del rendimiento de las redes originales del modelo separable y de las versiones perfeccionadas de las mismas

4.8 Análisis de rendimiento. Discusión final de todas las técnicas

A lo largo del presente capítulo se ha llevado a cabo un amplio y detallado estudio de la selección de técnicas propuestas para abordar la clasificación MK sistemática de las estrellas basada en el análisis de su espectro óptico. La capacidad de resolución de cada uno de los métodos computacionales considerados, pertenecientes en su mayoría a la rama de la Inteligencia Artificial, se ha verificado a través de la implementación de distintos prototipos de los mismos que se han adaptado convenientemente a las peculiaridades del proceso tradicional de clasificación, considerando las diferentes alternativas de diseño posibles (estrategias de razonamiento, sistemas de inferencia, métodos de gestión de la incertidumbre, topologías neuronales, algoritmos de aprendizaje, conjuntos de entrenamiento, parámetros de inicialización, familias funcionales, etc.), y analizando minuciosamente los resultados individuales alcanzados con cada uno de ellos sobre un conjunto homogéneo y coherente de espectros de referencia para, en consonancia, refinar las configuraciones originales incluyendo algunas opciones de perfeccionamiento. Las implementaciones más aptas de cada una de las técnicas analizadas, es decir, aquellas que exhibieron un comportamiento más congruente y eficiente a la hora de estimar los diferentes niveles de clasificación espectral durante la fase de experimentación, se han integrado en un único sistema de tratamiento y clasificación de espectros estelares en combinación con los módulos de preprocesado y análisis morfológico desarrollados previamente (véase capítulo 3 para más detalles).

Así, después de haber descrito prolijamente en los epígrafes anteriores las fases de diseño, implementación y validación de los métodos desarrollados, se está ahora en condiciones de contrastar su eficiencia final en la discriminación de los distintos tipos de estrellas, de forma que sea posible determinar los supuestos específicos de clasificación a los que mejor se adapta cada uno de ellos. La comparación apropiada entre todos los métodos considerados es posible, e incluso coherente, gracias a la estrategia de homogeneización seguida durante el proceso de diseño de los mismos, la cual consistió fundamentalmente en llevar a cabo el entrenamiento de las redes neuronales convencionales y su variante funcional empleando exactamente el mismo conjunto de espectros utilizados en los algoritmos de análisis *cluster* para posibilitar el agrupamiento, y en el sistema experto para definir los conjuntos difusos y las reglas de inferencia, garantizándose de este modo que las tasas de éxito obtenidas con las diferentes técnicas sean realmente comparables. En el análisis de los resultados que se expone a continuación, las clasificaciones que incluyen una probabilidad asociada (sistema experto, redes neuronales, redes funcionales y algunos algoritmos de agrupamiento como el FCM o el FKNN) se consideraron como aciertos cuando esta es superior al 70%; además, cuando el valor de confianza no es concluyente (menor del 54%),

se proporciona una clasificación alternativa a la principal, emulando con estas clasificaciones mixtas (G9K0 III, M6 III-IV) en cierto modo el procedimiento que siguen los expertos en las situaciones en las que no hay suficiente información para decidir entre dos subtipos o niveles de luminosidad consecutivos.

En la figura 106 se muestra el rendimiento alcanzando en la clasificación del conjunto estándar de 100 espectros de evaluación (incluido en las tablas 15 y 16) con las mejores implementaciones de las diferentes técnicas computacionales seleccionadas para automatizar el proceso de clasificación bidimensional de las estrellas: sistema experto difuso inspirado en el método de inferencia de Takagi-Sugeno [Takagi 1985] modificado para incorporar factores de certeza; versión perfeccionada del sistema experto anterior empleando las salidas de los modelos neuronales para estimar el valor de certidumbre de cada regla; redes neuronales pertenecientes a los tipos *backpropagation momentum* y RBF que obtienen la clasificación de forma global o a través de una red de redes, entrenadas y validadas con los conjuntos espectrales de los catálogos principal y secundario; algoritmo de agrupamiento *K-means* original y su variante difusa (FCM) con elección aleatoria de los centroides, así como las versiones perfeccionadas de los mismos que incluyen la selección previa de los miembros representativos de cada clase; algoritmos de *clustering* ISODATA, Max-Min y FKNN (con funciones de pertenencia parcial) con selección de centroides aleatorios, y una alternativa evolucionada de cada uno de ellos basada en la elección previa de los representantes idóneos de las clases y en el ajuste óptimo de los parámetros de inicialización (θ_N=10, L=4, I=20, f=0.5, k=6); y finalmente redes funcionales del modelo separable con aproximación basada en familias polinómicas de tercer grado (FP4), y la versión mejorada de las mismas que considera únicamente 20 parámetros espectrales, familias polinómicas más complejas (FP7) y un conjunto de entrenamiento ampliado formado por los espectros de los catálogos de referencia principal y secundario. Asimismo, se incluyen también en el cuadro comparativo las estimaciones de la clasificación de dichos espectros realizadas por dos de los expertos más versados en clasificación que han colaborado en el desarrollo de este trabajo.

En la discriminación entre estrellas tempranas, intermedias y tardías (clasificación global), como puede observarse directamente en la gráfica, destaca claramente sobre las demás la técnica que se ha denominado SE perfeccionado, con un rendimiento cercano al 100% y en todo caso muy similar al del experto humano que obtiene una clasificación más afinada (experto A), lo cual no es sorprendente si se tiene en cuenta que en cierto modo este método combina la mejor versión del sistema experto difuso con las redes de neuronas óptimas mediante la incorporación de los pesos sinápticos de las topologías finales entrenadas en la base de conocimiento en forma de factores de certeza de las reglas; asimismo, para este nivel de clasificación, las redes neuronales entrenadas con el algoritmo de aprendizaje *backpropagation* en sus dos versiones (global y red de redes) y las variantes refinadas de

los algoritmos *K-means* y FKNN obtienen también unas tasas de éxito elevadas, superando incluso a las del experto que formula unas predicciones más modestas (experto B); en las redes funcionales y en el resto de algoritmos estadísticos de agrupamiento, especialmente Max-Min e ISODATA, el rendimiento disminuye ligeramente con respecto al de las mejores opciones (alrededor de un 7% en el peor de los casos), si bien la discriminación de este nivel con un error inferior al 15% puede considerarse un resultado más que aceptable.

En la determinación del tipo espectral, las redes *backpropagation* ofrecen unos resultados altamente satisfactorios que se traducen en una capacidad de resolución de la clasificación de este nivel ligeramente superior (en torno a un 3%) a la de los expertos humanos para el conjunto espectral considerado; a excepción de las redes funcionales cuya estimación es algo peor (alrededor de un 10% de descenso comparado con el rendimiento obtenido con las redes neuronales convencionales), las versiones perfeccionadas del resto de técnicas (sistema experto, redes RBF, algoritmos de *clustering*) obtienen unas tasas de éxito más semejantes (en torno al 90%).

En la estimación del subtipo espectral se observa una mayor homogeneidad entre las distintas técnicas, con tasas de éxito superiores al 70% en las versiones perfeccionadas de todas ellas, si bien cabría destacar la red de redes con aprendizaje *backpropagation* y las versiones óptimas de los algoritmos *K-means*, FCM y FKNN, pues consiguen un rendimiento levemente superior; asimismo cabe mencionar que las alternativas basadas en el sistema experto y en las redes funcionales simples no parecen ser unos buenos predictores de la clasificación en este nivel más restrictivo, pues en ambos la tasa de acierto es sensiblemente inferior, si bien continúa siendo muy similar a la obtenida por el experto B (en torno al 60%).

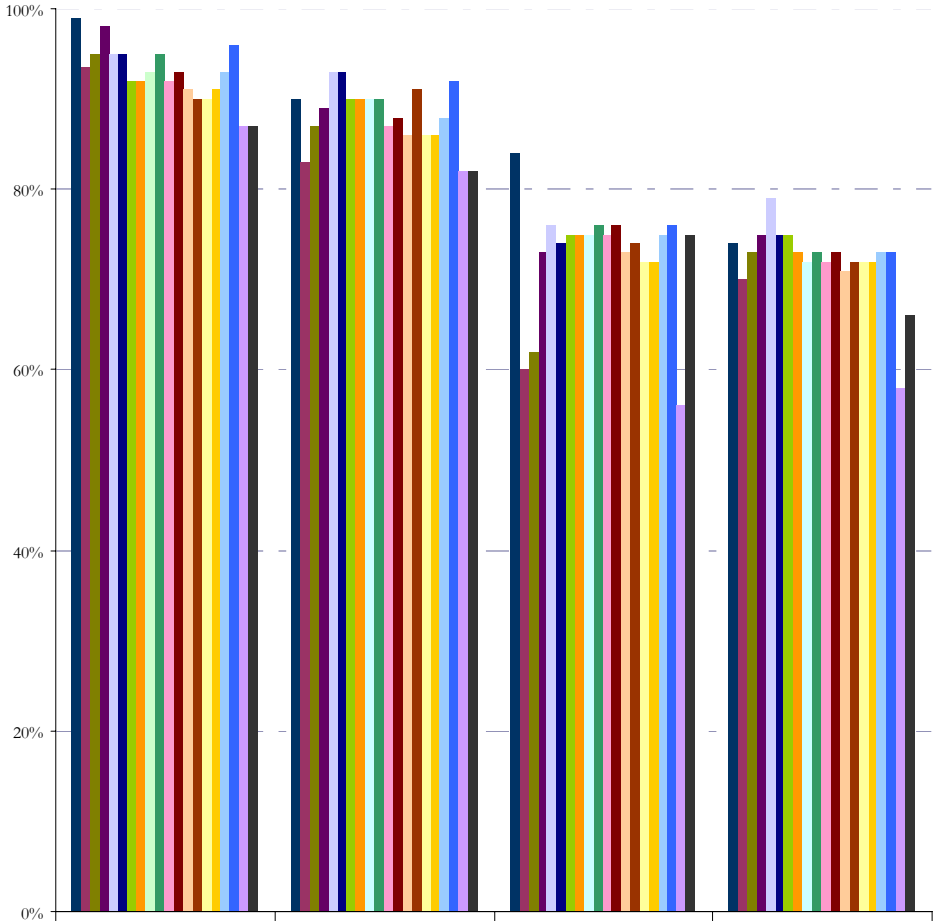
Finalmente, la tendencia de homogeneidad en la clasificación se mantiene para la determinación de la clase de luminosidad, ya que todos los métodos ofrecen unos resultados similares y comparables a los de ambos expertos, a excepción de nuevo de la red de redes *backpropagation* que alcanza una tasa de éxito superior (79%) y de las redes funcionales que, incluso en su versión depurada, no logran simular la capacidad de resolución humana para este nivel.

Aunque la mayoría de las técnicas estudiadas han ofrecido unos resultados muy similares y completamente aceptables dentro de los márgenes de error permitidos (con unas tasas medias de éxito en torno al 90% para la clasificación global, superiores al 85% para el tipo espectral y alrededor del 70% para el subtipo espectral y la luminosidad), un análisis minucioso de los mismos ha permitido descubrir, o incluso confirmar en algunos casos, comportamientos peculiares e interesantes que se producen reiteradamente en gran parte de los métodos implementados, como por ejemplo la confusión entre los tipos A y F en

estrellas con niveles de metalicidad inusuales o el tratamiento erróneo de los espectros que presentan líneas de emisión en lugar de absorción (insólita mezcla de los tipos B y M). Además, se ha constatado también que los métodos que en general han proporcionado las tasas de éxito más elevadas (sistema experto perfeccionado, red de redes *backpropagation*, algoritmos *K-means* y FKNN, etc.), en algunos supuestos concretos no son capaces de afinar tanto ni logran resolver tan satisfactoriamente la clasificación como otros cuyo rendimiento medio es más modesto, como ocurre por ejemplo con las redes RBF en el tipo B o la clase de luminosidad III, el algoritmo Max-Min en los subtipos del tipo K o las redes funcionales en el tipo A.

A raíz de las conclusiones obtenidas y de las mencionadas particularidades observadas en este estudio final y exhaustivo del rendimiento y comportamiento de las técnicas computacionales propuestas para la automatización del proceso de clasificación espectral, se estimó oportuno disponer de la posibilidad de analizar algunos espectros concretos desde todas las perspectivas posibles, por lo que en el sistema general de tratamiento de datos astronómicos se incluyó tanto la opción de clasificación basada en los que han resultado ser los mejores procedimientos para cada nivel específico, como una alternativa de implementación complementaria que ofrece la posibilidad de obtener una clasificación combinada de los espectros con todos los métodos disponibles, de modo que se pueda realizar un análisis conjunto más completo cuando sea necesario basado en las distintas conclusiones obtenidas apoyadas cada una de ellas por un grado de confianza (si así lo contempla la técnica en cuestión), lo cual es esperable que aporte al usuario argumentos más sólidos para tomar decisiones en casos de discrepancia, de ambigüedad o de especial dificultad.

Desde esta perspectiva basada en la combinación y cooperación de varias técnicas computacionales para resolver problemas en un dominio complejo, el sistema de información en desarrollo se constituiría finalmente en una arquitectura modular híbrida o sistema híbrido funcional [Hilario 1997] [Cloete 2000] a través del que se pretende integrar en una única aplicación global el análisis morfológico y estadístico de los espectros, implementado en su mayoría con técnicas de procesamiento de señales, con los métodos que han resultado más eficientes para abordar los diferentes problemas específicos de clasificación MK. Tal sistema, cuyos detalles se recogen en el epígrafe siguiente, debería ser capaz de adaptarse más adecuadamente al propio proceso de razonamiento seguido en este campo del saber humano, pues permite emular de forma más satisfactoria el proceso clásico de análisis y clasificación estelar en el cual los expertos astrofísicos estudian individualmente cada espectro atendiendo a sus características particulares y aplicando de forma selectiva los criterios de clasificación disponibles.



	Clasificación global	Tipo espectral	Subtipo espectral	Luminosidad
Experto A	99%	90%	84%	74%
Experto B	94%	83%	60%	70%
SE difuso	95%	87%	62%	73%
SE perfeccionado	98%	89%	73%	75%
Red de Redes BP	95%	93%	76%	79%
Red global BP	95%	93%	74%	75%
Red de Redes RBF	92%	90%	75%	75%
Red global RBF	92%	90%	75%	73%
K-means original	93%	90%	75%	72%
K-means perfeccionado	95%	90%	76%	73%
FCM original	92%	87%	75%	72%
FCM perfeccionado	93%	88%	76%	73%
ISODATA original	91%	86%	73%	71%
ISODATA perfeccionado	90%	91%	74%	72%
Max-Min original	90%	86%	72%	72%
Max-Min perfeccionado	91%	86%	72%	72%
FKNN original	93%	88%	75%	73%
FKNN perfeccionado	96%	92%	76%	73%
Redes func. originales	87%	82%	56%	58%
Redes func. perfeccionadas	87%	82%	75%	66%

Figura 106. Análisis final del rendimiento de los métodos computacionales que se han trasladado a la implementación desglosado por nivel de clasificación (global, tipo, subtipo y luminosidad)

4.9 Enfoque híbrido

La representación y manipulación computacional de grandes cantidades de conocimiento asegurando al mismo tiempo su integridad, consistencia y explotación efectiva es uno de los principales objetivos de la investigación actual dentro del campo de la Inteligencia Artificial. En esta disciplina cada enfoque diferente (redes de neuronas artificiales, computación probabilística, lógica difusa, etc.) implica un cierto carácter o tendencia que se traduce en un modo particular de gestionar la información incorrecta, incierta o imprecisa, así como en la inclusión de procedimientos más apropiados para manejar datos de tipo simbólico o numérico. No existe pues un método perfecto que sea capaz de representar y gestionar cualquier tipo de conocimiento: simbólico y no simbólico, numérico y discreto, exacto e inexacto, preciso e incierto, específico y general, etc.

Por otra parte, generalmente el conocimiento humano de un dominio apenas puede expresarse en un formato tratable computacionalmente, ya que con frecuencia ni siquiera los especialistas en una materia son capaces de condensar completamente sus conocimientos y experiencia expresándolos en un lenguaje específico y formal, sobre todo debido al hecho de que estos expertos no suelen aplicar un único método de representación y manipulación del conocimiento: los humanos resolvemos los problemas empleando varias estrategias de razonamiento (inferencia, analogía, deducción, etc.) basadas en nuestra propia experiencia, o incluso, en algún conocimiento adquirido previamente. Así, la evolución de las técnicas de Inteligencia Artificial hacia modelos híbridos que integren diferentes enfoques en un único sistema podría considerarse incluso una tendencia natural dentro de esta área, pues es la propia inteligencia humana la que también se apoya en cierto modo en un esquema múltiple e híbrido de representación y manipulación del conocimiento para la resolución de problemas complejos.

Las estrategias híbridas se basan fundamentalmente en la integración de diferentes métodos, conocidos de forma general como herramientas de inteligencia computacional (lógica difusa, computación evolutiva, redes de neuronas artificiales, sistemas basados en el conocimiento, algoritmos genéticos, computación probabilística, teoría del caos, aprendizaje automático, etcétera), en un único sistema robusto explorando sus complementariedades con el objetivo de alcanzar un resultado óptimo en la resolución de un problema específico [Kandel 1992]. Los sistemas híbridos combinan diferentes métodos de representación del conocimiento y estrategias de razonamiento con el fin de superar las posibles limitaciones de las técnicas individuales de Inteligencia Artificial que los componen, e incrementar su rendimiento en cuanto a explotar todo el conocimiento disponible de un campo de aplicación, integrar diferentes tipos de información procedentes de distintas fuentes (simbólica,

numérica, inexacta, imprecisa, etc.) y, en definitiva, ofrecer una búsqueda más potente de respuestas y/o soluciones [Nikolopoulos 1997].

La complejidad y sofisticación crecientes de los sistemas de información modernos indica claramente que para desarrollar soluciones adecuadas y eficientes se requiere la exploración completa de la capacidad de cada técnica que esté a nuestra disposición, tal y como se ha efectuado en el análisis expuesto a lo largo de todo este capítulo, de forma que en dominios complejos como el que nos ocupa se puedan combinar diferentes enfoques computacionales (lógica difusa, sistemas expertos, redes neuronales, procedimientos estadísticos, etc.) orientados a tratar de la forma más adecuada posible cada uno de los aspectos del problema que se pretende solventar, en lugar de confiar completamente en una única tecnología para la resolución del mismo [Eberhart 1996] [Furuhashi 2001]. Aunque existen diversas posibilidades en cuanto al modo de integración y cooperación entre los diferentes componentes de un sistema de estas características, para la automatización de la clasificación estelar las conclusiones de las fases previas de diseño y experimentación con las diferentes técnicas individuales apuntan de forma natural hacia una arquitectura modular híbrida, compuesta por diferentes módulos que incorporen componentes completos tanto simbólicos (sistemas basados en el conocimiento) como conexionistas (redes de neuronas convencionales y funcionales), combinándolos asimismo con técnicas de lógica difusa y algoritmos estadísticos de análisis *cluster* en un único sistema híbrido funcional que opere en modo co-procesamiento [Hilario 1997], es decir, los distintos métodos implementados se consideran funcionalmente equivalentes de modo que todos ellos pueden interactuar directamente con el entorno transmitiendo y recibiendo información de forma independiente, sin que ninguno de ellos dirija completamente el flujo de razonamiento durante el proceso de análisis y clasificación espectral.

Desde la perspectiva transaccional, el sistema de tratamiento de espectros estelares propuesto se podría considerar también un sistema híbrido neuro-simbólico en el que la traducción efectuada es de tipo conexionista-simbólica [Wermter 2000]. En este tipo de arquitecturas, denominadas también modelos de transformación [Medsker 1994], la integración se basa fundamentalmente en el desarrollo de redes de neuronas artificiales que permiten un cierto grado de interpretación simbólica o, más comúnmente, la interacción con métodos simbólicos para codificar previamente el conocimiento o para extraer, refinar y revisar el mismo una vez finalizado el proceso. Típicamente el objetivo consiste en transformar las estructuras simbólicas disponibles en redes neuronales como paso previo al procesamiento (modelos de traducción simbólico-conexionista [Towell 1993] [Mahoney 1993]), o bien en obtener estructuras simbólicas de las redes después del proceso de entrenamiento de las mismas (traducción conexionista-simbólico [Bologna 2000] [Setiono 2000]). En estos últimos modelos la extracción del conocimiento simbólico se lleva a cabo

generalmente a partir de la información aportada por las conexiones neuronales y sus respectivos pesos, transformándola en un conjunto de reglas útiles por medio de métodos de descomposición, pedagógicos o simplemente eclécticos, como sería el procedimiento empleado para ajustar los factores de certidumbre de las reglas difusas del sistema experto de clasificación desarrollado; durante la etapa de perfeccionamiento del desarrollo de tal sistema, se llevó a cabo un análisis semántico de los pesos de las unidades de la capa de salida de los modelos neuronales óptimos (red de redes *backpropagation*) para corroborar o modificar las estimaciones de los factores de certeza (propuestos por los expertos y reajustados previamente mediante técnicas de aprendizaje) de las propias reglas incluidas en la base de conocimiento del sistema experto de clasificación (véase sección 4.4.5 para más detalles). Por lo tanto, atendiendo a esta característica, el sistema final propuesto no solamente podría considerarse un sistema híbrido funcional formado por diferentes módulos que cooperan para obtener la clasificación más adecuada de los espectros estelares, sino que en el propio diseño del mismo se han incluido ya estrategias propias de arquitecturas neurosimbólicas.

Después de evaluar exhaustivamente en las secciones anteriores las diferentes técnicas seleccionadas (consideradas estas de forma individual) en cuanto a su eficiencia en la determinación de la clasificación estelar, los métodos con un rendimiento más satisfactorio se trasladaron desde sus respectivos entornos de desarrollo a un único sistema híbrido desarrollado en C++, utilizando para ello las herramientas de conversión disponibles (creación de DLLs en OPS/R2 para los sistemas expertos, módulo *snns2c* del simulador SNNS para las arquitecturas neuronales, compilador de C *Matlab Compiler* para los algoritmos de agrupamiento y la utilidad *MathCode* C++ incluida en *Mathematica* para las redes funcionales). En este sistema global de tratamiento de espectros estelares será ahora, por tanto, posible efectuar la clasificación espectral desde dos perspectivas diferentes: de forma separada con cada una de las técnicas individuales, obteniendo un conjunto de predicciones aisladas que el propio usuario se encargará de analizar para llegar a una solución de compromiso; o bien iniciando un proceso de clasificación combinada que invoca automáticamente los métodos más eficientes de cada técnica implementada (sistema experto perfeccionado con los resultados del análisis de los pesos neuronales, red de redes *backpropagation*, redes funcionales separables y algoritmos de agrupamiento *K-means* y FKNN en sus versiones perfeccionadas), facilitándose la tarea de valoración de resultados mediante un análisis sistemático y coherente que permite presentar finalmente al usuario un conjunto de soluciones acompañadas de una probabilidad asociada, posibilitando la rápida evaluación de la calidad de las conclusiones ofrecidas. En las figuras 107 y 108 se muestran los resultados obtenidos en un supuesto específico de clasificación cuando se selecciona la opción simple basada en técnicas individuales y el enfoque híbrido mencionado, respectivamente.

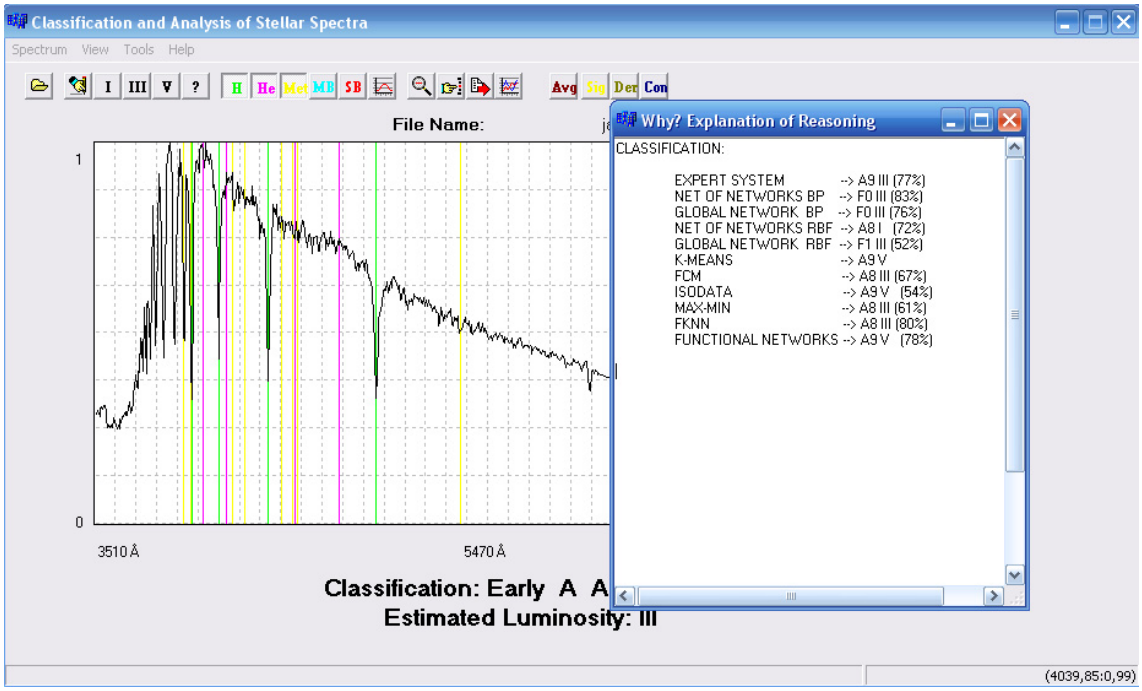


Figura 107. Interfaz del sistema híbrido desarrollado mostrando la opción de clasificación completa con todas las técnicas disponibles

En base a la experiencia adquirida durante la fase de estudio comparativo final de las diferentes técnicas, cuyo resumen puede consultarse en la figura 106, se asignó a cada una de ellas un conjunto de valores de probabilidad de acierto en función de la capacidad de resolución que cada método individual demostró en la clasificación de los espectros del conjunto de evaluación pertenecientes a cada tipo espectral o clase de luminosidad, es decir, cuando se lanza la estrategia híbrida, los diferentes clasificadores óptimos (sistema experto, red de redes, algoritmo *K-means*, etc.) deben combinar la probabilidad que obtienen en sus respectivas conclusiones, derivada del propio proceso de clasificación estelar, con el valor numérico que llevan asociado de forma predeterminada y que es indicativo del grado de confianza que se puede depositar en sus estimaciones sobre un tipo espectral o clase de luminosidad específica. En esta estrategia adicional de clasificación es el propio sistema el que se encarga de analizar los resultados de cada técnica, agrupándolos y aportando un resumen de los mismos, tal y como se observa en el módulo explicativo de la figura 108, de manera que sea posible ofrecer así unas conclusiones finales mejor fundamentadas al mismo tiempo que se dota al procedimiento automático de un cierto grado de autoexplicación.

La integración de los dos tipos de clasificación descritos en un único sistema híbrido contribuye a que esta implementación computacional se adecue más satisfactoriamente a los procedimientos clásicos de análisis y clasificación de espectros estelares, pues mediante la opción que combina las implementaciones óptimas de cada técnica se aporta una clasifi-

cación sustentada en unas bases sólidas que se traducen en conclusiones claras y resumidas para cada nivel considerado, siendo al mismo tiempo posible efectuar un análisis pormenorizado de cada espectro individual con la totalidad de métodos implementados y estudiar así las discrepancias o coincidencias entre las estimaciones proporcionadas por cada uno de ellos.

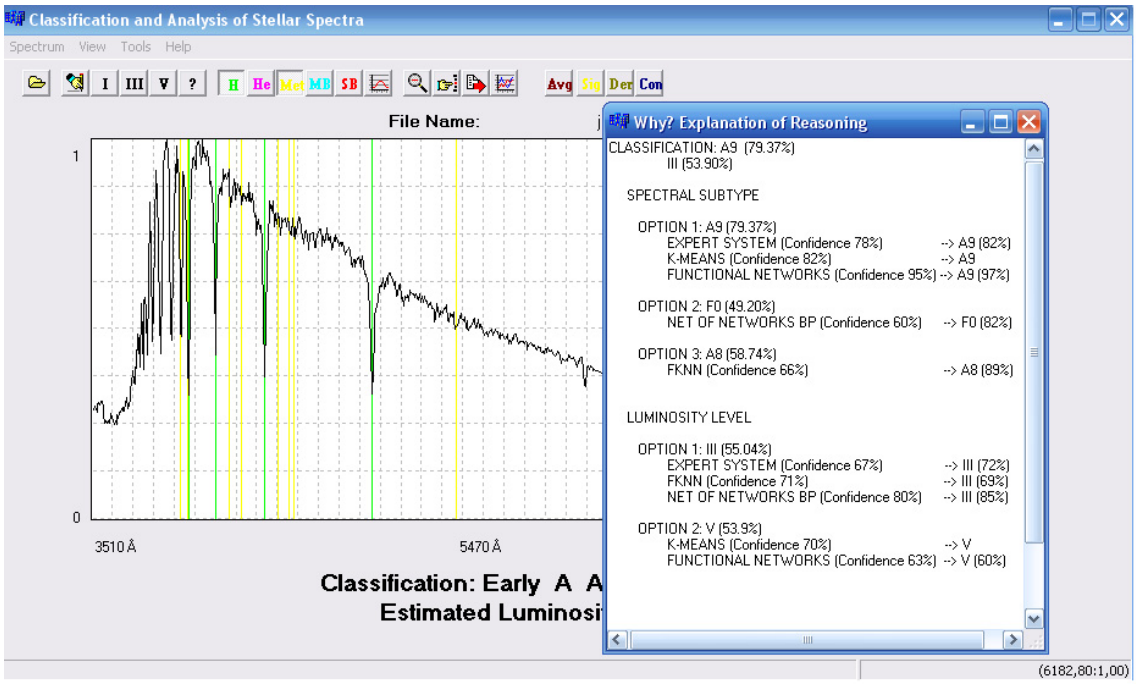


Figura 108. Interfaz del sistema híbrido desarrollado mostrando la opción de clasificación combinada con las técnicas de clasificación óptimas

A través de la interfaz de aplicación del sistema es posible visualizar convenientemente tanto las características más relevantes de los espectros que se desea clasificar (líneas de absorción, bandas moleculares, etc.) como las conclusiones de las diferentes técnicas de clasificación especificadas; en la parte superior de la misma se incluyen unos menús que permiten indicar los espectros sobre los que se va a realizar el procesamiento, seleccionar los análisis morfológicos pertinentes y establecer la estrategia de estimación deseada; los resultados del proceso de clasificación se muestran en la parte inferior de la ventana en un formato sencillo, acompañándose en algunos casos de un informe adicional de explicación del razonamiento seguido para llegar a las conclusiones obtenidas. Los detalles específicos de implementación de los distintos módulos funcionales que forman el sistema híbrido final de tratamiento de espectros estelares se exponen en el anexo IV.

Uno de los objetivos principales implícito en el desarrollo actual de sistemas híbridos consiste en tratar de eludir los inconvenientes particulares de las diferentes técnicas individuales, y usualmente complementarias, que los integran a través de la cooperación

entre ellas de modo que se incremente el rendimiento global, ofreciendo asimismo un abanico de soluciones más amplio. Por ello, con el fin de comprobar la calidad de la solución propuesta, se ha llevado a cabo en este punto una etapa adicional de validación de este primer enfoque híbrido presentado en la que se ha analizado la capacidad de resolución del mismo en los diferentes niveles de clasificación estelar, siguiendo una estrategia análoga a la empleada en las fases previas de evaluación de rendimiento de las técnicas individuales descritas.

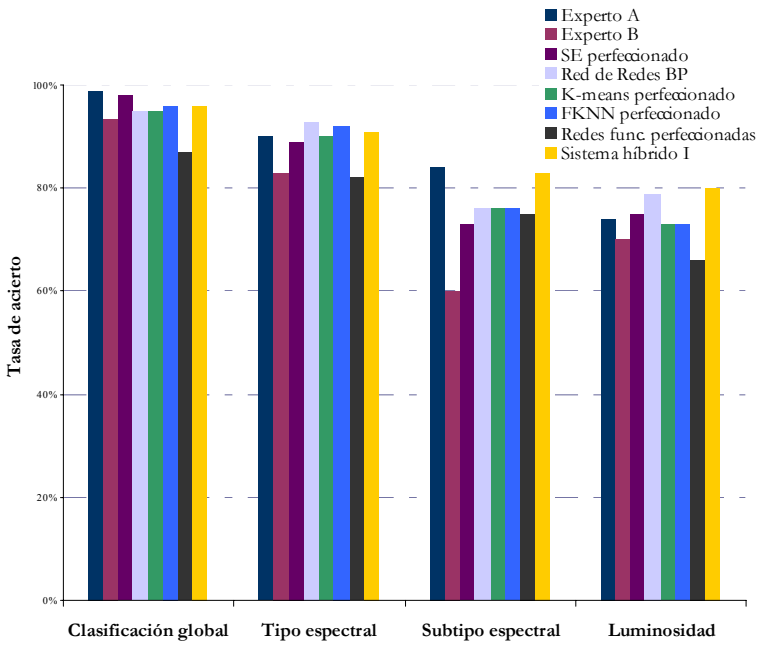


Figura 109. Análisis final del rendimiento del primer enfoque híbrido propuesto y contraste con los métodos óptimos de las técnicas consideradas, desglosado por nivel de clasificación estelar

En la figura 109 se reflejan las tasas de éxito obtenidas tanto por el sistema global como por cada uno de los métodos que lo componen en la clasificación del conjunto estándar de espectros estelares procedentes del catálogo principal de referencia; la tabla 60 muestra, en forma de porcentaje de acuerdo, los resultados del estudio consistente en evaluar la corrección de las clasificaciones asignadas a los espectros sin conocer la fuente de procedencia de las mismas, mediante el cual se contrastaron las estimaciones obtenidas con los diferentes técnicas computacionales con las de los expertos humanos que colaboran en el desarrollo del presente sistema de información; y finalmente en las tablas 61 y 62 se incluye el rendimiento de estas técnicas cuando se aplicaron a la clasificación de conjuntos espectrales más amplios y heterogéneos, como son el formado por 49 estrellas post-AGB reales procedentes de campañas de observación propias [Suárez 2006] y el compuesto por los 486 espectros descartados inicialmente de todos los catálogos de referencia [Silva 1992]

[Pickles 1998] [Jacoby 1984] [Prugniel 2001] por razones tales como un nivel de metalicidad atípico o una clasificación incompleta.

	Experto A	Experto B	SE difuso	Redes BP	Alg. K-means	Alg. FKNN	Redes func.	Sist. híbrido I
Experto A	100%	78%	86%	85%	85%	85%	71%	89%
Experto B	87%	100%	86%	86%	86%	87%	82%	83%
SE difuso	84%	76%	100%	79%	76%	75%	71%	78%
Redes BP	84%	78%	79%	100%	75%	76%	72%	75%
Alg. K-means	83%	76%	76%	75%	100%	78%	70%	71%
Alg. FKNN	83%	77%	75%	76%	78%	100%	70%	72%
Redes func.	78%	72%	71%	72%	70%	70%	100%	70%
Sist. híbrido I	85%	72%	78%	75%	71%	72%	70%	100%

Tabla 60. Análisis de resultados del estudio ciego para evaluar el porcentaje de acuerdo entre los expertos humanos, el primer sistema híbrido propuesto y las diferentes técnicas óptimas de clasificación

Los resultados obtenidos en los estudios comparativos finales confirman la hipótesis de que el enfoque híbrido presentado en esta sección para abordar la clasificación estelar automática emula de forma más satisfactoria el comportamiento de los expertos humanos en este campo que cualquiera de las diferentes técnicas computacionales por sí solas, pues su tasa de éxito en la discriminación del subtipo espectral (83%) y del nivel de luminosidad (80%) es superior a la obtenida por aquellas incluso en sus versiones más depuradas y, tal y como muestran las tablas, se mantiene por encima también en la determinación de la clasificación de conjuntos más amplios de espectros que presentan características especiales tales como alto nivel de ruido o insuficiente resolución; además, el porcentaje de acuerdo entre este sistema híbrido y los expertos que participaron en el estudio ciego es también superior al que estos presentan con el resto de métodos considerados. Esta propensión hacia la mejora del rendimiento era en cierto modo esperable, especialmente si se tiene en cuenta que el enfoque híbrido se basa esencialmente en una estrategia de clasificación que selecciona en cada caso las mejores conclusiones aportadas por los métodos óptimos a partir de un procedimiento de estimación heurística del grado de confianza de las predicciones, consiguiendo así atenuar en gran medida algunos de los problemas que los métodos aislados han demostrado no ser capaces de gestionar, como la ya citada confusión entre estrellas B y M en los casos en los que se produce emisión de elementos en lugar de absorción, si bien es cierto que otros no encuentran tampoco solución en esta alternativa, como por ejemplo la confusión clásica entre espectros A y F de bajo nivel de metalicidad.

El sistema híbrido propuesto en esta sección supone, en definitiva, una alternativa de clasificación más eficiente y flexible, pues es efectivamente capaz de aplicar la técnica computacional más apropiada a cada problema específico, garantizando de este modo un procesamiento del conocimiento disponible más fiable, consistente y adaptado a las estrate-

gias de razonamiento que se emplean en los métodos tradicionales para llevar a cabo la clasificación de las estrellas en el sistema MK. Sin embargo, un análisis más profundo de los resultados reveló que en la discriminación inicial siguen destacando como mejores opciones el sistema experto perfeccionado para determinar el tipo global de la estrella y la arquitectura de red de redes *backpropagation* en el nivel de tipo espectral, si bien es la opción cooperativa la que de forma global consigue obtener unas clasificaciones más apropiadas en cuanto a subtipo espectral y clase de luminosidad. Este comportamiento peculiar del sistema híbrido en estas primeras fases de clasificación parece sugerir la conveniencia de explorar otros tipos de combinación entre las técnicas que lo componen (procesamiento en cadena, subprocesamiento o metaprocesamiento), modificando así su propia esencia de forma que sean estos métodos más adecuados los que actúen como principales clasificadores de cada uno de los niveles que mejor discriminan, dirigiendo de este modo el proceso de clasificación espectral mientras que las restantes servirían únicamente para refinar el mismo.

	Espectros evaluación	**Espectros post-AGB**	**Espectros atípicos catálogo de referencia**
SE difuso	75%	67%	62%
Redes BP	79%	71%	70%
Alg. FKNN	73%	65%	61%
Alg. K-means	73%	68%	66%
Redes func.	66%	54%	52%
Sistema híbrido I	83%	74%	75%

Tabla 61. Resultados del primer modelo de sistema híbrido y de las técnicas óptimas que lo componen para la estimación del tipo espectral desglosados por la fuente de procedencia de los espectros

	Espectros evaluación	**Espectros post-AGB**	**Espectros atípicos catálogo de referencia**
SE difuso	73%	68%	65%
Redes BP	76%	71%	70%
Alg. K-Means	76%	69%	70%
Alg. FKNN	76%	69%	65%
Redes func.	75%	62%	57%
Sistema híbrido I	80%	75%	76%

Tabla 62. Resultados del primer modelo de sistema híbrido y de las técnicas óptimas que lo componen para la estimación del nivel de luminosidad desglosados por la fuente de procedencia de los espectros

Durante la revisión de técnicas computacionales que se ha presentado en este capítulo, se puso de manifiesto que existen una serie de condicionantes relacionados con las características de los catálogos de referencia que sesgan en muchas ocasiones los resultados obtenidos con los diferentes métodos de clasificación, y cuya influencia no ha sido posible contrarrestar ni siquiera con la estrategia híbrida descrita, en la que de nuevo se produce

claramente la correlación entre las tasas de éxito alcanzadas y la composición y tamaño del conjunto espectral con el que se ha efectuado el aprendizaje de las distintas técnicas, de forma que es en aquellos grupos mejor representados y con una distribución más homogénea en los que el sistema logra un rendimiento más satisfactorio.

Los catálogos seleccionados como guía del proceso de clasificación están formados mayoritariamente por espectros compuestos (promedio de varias estrellas) que no se corresponden con estrellas estándares del sistema MK, es decir, con aquellas que los propios autores de este sistema bidimensional de clasificación propusieron inicialmente como modelos o plantillas de cada tipo espectral y clase de luminosidad [Morgan 1943]. Además, esta batería de espectros estelares elegida supone un muestreo irregular del plano de subtipos espectrales y clases de luminosidad, incluyendo frecuentes saltos y huecos entre ellos. Esta fuerte dependencia del conjunto espectral, descubierta durante la amplia fase de experimentación previa con diferentes técnicas de clasificación, indica que para afrontar de forma consistente el problema de la clasificación MK automática es esencial construir una base de datos espectrales de referencia más homogénea y completa que proporcione una buena resolución para cuantos tipos espectrales y clases de luminosidad sea posible, integrada además por espectros correspondientes a las estrellas originales que se utilizaron para definir el propio sistema MK, pues son estas las que constituyen las plantillas estándares y las que han servido de referencia para la mayor parte de las clasificaciones posteriores.

Las principales conclusiones derivadas del análisis completo del rendimiento de las diferentes estrategias de clasificación que se han expuesto en esta sección aconsejan refinar las clasificaciones obtenidas mediante la adopción de otro enfoque híbrido más específico, y a través de la mejora cuantitativa y cualitativa del catálogo de espectros de referencia, de forma que este sea un conjunto estadísticamente significativo de plantillas de estrellas estándares que cubran todo el rango de subtipos y niveles de luminosidad MK. El siguiente capítulo se ocupa del desarrollo de tal sistema híbrido alternativo, en el que se ha llevado a cabo una evolución a partir de este primer planteamiento expuesto que se basa no ya en la integración de métodos óptimos en un único módulo funcional, sino en la propia cooperación activa de los mismos durante el procesamiento lo cual, unido a la confección de nuestro propio catálogo de estrellas estándares, se espera que confluya en un sistema final más eficiente y capaz de solventar algunos problemas que no encontraron solución con este primer enfoque, adaptándose así de manera más satisfactoria al proceso de clasificación de las estrellas en el sistema MK.

5 CLASIFICACIÓN ESPECTRAL AUTOMÁTICA: ENFOQUE HÍBRIDO II

Se requieren nuevas formas de pensar para resolver los problemas creados por las viejas formas de pensar

Albert Einstein

El estudio minucioso del comportamiento del primer sistema híbrido de tratamiento de espectros estelares, propuesto como culminación de las distintas alternativas de clasificación estelar automática presentadas en el capítulo precedente, sugiere llevar a cabo un proceso de transformación y perfeccionamiento del mismo que trate de solventar algunas de las carencias observadas. Tal evolución se basará principalmente en el desarrollo de una estrategia más específica y sofisticada que explote los puntos fuertes de las mejores técnicas analizadas, de manera que estas colaboren activamente en la resolución de la clasificación de un modo más eficiente y adaptativo. Asimismo, se pretende por una parte construir un catálogo propio de referencia compuesto por espectros de estrellas MK estándares, que sea más consistente y representativo del total de características morfológicas que pueden manifestarse en los distintos tipos de espectros ópticos y, por otra, revisar y ampliar al mismo tiempo el conjunto de criterios de clasificación seleccionados anteriormente y, por lo tanto, también los índices espectrales a partir de los cuales se inicia todo el proceso automático, de tal modo que en el sistema final se incluyan posibles soluciones para abordar algunas de las peculiaridades interesantes que se han observado durante la experimentación previa, tales como la presencia de líneas de emisión en los espectros o la degeneración de la temperatura de las estrellas con el nivel de metalicidad.

El primer enfoque híbrido surgió como respuesta natural a las carencias que presentaron las técnicas computacionales evaluadas de forma individual, y se orientó fundamentalmente a la cooperación funcional (en modo de co-procesamiento) [Hilario 1997] de las más exitosas de entre ellas, integradas en un único sistema de información con arquitectura modular híbrida en el que se incluyeron asimismo mecanismos de traducción de tipo conexionista-simbólica, como el ajuste de los factores de certeza del sistema experto a partir

del estudio semántico de los pesos de las redes neuronales, propios de sistemas híbridos neuro-simbólicos [Wermter 2000].

El sistema final desarrollado ofrece, como se ha indicado, la opción tanto de efectuar análisis detallados de los espectros a través de una estimación individual con cada método particular, como de lanzar un proceso combinado basado en las implementaciones óptimas de los mismos, de forma que a través de esta clasificación mixta se pueda alcanzar finalmente una conclusión mejor fundamentada, argumentada y apoyada por un grado de confianza que permita resolver en casos de ambigüedad. Los resultados obtenidos con el sistema híbrido inicial confirman que este constituye una solución computacional más eficiente, versátil y próxima al método tradicional que cualquiera de las técnicas individuales (incluso en sus versiones más afinadas), con tasas de éxito por encima del 80% tanto en la determinación del subtipo espectral como del nivel de luminosidad, ya que es capaz de extraer las respuestas óptimas en cada caso específico mediante un procedimiento heurístico basado en el grado de confianza de los distintos métodos implementados para el nivel de clasificación espectral considerado en cada momento, logrando así tratar más rigurosamente los diferentes aspectos de la clasificación estelar a la vez que proporciona respuesta a algunas de las cuestiones que no había sido posible resolver apropiadamente aplicando las técnicas propuestas de forma separada.

En el presente capítulo se propone una estrategia neuro-simbólica alternativa que, partiendo de la perspectiva híbrida descrita, progresa hacia un esquema en el que las diferentes técnicas cooperan entre sí eficientemente durante la búsqueda de soluciones operando en modo de procesamiento en cadena, de manera que cada método individual se ocupa únicamente de aquellos niveles de clasificación estelar que ha demostrado ser capaz de discriminar más satisfactoriamente: será ahora un sistema experto perfeccionado el que dirija el proceso de clasificación interactuando con el entorno y efectuando una discriminación inicial, en función de la cual el procesamiento se bifurcará hacia una u otra arquitectura neuronal específica, reservándose las restantes técnicas computacionales consideradas únicamente para complementar aquellas conclusiones que se estime oportuno.

La experiencia acumulada en el exhaustivo análisis de estrategias de clasificación efectuado en desarrollos previos [Rodríguez 2004] [Dafonte 2005] [Rodríguez 2008], señala que el diseño de un sistema híbrido de estas características debería sustentarse en la selección de un conjunto de criterios de clasificación más amplio, preciso y contrastado, los cuales deberían incluirse en forma de reglas difusas en la base de conocimiento del sistema experto inicial, con el objetivo de aumentar la capacidad de resolución del mismo al tener en cuenta algunas de las características morfológicas inusuales de los espectros, tales como la ausencia de líneas de hidrógeno, el enrojecimiento, la degeneración de la temperatura con el nivel de metalicidad en estrellas intermedias (confusión clásica entre los tipos A y F), la

superposición entre líneas cercanas o la presencia de líneas de emisión en lugar de absorción (atípica confusión entre estrellas B y M). Asimismo, la fuerte dependencia observada entre el rendimiento final de las soluciones propuestas anteriormente y la composición específica de la base de datos espectrales, aconseja la elaboración de un catálogo propio de espectros de referencia formado por plantillas de estrellas estándares del sistema de clasificación MK, de forma que se obtenga un conjunto completo y estadísticamente significativo de espectros con el que se llevará a cabo el entrenamiento de los modelos neuronales y que, al mismo tiempo, servirá de guía para la definición de las funciones de pertenencia de los distintos conjuntos difusos del sistema de inferencia inicial.

En las siguientes secciones se exponen los detalles concernientes al desarrollo del sistema híbrido final que se propone como solución alternativa para llevar a cabo la clasificación estelar, el cual se espera que, mediante la adopción de las medidas de perfeccionamiento mencionadas, suponga una emulación más satisfactoria del proceso de razonamiento clásico que se sigue comúnmente en esta área, erigiéndose en un método de clasificación más eficiente, adaptado y capaz de gestionar algunos de los problemas que no pudieron ser resueltos en la primera aproximación del mismo formulada en el capítulo precedente.

5.1 Elaboración de un catálogo de espectros de estrellas estándares

La aplicación inicial de técnicas de Inteligencia Artificial al análisis de espectros estelares en nuestro grupo de investigación se orientó, como ya se ha indicado, al desarrollo de un sistema experto específico que sirviese de apoyo al estudio sobre las últimas fases de la evolución estelar, campo en el que había surgido la necesidad de obtener la clasificación MK de un conjunto amplio de objetos identificados como posibles estrellas en la fase post-AGB [Suárez 2001]. En esta primera experimentación, y en todas las que siguieron, se eligieron como plantillas para la clasificación los espectros integrantes de los catálogos de referencia que se estaban empleando hasta el momento en el método de clasificación tradicional basado en el estudio visual de los espectros [Silva 1992] [Pickles 1998] [Jacoby 1984]. Así, seleccionando los representantes más adecuados y contrastados de cada tipo espectral y clase de luminosidad, se confeccionó una base de datos propia compuesta por 258 espectros ópticos procedentes en su totalidad de estas librerías espectrales (véanse tablas detalladas en el anexo II).

En el proceso de evaluación de las diferentes técnicas computacionales propuestas para abordar la clasificación estelar durante las distintas etapas del desarrollo, cuyos detalles concretos se han expuesto ya en los capítulos precedentes, se observó una clara correlación entre la calidad de las estimaciones obtenidas y la composición específica de los catálogos espectrales empleados como referencia; es decir, se verificó que, independientemente del método de clasificación aplicado, el mejor rendimiento se alcanza invariablemente para aquellos grupos de los que se dispone de un mayor número de espectros distribuidos más homogéneamente en los catálogos guía, ya que son estos tipos espectrales y/o clases de luminosidad los que se consigue delimitar más satisfactoriamente durante las fases de diseño y aprendizaje de las diferentes técnicas consideradas. Esta influencia se mantiene incluso en la estrategia híbrida en la que se combinan los distintos métodos, donde se observa que las características particulares de la base de datos de espectros de referencia continúan condicionando en gran medida la capacidad de resolución del sistema final implementado.

La experiencia adquirida durante todos estos desarrollos previos apunta que, si se pretenden refinar las clasificaciones obtenidas con los métodos propuestos, sería preciso mejorar cuantitativa y cualitativamente el conjunto de espectros de referencia mediante la elaboración de un nuevo catálogo más completo, representativo y estadísticamente significativo que proporcione una buena cobertura para tantos subtipos espectrales y clases de luminosidad del sistema MK como sea posible [Manteiga 2009]. La base de datos inicial, resultante del estudio del proceso de clasificación manual, no efectúa un muestreo regular de todo el rango de características morfológicas que pueden presentar los espectros ópti-

cos, además de que está constituida en su mayoría por espectros promediados que no corresponden a estrellas estándares del sistema de clasificación MK, es decir, aquellas que los autores del mismo adoptaron originalmente como modelos para definir cada tipo espectral y clase de luminosidad [MK 2010], y que son también las que han servido de referencia para muchos de los trabajos de clasificación realizados posteriormente.

La clasificación espectral de las estrellas, tal y como se conoce actualmente, se formalizó en un sistema empírico mediante la publicación en 1943 del primer atlas de clasificación de espectros fotográficos estelares [Morgan 1943]. El esquema bidimensional de clasificación MK se define a través de un conjunto de estrellas estándares, con diferentes características morfológicas peculiares observables directamente en su espectro óptico.

A lo largo de años de aplicación, el sistema MK ha sufrido un proceso constante de revisión en el que se han ido corrigiendo los grupos iniciales propuestos e incorporando pequeñas modificaciones para, principalmente, incluir los nuevos tipos de estrellas descubiertos [Morgan 1978] [Keenan 1976] [Gray 1987-2009] [Kirkpatrick 1995] [Keenan 1999] [Walborn 2002]. Sin embargo, la clasificación actual continúa rigiéndose por los mismos principios que se formularon originalmente, ya que este sistema de categorización basado en el análisis de los espectros en el rango visible ha demostrado ser una herramienta muy útil para la obtención de información cuantitativa como la temperatura efectiva o la gravedad de las estrellas. Su aplicación es, no obstante, limitada sobre todo debido a la falta de buenas calibraciones y al importante grado de subjetividad inherente al procedimiento en el que se basan las estimaciones realizadas, es decir, la comparación visual de los espectros con el conjunto original de plantillas de estrellas estándares. Asimismo, es necesario tener en cuenta que los criterios que definen los tipos espectrales y clases de luminosidad del sistema primigenio se propusieron únicamente para estrellas de población I, a partir de espectros fotográficos en el rango de longitudes de onda azul-violeta y con una resolución acorde a los espectrógrafos existentes en la época (2-3 Ángstroms por píxel). De hecho, el uso del esquema MK más allá de sus límites iniciales podría conducir a clasificaciones erróneas, como por ejemplo el error típico de asignación de tipo espectral A (población I) a estrellas que son en realidad de población II, con tipo espectral F y un nivel bajo de metalicidad [Gray 2010].

Aunque en años recientes las herramientas de síntesis espectral se han convertido en una técnica frecuente para efectuar estudios estelares, el sistema MK sigue vigente pues continúa proporcionando una clasificación estable que aporta información empírica básica sobre las estrellas que no depende de modelo matemático alguno y que, por tanto, no acusa las limitaciones que se han observado en calibraciones posteriores a través de parámetros atmosféricos, las cuales en muchos casos son incompletas y no cubren totalmente el diagrama H-R [Gray 1994a] [Garrison 2002]. El uso de un conjunto preestablecido de estrellas

estándares es fundamental, puesto que favorece el mantenimiento de una cierta autonomía del esquema de clasificación con respecto a conceptos teóricos susceptibles de variación, garantizando asimismo un cierto grado de coherencia y homogeneidad en las estimaciones realizadas por diferentes observadores.

En base a las razones expuestas y siendo el objetivo primordial de este capítulo la aplicación del paradigma de sistemas neuro-simbólicos a la automatización de la clasificación en el sistema MK descrito, es esperable que la aproximación computacional híbrida desarrollada sea más satisfactoria si se adopta la perspectiva de sustentar tanto la fase de diseño de la base de conocimiento de los sistemas expertos, como la etapa de aprendizaje de las redes neuronales en un conjunto lo suficientemente amplio y significativo de espectros de las propias estrellas estándares que sirvieron para definir originariamente el sistema de clasificación. De acuerdo por tanto a esta estrategia, se confeccionó finalmente una base de datos de referencia extensa compuesta por 361 espectros de estrellas MK estándares, de los cuales 279 proceden de catálogos estelares públicos y disponibles *online* [Valdes 2004], mientras que los 82 restantes se obtuvieron a través de observaciones astronómicas propias.

Figura 110. Fotografía del telescopio NOT en el crepúsculo, en su localización cercana a la Caldera de Taburiente (La Palma)

Los espectros provenientes de observaciones directas se recopilan a través de campañas telescópicas en las que se realizan varias mediciones de las mismas estrellas, recogiéndose la distribución de flujo energético de cada objeto observado. En concreto, se llevaron a cabo tres campañas de observación en el telescopio NOT (*Nordic Optical Telescope*) de 2.56 m de diámetro situado en el Observatorio Astronómico Internacional del Roque de los Muchachos, en la isla de La Palma [IAC 2010]. El objetivo de estas observaciones consistió fundamentalmente en obtener espectros de buena relación calidad ruido de estrellas estándares del sistema MK para las cuales no se disponía de espectros adecuados en los catálogos astronómicos públicos, especialmente en aquellos subtipos para los que se carecía de una buena cobertura en la base de datos inicial.

El acceso a observaciones astronómicas en telescopios profesionales se realiza a través de solicitudes de tiempo de observación, según convocatorias normalizadas que resuelve un comité internacional de expertos en función del interés y calidad de las propuestas. En nuestro caso, las propuestas de observación de estándares se presentaron al CAT (Comité de Asignación de Tiempo) de los observatorios de Canarias durante 4 semestres sucesivos (2005A y B y 2006A y B), logrando un total de 12 noches de observación. De

todo ese período solamente fue aprovechable para la toma de espectros estelares un 50% del tiempo concedido, fundamentalmente debido a problemas de humedad, malas condiciones climatológicas y, en algunos casos, problemas técnicos en el telescopio. El diario de observaciones específico de estas campañas se incluye en el anexo I.

El telescopio óptico NOT tiene montura altazimutal y un espejo primario f/2.0, es de tipo Ritchey-Chrétien (reflector Cassegrain con ambos espejos, primario y secundario, hiperbólicos) con un diámetro de 2.56 m y un valor del cociente diámetro/espesor de 13.5. La razón focal efectiva del telescopio es de 11.0 y el campo de visión sin viñeteo de 25 minutos de arco. El telescopio dispone de un sistema de servo control instalado en su propio ordenador que gestiona la rotación del mismo respecto a los ejes azimutal y de altitud, la rotación del adaptador del instrumento montado, el sistema neumático de soporte del espejo primario, los movimientos de enfoque y desplazamientos laterales del espejo secundario, el sistema de autoguiado e incluso la rotación del propio edificio en el que está ubicado el telescopio, realizando asimismo los cálculos para las correcciones de refracción. La precisión tanto del apuntado como del seguimiento es de aproximadamente 2 segundos de arco y una décima de segundo RMS, respectivamente.

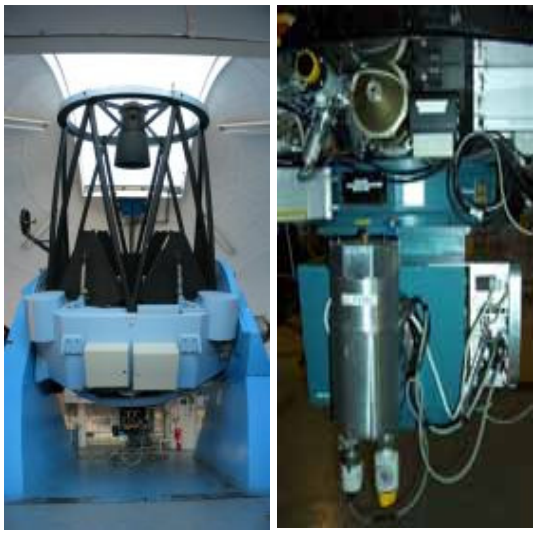


Figura 111. Fotografías del telescopio NOT (izquierda, autor M. Gålfalk) y del espectrógrafo ALFOSC en su base (derecha, autor R. Rekola)

El espectrógrafo empleado en las distintas campañas de recogida de estándares fue el ALFOSC (*Andalucía Faint Object Spectrograph and Camera*), construido en el Observatorio astronómico del *Niels Bohr Institute for Astronomy, Physics and Geophysics*, el cual es propiedad del Instituto de Astrofísica de Andalucía (IAA) y se encuentra instalado de forma permanente en la base del NOT. Este instrumento, que tiene un campo de visión de 6.4x6.4 minutos de arco en modo imagen, también se utiliza de forma habitual para realizar observaciones espectroscópicas de resolución baja e intermedia y para polarimetría. Entre el conjunto de redes de difracción disponibles, se seleccionaron los grismas número 8 y 14, y el detector CCD8, ya que permiten cubrir la región espectral de interés situada entre 3275 Å y 8350 Å con una resolución espectral aproximada de 4 Å por píxel. Se decidió priorizar las observaciones con la red número 14, que cubre la región fotográfica típica para clasificación espectral entre 3275 Å y 6125 Å, en previsión de que finalmente se dispusiese de menos tiempo de observación del inicialmente previsto. En el manual del telescopio, disponi-

ble *online*, se pueden encontrar los detalles técnicos adicionales relativos al telescopio y a la configuración instrumental utilizada [NOT 2010].

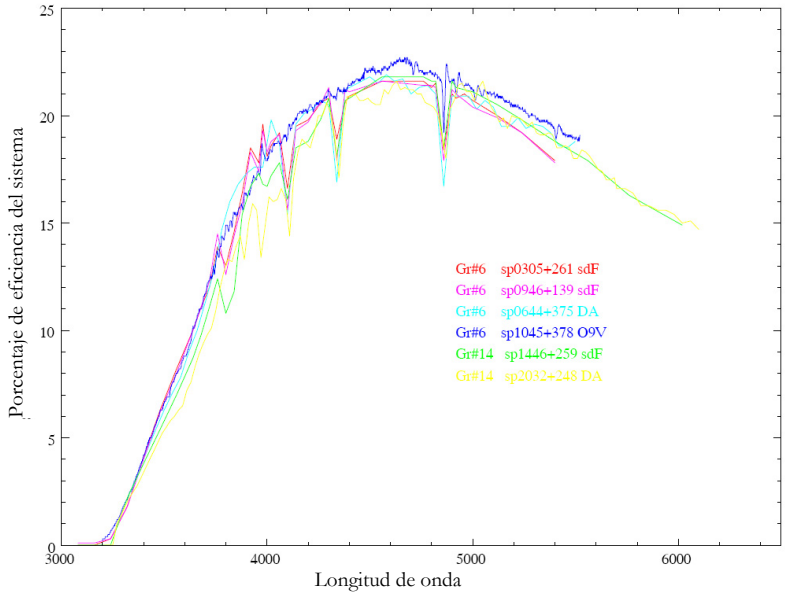


Figura 112. Curva de eficiencia de 4 redes de difracción (grismas) utilizadas en el telescopio NOT

Las imágenes resultantes de la lectura del CCD, que contienen la información espectral de las estrellas observadas, han de corregirse de efectos instrumentales y calibrarse mediante una serie de programas informáticos específicos en lo que se conoce en Astrofísica como *proceso de reducción de imágenes espectrales*. El producto final de dicho proceso será un espectro monodimensional que contenga el flujo estelar recibido en función de la longitud de onda. El formato en que se codifican las imágenes es el estándar FITS (*Flexible Image Transport System*), empleado comúnmente en Astronomía para distribuir datos. Para el proceso de reducción de imágenes astronómicas es habitual la utilización de paquetes de software de distribución libre que llevan implementadas rutinas adaptadas a los principales observatorios del mundo y a las configuraciones instrumentales más habituales. El paquete informático de uso más frecuente, y el que se ha empleado para reducir las imágenes espectrales observadas para esta tesis, es el software de reducción y análisis IRAF (*Image Reduction and Analysis Facility*) desarrollado por el NOAO (*National Optical Astronomy Observatories*) [IRAF 2010]. De forma genérica, los pasos a seguir para reducir las imágenes espectroscópicas serían los que se incluyen a continuación:

1. Determinación del nivel de pedestal o nivel cero (*bias*): se trata de eliminar un nivel de cero que contienen los datos y que es añadido electrónicamente, simplemente para mantener el valor positivo del número medido. Este valor puede variar píxel a

píxel a través del detector y también a lo largo de la noche, por lo que se suelen tomar varias imágenes de *bias* (con tiempo de integración cero) al principio y final de la noche, los cuales posteriormente se analizan y promedian para determinar la corrección que es preciso aplicar.

2. Corrección de sensibilidad (*flat-field*): en este caso se corrige la no uniformidad de la respuesta píxel a píxel y a gran escala. Para ello se necesitan imágenes de un campo suficientemente plano y con un nivel alto de cuentas para reducir el ruido (>10000 cuentas). En general se suelen considerar tres tipos de *flat-fields*: observaciones del propio cielo tomadas al atardecer o al amanecer, de luz reflejada de la cúpula del telescopio iluminada o iluminación directa por lámpara halógena. En el caso de espectroscopia, las imágenes de *flat-field* presentan estructuras muy diferentes a lo largo de las direcciones espacial y espectral; en general se usarán exposiciones de una lámpara de luz blanca o la cúpula iluminada. En la dirección espectral la estructura observada es la convolución de varias funciones: el color de la luz utilizada, la transmisión de la red de dispersión y la respuesta espectral del detector. Lo que interesa corregir son las variaciones píxel a píxel que se presentan para cualquier tipo de iluminación, por tanto se debe eliminar esa estructura a gran escala que es peculiar al tipo de exposición y que no tiene por qué aparecer en los objetos de interés. El procedimiento habitual para suprimir esta estructura consiste en el ajuste de una función suave al promedio de todas las filas o columnas a través de la dirección espacial, determinando finalmente la corrección a partir del cociente entre las dos. En la reducción de imágenes de los objetos observados para este desarrollo se utilizaron *flat-fields* tanto de cúpula como de cielo.

3. Píxeles muertos o no lineales: la calidad del CCD condiciona la obtención de píxeles deficientes, es decir, aquellos que no responden como la mayoría a la luz que reciben o, más comúnmente, no tienen una respuesta lineal. Estas alteraciones se suelen corregir mediante interpolación de los píxeles vecinos.

4. Calibración en longitud de onda: para asignar la longitud de onda adecuada a cada píxel en la dirección espectral se toman imágenes de la luz de lámparas de calibración (arcos) que se hace pasar por la misma configuración espectral que la luz de las estrellas (rendija, espectrógrafo y red de difracción). Estas lámparas han de presentar líneas de emisión bien distribuidas a los largo de toda la región espectral considerada, debiendo elegirse en correspondencia con la red de difracción utilizada (en nuestro caso se empleó una lámpara de Torio-Argón). Para proceder a la calibración es preciso contar asimismo con un atlas espectral en el que se identifiquen las líneas de emisión presentes en la imagen del arco de calibración. Esta información está disponible tanto en el propio telescopio como en la página web del observato-

rio, incluyéndose también en los programas de reducción de observaciones astronómicas más comunes para los principales tipo de arcos de calibración. El programa de reducción interactivo que se utiliza para identificar las líneas en nuestros arcos se denomina *identify*, cuya salida está constituida por una tabla con los parámetros de las líneas identificadas y del ajuste en la dirección espectral. Partiendo del resultado obtenido con este software, el siguiente paso consiste en identificar las líneas a lo largo de toda la imagen, para lo cual se utiliza la rutina no interactiva *reidentify*, que recibe como entrada tanto la imagen de referencia (el arco que se ha utilizado para identificar las líneas) como la imagen en la que se desea identificar de nuevo dichas líneas (el mismo arco). A continuación es preciso ajustar una superficie que defina la longitud de onda en la imagen como función de la posición (x, y), lo cual se lleva a cabo a través de la función *fitcoords* de IRAF. Posteriormente se debe aplicar a cada una de las imágenes espectrales obtenidas de las estrellas la función bidimensional de transformación de cada píxel (x, y) a la longitud de onda ajustada.

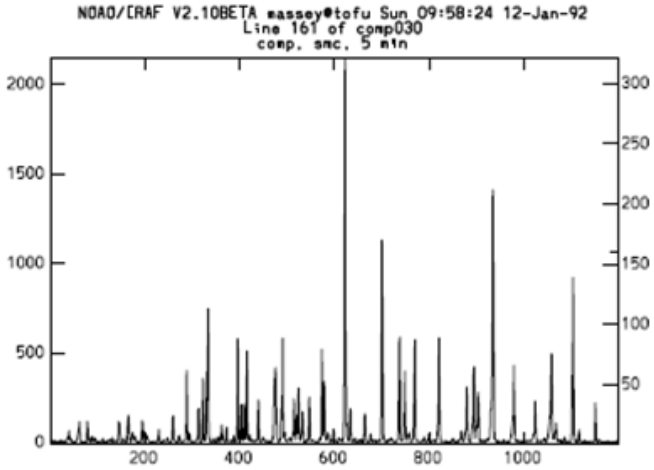


Figura 113. Ejemplo de un arco de calibración en longitud de onda mostrando las líneas de emisión bien distribuidas en la dirección espectral

5. Sustracción del cielo a un espectro: las imágenes espectrales de las estrellas contienen también la distribución espectral del cielo próximo a las mismas (afectado por luz de fondo y absorciones atmosféricas) que, obviamente, sería conveniente sustraer; normalmente se utiliza el cielo a ambos extremos (por encima y por debajo) del propio espectro estelar en cada imagen CCD. El procedimiento disponible en IRAF para llevar a cabo esta tarea se denomina *background*, y es necesario que las imágenes se hayan calibrado previamente en longitud de onda, puesto que este

software para restar el cielo hace un ajuste del mismo a lo largo de cada valor de lambda.

6. Calibración en flujo: para realizar apropiadamente la calibración de las estrellas objeto de estudio es necesario extraer todas las observaciones de un conjunto de estrellas estándares de calibración que se observaron durante cada noche, y comparar los flujos obtenidos en dichas estándares con los valores tabulados de referencia. Los cocientes entre los flujos observados y los tabulados a lo largo de cada intervalo espectral se ajustan determinando una función de sensibilidad, mediante el programa *sensfunc* de IRAF, que finalmente proporcionará la calibración. A continuación se calibra el espectro de la estrella estándar aplicando una corrección para la extinción atmosférica, basada en el valor de la masa de aire en el momento de observación y en la función de extinción considerada para el observatorio. Una vez obtenida la función de sensibilidad, se puede proceder a calibrar en flujo los espectros de las estrellas observadas en cada una de las noches.

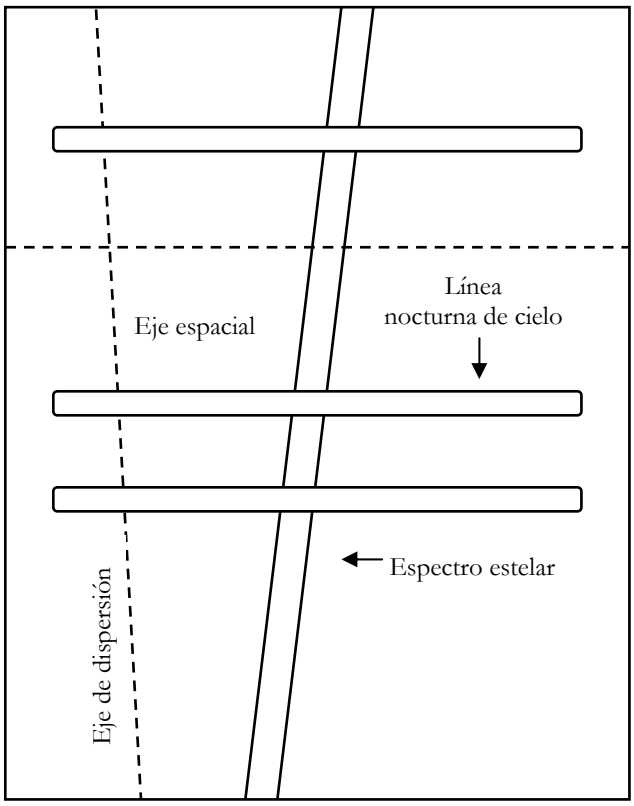


Figura 114. Imagen espectral esquemática mostrando la dispersión de la luz de una estrella en la dirección espectral (eje OY), y la contribución de tres líneas de cielo (la dirección espacial es la del eje OX)

7. Extracción del espectro monodimensional: para obtener el espectro definitivo de cada estrella se debe conocer la región del CCD donde se encuentra distribuida su luz y ajustar una función de apertura que indique cómo sumar el flujo de luz en la dirección espacial. Esta tarea se realiza con la rutina de IRAF *apfind*, mediante la cual se determina para cada imagen la ubicación del pico de flujo en la dirección espacial y la anchura adecuada de la apertura. Finalmente, el espectro unidimensional se extraerá sumando los flujos en la dirección espacial a lo largo de la apertura obtenida.

Los 82 espectros de estrellas estándares MK resultantes del proceso de reducción descrito tienen el formato de ficheros de texto con dos columnas, una para las longitudes de onda en Ángstroms y otra para la calibración en flujo correspondiente a cada longitud medida en $erg^{-1}\ cm^{-2}\ s^{-1}\ Å^{-1}$.

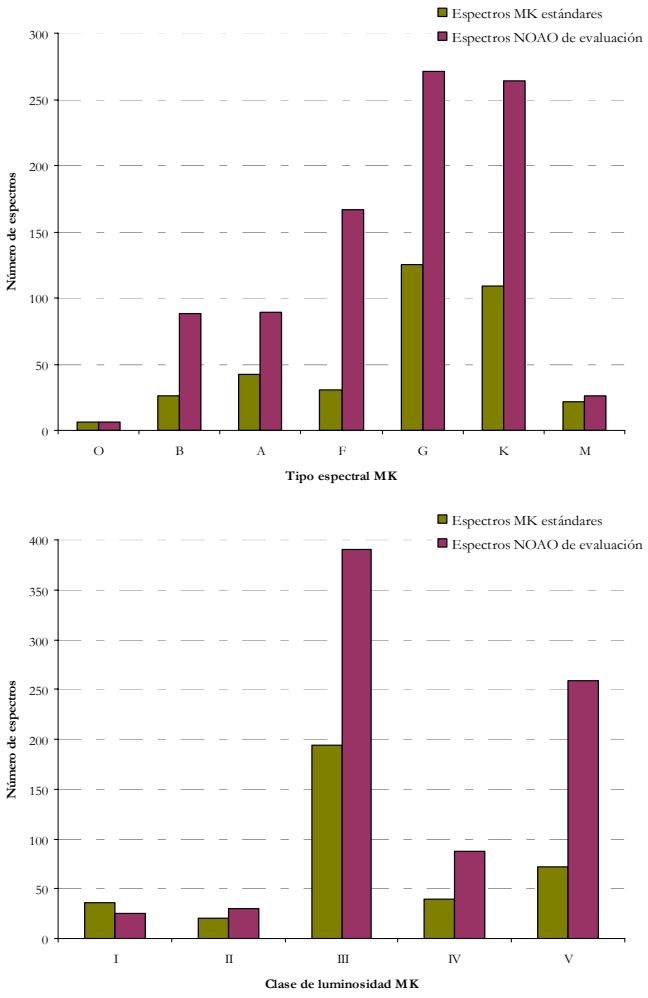


Figura 115. Composición del catálogo de estrellas estándares y de la base de datos de evaluación del sistema híbrido II

El catálogo de estrellas estándares recopiladas se sometió a un proceso intensivo de revisión, previo a su aplicación en el diseño del sistema híbrido de clasificación, pues los espectroscopistas que han colaborado en este desarrollo llevaron a cabo un estudio minucioso de los espectros seleccionados como referencia, apoyándose tanto en el análisis visual de sus características morfológicas más relevantes como en el uso de métodos estadísticos de agrupamiento (fundamentalmente *K-means* y FKNN, por ser los que demostraron un comportamiento más satisfactorio en implementaciones anteriores). De esta forma, como resultado de este proceso selectivo se descartaron todos aquellos espectros que a juicio de los expertos eran excesivamente peculiares o de calidad insuficiente, así como los que las técnicas de *clustering* no fueron capaces de agrupar adecuadamente al presentar diferencias notorias con el resto.

	O	**B**	**A**	**F**	**G**	**K**	**M**	**TOTAL**
I	3/1	8/7	4/4	2/4	9/6	4/1	6/1	36/24
II	---	1/4	1/2	2/6	9/9	3/4	4/4	20/29
III	1/3	5/17	8/16	6/10	72/127	90/199	12/19	194/391
IV		4/20	10/6	8/24	13/19	4/19	---	39/88
V	2/2	8/39	19/53	13/91	22/58	8/16	5/1	72/260
---	---	---	---	---	---	---	---	119
TOTAL	6/6	26/87	42/81	31/135	125/219	109/7	22/7	361/911

Tabla 63. Distribución de tipos espectrales y clases de luminosidad del catálogo final de estrellas estándares (negro) y de la base de datos espectrales de evaluación (azul)

La construcción esmerada de un catálogo de referencia a partir de espectros de estrellas estándares permite disponer de una base de datos homogénea y representativa de las características más relevantes que pueden presentarse en cada tipo espectral y/o clase de luminosidad, ofreciendo asimismo una transición continua entre cada grupo y sus adyacentes. Así, la librería final está compuesta de 361 espectros ópticos de estrellas MK estándares, tal y como se muestra en la figura 115, con una cobertura espectral en el intervalo de 3870 Å a 6240 Å y una dispersión de 2.6 Å píxel^{-1}; los espectros se normalizaron, escalaron, corrigieron y, en definitiva, se adaptaron a un formato fácil de tratar computacionalmente mediante los algoritmos específicos implementados en el módulo de análisis (véase capítulo 3 para más detalles). La distribución en tipos espectrales y clases de luminosidad del catálogo de plantillas estándares se recoge en la tabla 63, donde se han incluido también (resaltados en trazo azul) los espectros pertenecientes al conjunto de evaluación que se va a aplicar para verificar el rendimiento del sistema implementado, el cual está constituido por una selección apropiada de 911 espectros procedentes de la librería digital NOAO-INDO-US [Valdes 2004]. Las características concretas de todos los espectros que forman nuestro ar-

chivo digital pueden consultarse en el anexo II, en el que este se encuentra disponible en formato electrónico y VO (*Virtual Observatory*).

Los espectros de estrellas estándares recopilados son los que van a servir como guía para el diseño del sistema de clasificación, ya que a través de su análisis es posible obtener los valores característicos de algunos parámetros que se incluirán posteriormente en las reglas de razonamiento del sistema experto inicial. Asimismo, serán también estos los que se empleen en el entrenamiento de las redes neuronales del segundo nivel de clasificación de la solución híbrida que se propone en este capítulo. En el epígrafe siguiente se detallan los parámetros espectrales específicos que van a extraerse de cada uno de los espectros de este catálogo estándar para abordar los diferentes niveles de clasificación estelar.

5.2 Análisis de sensibilidad: elección de índices espectrales

El estudio del espectro óptico de las estrellas aporta información relevante sobre las condiciones físicas y composición química de las mismas, tal y como se ha tenido ocasión de comprobar a lo largo de todo este desarrollo. Los diferentes tipos de estrellas presentan características morfológicas singulares observables en muchos casos directamente en sus espectros, siendo estas las que se analizan habitualmente para encuadrar los mismos dentro de las categorías establecidas en el sistema de referencia MK, proceso que se lleva a cabo a través de la comparación visual con las plantillas de estándares que definen tal sistema.

Los criterios originales para la clasificación espectral MK, tal y como fueron formulados por los autores del sistema estándar [Morgan 1943], se basan principalmente en la intensidad de las líneas de hidrógeno de la serie de Balmer, en la presencia o ausencia de líneas de absorción de He I y He II, en la intensidad relativa de las líneas de calcio (Ca II, K y Ca II, H) con respecto a las líneas de H I, y en la ocurrencia e intensidad de líneas metálicas y bandas moleculares. La automatización de la clasificación estelar conlleva necesariamente la compilación del conocimiento acumulado desde entonces en este campo a través de la determinación de un conjunto completo de características morfológicas que es necesario detectar y medir en los espectros, las cuales serán sintetizadas por medio de la definición de una serie de índices espectrales apropiados sobre los que finalmente se apoyará todo el proceso de clasificación.

En el primer enfoque híbrido propuesto en el capítulo precedente, los índices de clasificación se seleccionaron básicamente a partir de los criterios que se empleaban en nuestro propio grupo para clasificar visualmente los espectros según el procedimiento manual tradicional, contrastando estos con los hallados en la literatura disponible en el campo y determinando su resolución real a través de un análisis de sensibilidad exhaustivo de las estrellas de los catálogos de referencia (véanse secciones 4.2 y 4.3 para más detalles). La experiencia adquirida durante el desarrollo de métodos previos [Rodríguez 2004] [Dafonte 2005] [Rodríguez 2008], aconseja llevar a cabo en este punto una revisión de los distintos criterios de clasificación para garantizar que el proceso de diseño del sistema híbrido final se sustente en la definición de un conjunto de índices espectrales más amplio, contrastado y concreto, de forma que este sea capaz de proporcionar una respuesta satisfactoria tanto en los casos en los que se le presenten espectros con características morfológicas comunes como en aquellos que muestren rasgos espectrales atípicos, tales como la superposición entre líneas próximas, la inversión de las líneas de absorción o la ausencia de líneas significativas de helio o hidrógeno.

Así, en el proceso de selección de índices espectrales de clasificación de esta segunda estrategia híbrida, se han considerado fundamentalmente las medidas morfológicas de los rasgos espectrales correspondientes a la anchura equivalente (EW), intensidad de flujo (I) y anchura a media altura (FWHM) de líneas de absorción (H, He, Fe, Ca, K, Mg, Si, Sr, Mn, etc.) y bandas moleculares (TiO, CH, etc.), así como las diferencias y ratios entre las anteriores (Ca II/H, Ca I/Mg, Mn I/Si II, Ca II-H, etcétera).

La calidad de la medida de estas características espectrales, que se obtendrán aplicando los algoritmos de procesado morfológico implementados en el módulo de análisis, depende significativamente de la estimación del continuo espectral local, que no es precisamente una tarea sencilla de automatizar. Se han considerado y evaluado diferentes métodos para la determinación no supervisada del continuo local, encontrándose que los mejores resultados se obtienen a través de un algoritmo ad hoc, inspirado en la técnica incluida en el software INDEX [Cardiel 1999], que detecta las líneas de emisión y absorción mediante el estudio de la derivada y la desviación típica de la función de flujo, ajustando posteriormente el continuo local en unas regiones circundantes (una hacia el azul y otra hacia el rojo) y específicas para cada una de ellas; este cálculo de los continuos laterales se efectúa suavizando la señal de flujo con un filtro paso bajo que rechaza las muestras de cada intervalo con una desviación estándar mayor, interpolando los puntos restantes con ajuste polinómico para estimar el continuo local correspondiente a la longitud de onda de cada característica espectral considerada (véase sección 3.2 para una descripción completa de los distintos algoritmos de procesado morfológico implementados).

Durante las fases iniciales de desarrollo del sistema híbrido que se propone en este segundo enfoque, con el objetivo principal de realizar un estudio lo más completo y consistente posible del proceso de clasificación espectral, se llevó a cabo una medición sistemática sobre los 361 espectros del catálogo de estándares MK de todas las características espectrales ubicadas dentro del rango espectral considerado, independientemente de que estas fuesen o no consideradas relevantes para la discriminación entre tipos espectrales y clases de luminosidad por los expertos y/o la literatura disponible. De entre todos estos criterios recopilados, se seleccionó un subconjunto formado por 109 características espectrales en base tanto a los resultados del mencionado análisis preeliminar como a la experiencia previa adquirida en los procesos manuales de clasificación y en el desarrollo del primer sistema híbrido propuesto. Estos posibles índices espectrales de clasificación elegidos, se contrastaron adicionalmente con la información hallada en las distintas fuentes [Jaschek 1991] [Worthey 1994] [Gray 2009] [Gray 2010] bibliográficas [MK 2010], sometiéndose posteriormente a un proceso análisis exhaustivo donde se verificó tanto su grado de adecuación como la capacidad real de cada uno de ellos para diferenciar entre las diferentes clases de espectros.

El método empleado para verificar la correcta definición de los índices preseleccionados consistió fundamentalmente en un análisis de sensibilidad completo, similar al efectuado en el desarrollo del primer sistema experto (v. sec. 4.3), en el que se estimó el valor de las 109 características espectrales (a través de los algoritmos morfológicos mencionados) para los 361 espectros pertenecientes a la nueva base de datos de referencia, confeccionada como se ha indicado con plantillas de estándares MK, con el fin de evaluar su comportamiento en función de la variación del tipo espectral y de la clase de luminosidad.

En la figura 116 se recogen dos ejemplos de los esquemas gráficos utilizados para determinar la capacidad real de discriminación de algunos de los índices espectrales más significativos. En la gráfica 116-a se muestra la dependencia de la estimación del flujo de la línea H I_δ en 4102 Å (índice 20 de la tabla 64) con respecto al tipo espectral (eje de abscisas) y a la clase de luminosidad (series de datos representadas con diferentes símbolos); la tendencia observada para las estrellas de referencia, indica que este parámetro podría constituir un buen discriminador de los subtipos espectrales desde A2 (donde alcanza su máximo valor) hasta G9, al mismo tiempo que podría servir también para distinguir la clase de luminosidad I (♦) en las estrellas tempranas. La figura 116-b ilustra la relación existente entre la anchura equivalente de la banda de TiO situada en torno a 6208 Å (índice 2) y la clasificación en el sistema MK; el comportamiento exhibido por este índice para las estrellas de referencia permite deducir que, a priori, podría ser apto para determinar el tipo espectral en estrellas tardías, ya que su valor va creciendo a medida que desciende la temperatura, llegando a ser significativo a partir de los últimos tipos intermedios (G8-G9).

En el proceso de análisis realizado en esta etapa previa se descartaron un total de 45 índices de las 109 características morfológicas seleccionadas inicialmente, eliminándose algunos parámetros que teóricamente deberían obtener una resolución apropiada pero que o bien no mostraron una tendencia clara en la clasificación de las estrellas del catálogo estándar de referencia o, aun logrando una discriminación aceptable para algunos tipos espectrales y/o clases de luminosidad, se constató que existían índices capaces de resolver más satisfactoriamente la clasificación para esos mismos grupos (p. ej. la línea de helio en 4026 Å o la banda de TiO en 5160 Å); igualmente, otros parámetros basados en características morfológicas que no se suelen considerar en el estudio visual, al menos de forma explícita, se incluyeron en el conjunto final de índices de clasificación seleccionados a tenor de su comportamiento sobre las estrellas estándares MK (p. ej. la banda de TiO en 6134 Å o la línea de SiII en 4116 Å). La relación completa de esquemas gráficos empleados para evaluar la sensibilidad de las distintas características espectrales seleccionadas inicialmente para la clasificación se incluye en el anexo III.

En la tabla 64 se recoge el conjunto final de índices que se encontraron aptos para caracterizar de forma apropiada los diferentes tipos de espectros, que no son otros que

aquellos que presentaron un patrón claro y reproducible de discriminación entre tipos espectrales y/o niveles de luminosidad durante la etapa de validación sobre los 361 espectros de estrellas estándares que forman el catálogo elaborado para servir de referencia en el proceso de automatización de la clasificación espectral. En las primeras tres columnas de la tabla se incluye la identificación específica de cada índice seleccionado, mientras que en la cuarta se describe el intervalo definido para la estimación del continuo local mediante el algoritmo de análisis morfológico que se especifica en la última columna (v. sec. 3.2); los intervalos laterales se fijaron para cada índice a través de un proceso previo de calibración manual sobre las plantillas de estándares, lográndose de este modo un ajuste más específico y adaptado a las peculiaridades de cada característica morfológica concreta.

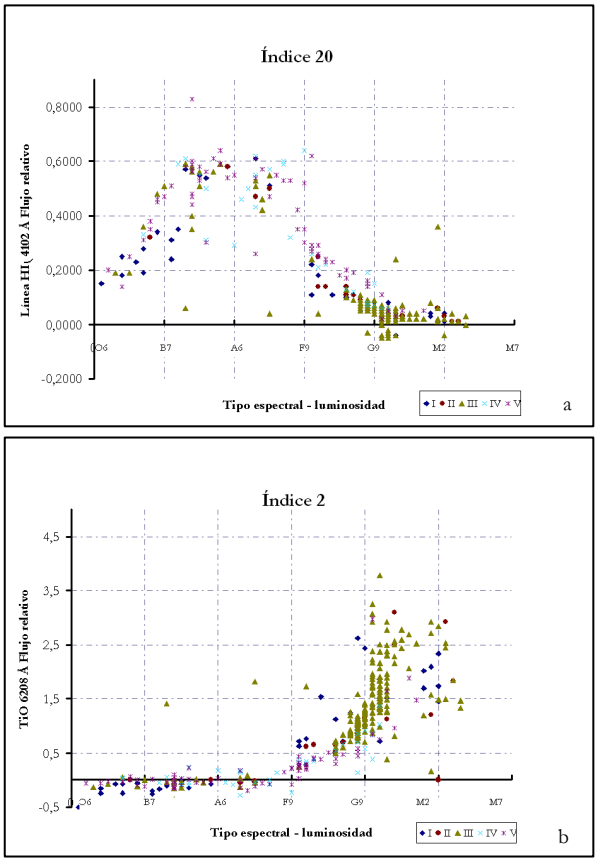


Figura 116a-b. Índices para la clasificación MK a partir de estrellas estándares. Flujo energético como función del tipo espectral y la luminosidad. a) HI_{δ} 4102 Å; b) TiO 6208 Å

Estos índices de clasificación finales serán los que se aplicarán en las distintas etapas del desarrollo del sistema propuesto en este capítulo como estrategia híbrida alternativa y, en este sentido, se utilizarán tanto para definir los diferentes conjuntos difusos y funciones de pertenencia de las reglas del sistema de inferencia inicial como para la construcción de

los patrones de entrenamiento y validación de las redes neuronales específicas, encargadas de refinar la clasificación en subtipos espectrales y en clases de luminosidad.

Id	Índice	Descripción	Intervalo	Alg.
1*	EW (4226 Å)	Línea CaI	4221 Å - 4251 Å	E3
2*	B (6208 Å)	Banda TiO	6208 Å - 6240 Å	E1
3*	EW (4300 Å)	Blend TiO-Fe	4270 Å - 4326 Å	E3
4*	EW (4226 Å)/EW(4101 Å)	Ratio CaI/Hδ	---	---
5	B (5160 Å)	Banda TiO	5160 Å - 5308 Å	E1
6*	EW (5270 Å)	Línea FeI	5245 Å - 5295 Å	E3
7	B (6154 Å)	Banda TiO	6154 Å - 6194 Å	E1
8	B (4953 Å)	Banda TiO	4953 Å - 5063 Å	E1
9	EW (4077 Å)	Línea SrII	4050 Å - 4100 Å	E3
10	EW (4300 Å)/EW (4340 Å)	Blend TiO-Fe/Hγ	---	---
11*	EW (4144 Å)	Línea HeI	4120 Å - 4168 Å	E3
12*	B (6134 Å)	Banda TiO	6134 Å - 6204 Å	E1
13	EW (4455 Å)	Línea CaI	4430 Å - 4480 Å	E3
14	B (4946 Å)	Banda TiO	4946 Å - 5140 Å	E1
15	B (5886 Å)	Banda TiO	5886 Å - 5990 Å	E1
16*	EW (4226 Å)/ EW (4481 Å)	Ratio CaI/MgII	---	---
17	B (6143 Å)	Banda TiO	6143 Å - 6160 Å	E1
18	EW (3933 Å)/ EW (4101 Å)	Ratio CaII/Hδ	---	---
19	EW (4101 Å)/ EW (4144 Å)	Ratio Hδ/HeI	---	---
20	I (4101 Å)	Línea Hδ	4075 Å - 4125 Å 4090 Å - 4110 Å	E2
21*	EW (4032 Å)	Línea MnI	4000 Å - 4055 Å	E3
22*	EW (4026 Å)	Línea HeI	4000 Å - 4052 Å	E3
23	EW (4481 Å)/ EW (4471 Å)	Ratio MgII/HeI	---	---
24*	I (4861 Å)	Línea Hß	4835 Å - 4885 Å 4850 Å - 4870 Å	E2
25	EW (3933 Å)	Línea CaII (K)	3908 Å - 3958 Å	E3
26	I (4026 Å)	Línea HeI	4000 Å - 4052 Å	E2
27*	I (3968 Å)	Línea Hε	3940 Å - 3990 Å 3955 Å - 4980 Å	E2
28	EW (3968 Å)	Línea Hε	3940 Å - 3990 Å 3955 Å - 4980 Å	E3
29	I (4144 Å)	Línea HeI	4120 Å - 4168 Å	E2
30*	I (4116 Å)	Línea SiII	4085 Å - 4140 Å	E2
31*	EW (4173 Å)	Línea FeII	4150 Å - 4200 Å	E3
32	EW (4471 Å)	Línea HeI	4450 Å - 4500 Å	E3

Id	Índice	Descripción	Intervalo	Alg.
33*	EW (4340 Å)	Línea Hγ	4310 Å - 4370 Å 4328 Å - 4352 Å	E3
34*	EW (4226 Å)/ EW (4101 Å)	Ratio CaI/Hδ	---	---
35*	EW (4300 Å)/ EW (4383 Å)	Blend TiO-Fe/FeI	---	---
36	B (6182 Å)	Banda TiO	6182 Å - 6204 Å	E1
37*	EW (5335 Å)	Blend FeI	5300 Å - 5370 Å	E3
38	EW (4226 Å)/ EW (4340 Å)	Ratio CaI/Hγ	---	---
39*	I (3933 Å)	Línea CaII (K)	3908 Å - 3958 Å	E2
40	EW (4405 Å)	Línea FeI	4370 Å - 4440 Å	E3
41*	I (4686 Å)	Línea HeII	4660 Å - 4715 Å	E2
42*	EW (4686 Å)	Línea HeII	4660 Å - 4715 Å	E3
43*	I (4009 Å)	Línea HeI	3980 Å - 4035 Å	E2
44*	EW (4481 Å)	Línea MgII	4460 Å - 4500 Å	E3
45	EW (3933 Å)– EW (4101 Å)	Dif. CaII (K)/Hδ	---	---
46*	I (3933 Å)– I (4101 Å)	Dif. CaII (K)-Hδ	---	E2
47*	I (4121 Å)	Línea HeI	3995 Å - 4145 Å	E2
48*	EW (4032 Å)/ EW (4128 Å)	Ratio MnI/SiII	---	---
49*	I (4405 Å)	Línea FeI	4370 Å - 4440 Å	E2
50	I (4455 Å)	Línea CaI	4430 Å - 4480 Å	E2
51	B (4295 Å)	Banda G, CH	4250 Å - 4335 Å	E1
52*	EW (4009 Å)	Línea HeI	3980 Å - 4035 Å	E3
53*	I (4226 Å)	Línea CaI	4221 Å - 4251Å	E2
54*	I (4300 Å)	Blend TiO-Fe	4270 Å - 4326 Å	E2
55	EW (3933 Å)/ EW (3970 Å)	Ratio CaII (K)/Hε	---	---
56	EW (4045 Å)/ EW (4173 Å)	Ratio FeI/FeII	---	---
57	I (4686 Å)	Línea HeII	4660 Å - 4715 Å	E2
58	EW (4226 Å)/ EW (4340 Å)	Ratio CaI/Hγ	---	---
59	EW (4921 Å)	Línea HeI	4895 Å - 4945 Å	E3
60	I (4383 Å)+ I (4405 Å)	Línea FeI	---	---
61	I (4921 Å)	Línea HeI	4895 Å - 4945 Å	E2
62	I (4481 Å)	Línea MgII	4460 Å - 4500 Å	E2
63	EW (4226 Å)/ EW (4481 Å)	Ratio CaI/MgII	---	---
64	I (5270 Å)	Línea FeI	5245 Å - 5295 Å	E2

Tabla 64. Índices espectrales seleccionados para la clasificación MK en el enfoque híbrido II

Durante el estudio de las gráficas de sensibilidad de los diferentes índices espectrales se tuvo ocasión de confirmar que muchos de ellos son sensibles tanto a la clase de luminosidad como a la temperatura, llegando a ser realmente complicado desacoplar ambas

variaciones. Por ejemplo, como es conocido, las líneas de la serie de Balmer muestran una dependencia significativa de ambos factores, la cual afecta fundamentalmente al ancho de las mismas. Sin embargo, cuando se computa la anchura equivalente se pierde esta información, por lo que es práctica común [Faber 1985] [Worthey 1997] definir dos índices para estas líneas de hidrógeno basados en intervalos de diferente anchura (incluidos en la cuarta columna de la tabla 64), de forma que comparándolos sea posible determinar si se trata de una línea intensa y estrecha propia de estrellas supergigantes, o bien de líneas más anchas correspondientes a estrellas en la secuencia principal.

Los índices marcados con un * en la primera columna de la tabla forman un subconjunto de 30 características espectrales que por sí solas han demostrado ser suficientes para determinar la clasificación en tipo espectral, tal y como se pudo comprobar mediante la aplicación de técnicas apropiadas para reducir la dimensionalidad del conjunto de 64 parámetros resultante del análisis de sensibilidad previo, como son el análisis de componentes principales (PCA) o los algoritmos estadísticos de agrupamiento (K-means, FKNN, Max-Min, etc.), las cuales han permitido minimizar y optimizar el número de índices necesarios para definir las reglas de clasificación adecuadas que permitan al sistema de inferencia difuso determinar satisfactoriamente los tipos espectrales en el sistema MK. En cambio en la clasificación más específica en subtipo espectral y nivel de luminosidad, que se efectuará principalmente mediante redes neuronales, se ha restringido en muchas ocasiones el conjunto total de índices espectrales a las características morfológicas más relevantes del tipo de espectros que cada una de las redes es capaz de discriminar, incluyéndose diferentes subconjuntos de la totalidad de los índices especificados en la tabla 64.

El proceso de clasificación estelar mediante el enfoque híbrido que se propone en las secciones siguientes se basará fundamentalmente en el conjunto de índices resultantes de los diferentes análisis preeliminares expuestos en esta sección, apoyándose al mismo tiempo en todo momento en el catálogo de estrellas estándares del sistema MK que se ha recopilado expresamente para tal fin. Por consiguiente, se espera que este perfeccionamiento de la etapa de diseño del sistema repercuta en un aumento significativo del rendimiento final del mismo, de forma que sea capaz de tratar algunas de las peculiaridades interesantes que puso de relieve la experimentación previa con diferentes técnicas computacionales, entre las que destaca el problema ya clásico de degeneración de la temperatura con el nivel de metalicidad en espectros de los tipos A y F o las complicaciones ocasionadas por la presencia de líneas de emisión en algunos espectros de estrellas tempranas (tipos O y B, principalmente) que conduce a una confusión inusual con las estrellas más frías del sistema MK (tipos K y M).

5.3 Sistema híbrido

En el campo de las Ciencias de la Computación se engloban dentro del área de Inteligencia Artificial todas aquellas técnicas que, partiendo de un modo u otro de la simulación de rasgos característicos de la inteligencia humana (capacidad de aprendizaje inductivo, razonamiento bajo condiciones de incertidumbre, integración de conocimiento heurístico de varias fuentes, etc.), constituyen métodos orientados a la resolución de problemas que no es posible abordar de forma sencilla desde la perspectiva algorítmica más tradicional, pues suponen la representación y gestión eficiente de grandes cantidades de conocimiento preservando su integridad y consistencia. En esta disciplina se integrarían por tanto las denominadas herramientas de inteligencia computacional o *soft-computing*, entre la que se incluyen las redes de neuronas artificiales, la computación probabilística, la lógica difusa, los algoritmos genéticos o el aprendizaje automático.

Siendo todos estos enfoques significativamente diferentes, existe en la actualidad una fuerte tendencia dirigida hacia la búsqueda de combinaciones entre ellos, de manera que sea posible aplicar la técnica que resulte más apropiada a cada aspecto distinto de los problemas reales, en vez de sustentar íntegramente su resolución en una única tecnología [Eberhart 1996] [Furuhashi 2001]. Así, los modelos híbridos en boga se basan principalmente en la integración de diferentes métodos en un único sistema computacional robusto que suponga un esquema múltiple de representación y manipulación de los distintos tipos de conocimiento (simbólico, numérico, discreto, incierto, preciso, inexacto, general, específico, etc.), combinando al mismo tiempo diferentes estrategias de razonamiento (deducción, inferencia, formulación de hipótesis, inducción, analogía, etc.) con el objetivo expreso de alcanzar un resultado óptimo en la búsqueda de soluciones a problemas específicos relativos a dominios complejos [Kandel 1992] [Nikolopoulos 1997].

En muchos de los entornos reales actuales, complejos y sofisticados, para desarrollar soluciones adecuadas y eficientes es a menudo preciso llevar a cabo un proceso de evaluación completo de cada técnica disponible y aplicable, como el que se efectuó en el contexto de la clasificación estelar automática durante las fases de diseño e implementación de los diferentes métodos computacionales considerados. Las conclusiones de este estudio exhaustivo, expuesto a lo largo de los capítulos precedentes, señalan claramente la conveniencia de diseñar una arquitectura formada por diferentes módulos que incorporen componentes completos tanto simbólicos como conexionistas [Hilario 1997], de forma que mediante la formulación de un sistema híbrido de tales características se superen algunas de las limitaciones e inconvenientes encontrados durante la experimentación previa con los métodos individuales.

Los sistemas híbridos neuro-simbólicos (HNSS) son modelos computacionales dotados de mecanismos que posibilitan la integración y cooperación entre las diferentes técnicas que los componen, pertenecientes a los dos enfoques clásicos simbólico y conexionista. Estos sistemas se basan habitualmente en arquitecturas neuronales que proporcionan cierta interpretación simbólica o que permiten incluso la interacción con componentes simbólicos [Hilario 1997] [Cloete 2000] [Wermter 2000]. Así, la atención en este tipo de sistemas se desplaza hacia el desarrollo de métodos adecuados para codificar previamente el conocimiento y/o para extraer, refinar y revisar el mismo en un sistema de neuro-computación.

La Inteligencia Artificial simbólica convencional se basa esencialmente en el desarrollo de sistemas basados en el conocimiento que son capaces de representar y manipular información estructurada simbólicamente, codificándola en un lenguaje cercano al lenguaje natural humano. Una de las principales razones para el auge de tales sistemas simbólicos fue el fallo de otras técnicas tradicionales en la resolución de problemas en los que se requiere compilar y automatizar al mismo tiempo el conocimiento necesario para resolverlos, siendo precisamente esta habilidad de representación comprehensible una de las principales ventajas que aporta esta metodología.

Por otra parte, el interés reciente en las arquitecturas conexionistas ha venido a señalar las carencias de los sistemas expertos en cuanto al tratamiento de diferentes aspectos de la adquisición del conocimiento a través de aprendizaje inductivo. Las redes de neuronas artificiales se basan en un modelo del cerebro humano en el que la manipulación explícita de símbolos está claramente ausente, pues la representación interna del conocimiento (pesos sinápticos) no da lugar a una interpretación sencilla, de ahí que sean conocidas como *cajas negras*. No obstante, constituyen estas una técnica sencilla y muy extendida de aprendizaje automático, ya que permiten la adquisición de conocimiento a partir de los datos disponibles siendo capaces posteriormente de generalizar el mismo.

De este modo, como los sistemas simbólicos tradicionales han demostrado ser aptos para manipular el conocimiento experto representado mediante reglas simbólicas, y los sistemas conexionistas se han erigido en potentes herramientas de aprendizaje y generalización del conocimiento adquirido de casos prácticos (incluyendo datos inexactos o imprecisos), la combinación de ambas perspectivas debería explorar sus complementariedades dando lugar a un sistema más eficiente que posibilite el aumento del rendimiento de las soluciones computacionales proporcionadas por sus componentes individuales.

Durante la década de los 90 se propusieron diferentes enfoques para integrar el procesamiento neuronal y simbólico, los cuales dieron lugar a tres arquitecturas principales: unificadas, transaccionales e híbridas.

En los modelos unificados con procesamiento conexionista simbólico (CSP), las capacidades de alto nivel se modelan dentro de las propias redes neuronales, ya que este tipo de estrategias consideran que no hay necesidad de incluir explícitamente estructuras y procesos simbólicos como tales. En el extremo opuesto se encuentran los sistemas simbólicos extendidos, que incorporan en su motor de inferencia características propias de modelos conexionistas como el aprendizaje adaptativo o las decisiones ponderadas. Los sistemas BoltzCONS [Touretzky 1990] o CONSYDERR [Sun 1991] corresponden a implementaciones basadas en esta clase de arquitecturas.

Los enfoques transaccionales, también denominados modelos de transformación [Medsker 1994], pueden considerarse como una clase intermedia entre las arquitecturas unificadas y las híbridas. Como los anteriores, estos modelos confían también principalmente en las redes neuronales para dirigir el procesamiento, pero pueden partir de estructuras simbólicas o generarlas como resultado. El objetivo primordial de este tipo de sistemas es la transformación, anterior al procesamiento, del conocimiento simbólico disponible en un conjunto de conexiones con sus respectivos pesos que darán lugar a redes neuronales específicas (modelos de traducción simbólico-conexionista [Towell 1993] [Mahoney 1993]), o bien la obtención de estructuras simbólicas a partir de la información aportada por los pesos de las conexiones neuronales después del proceso de entrenamiento de las redes (traducción conexionista-simbólico [Bologna 2000] [Setiono 2000]). En ambos casos las reglas simbólicas traducidas o generadas pueden ser del tipo IF-THEN convencional o difusas, admitiendo asimismo tanto factores de certeza como estimaciones de probabilidad.

Finalmente, el enfoque híbrido lo constituyen las arquitecturas formadas por más de un módulo funcional que incorporan componentes simbólicos y conexionistas completos y cooperativos, también conocidas como arquitecturas modulares híbridas o híbridos funcionales, de las que son ejemplo los sistemas EXPSYS [Sima 1993] o Rapture [Mahoney 1993]. Estos sistemas híbridos se pueden clasificar de acuerdo al modo de interacción entre los diferentes elementos que los componen (procesamiento en cadena, sub-procesamiento, meta-procesamiento y co-procesamiento), o en base al grado de integración entre ellos (débilmente acoplados, fuertemente acoplados y completamente integrados) [Cloete 2000] [Wermter 2000]. En el modo de procesamiento en cadena uno de los módulos (simbólico o neuronal) actúa como principal mecanismo de resolución del problema, mientras que el otro le asiste realizando el procesamiento previo o posterior; el sub-procesamiento se caracteriza por la subordinación de uno de los componentes al otro, dentro del cual se halla embebido; en el meta-procesamiento es exclusivamente uno de los módulos el que resuelve el problema mientras que el otro actúa como supervisor o controlador del proceso, realizando operaciones tales como el control del rendimiento o la detección de errores; por último, en el modo de co-procesamiento los diferentes módulos son funcionalmente equi-

valentes e independientes, de forma que ninguno dirige completamente el proceso pudiendo todos ellos interactuar entre sí y con el entorno. En la figura 117 se incluye el esquema conceptual básico de un sistema híbrido neuro-simbólico en el que se ha reflejado la transformación bidireccional y el modo de interacción basado en el co-procesamiento.

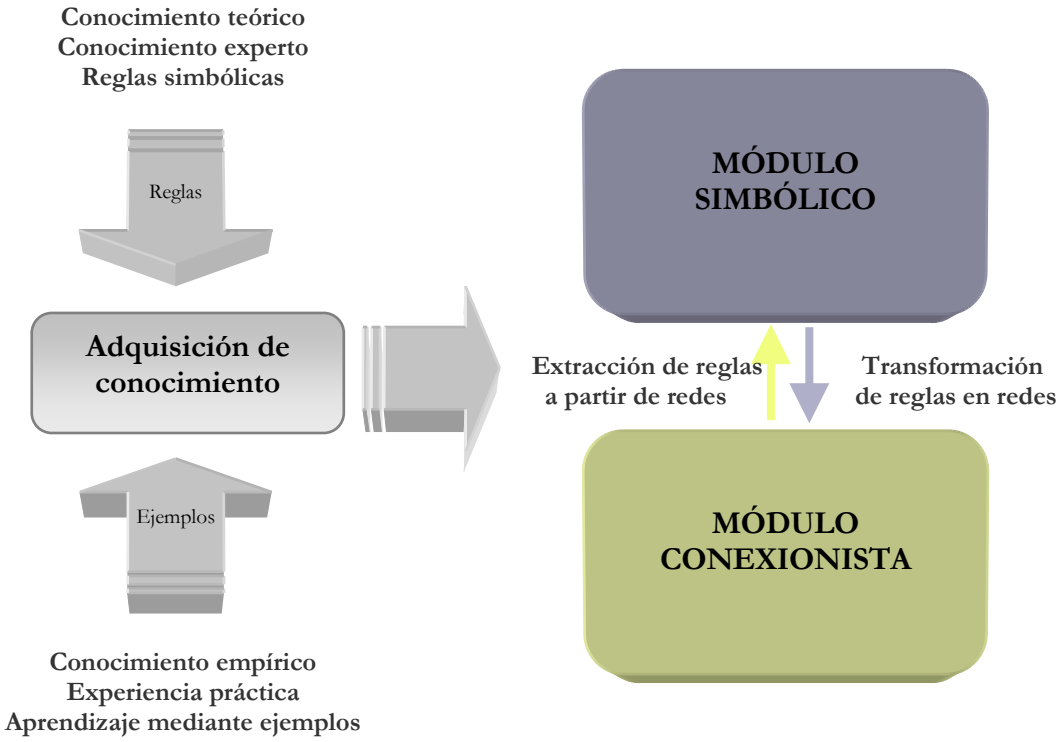


Figura 117. Esquema básico de un sistema híbrido neuro simbólico

La primera estrategia híbrida propuesta para la automatización de la clasificación estelar se orientó principalmente a la cooperación funcional, en modo de co-procesamiento, de las técnicas computacionales evaluadas para tal fin que obtuvieron unos resultados óptimos (sistema experto perfeccionado, estructuras reticulares de configuraciones neuronales *backpropagation* y RBF, algoritmos de *clustering* no jerárquico como el *K-means*, o difusos como el FKNN, redes funcionales separables, etc.), integrándose en un único sistema de información con arquitectura modular híbrida en el que se consideraron al mismo tiempo mecanismos de traducción de tipo conexionista-simbólica basados en el establecimiento de los factores de certeza de las reglas de conocimiento a partir del estudio semántico de las conexiones de las redes neuronales entrenadas (véase sección 4.8 para más detalles). Con el sistema final así diseñado es posible tanto efectuar análisis individuales con cada método particular, como llevar a cabo un proceso híbrido de clasificación basado en la combinación de las implementaciones más adecuadas de cada uno de ellos. Si bien el rendimiento alcan-

zado con este primer enfoque híbrido supera al obtenido con cualquiera de las técnicas individuales (ofreciendo un porcentaje de acierto superior al 80% para la clasificación en subtipo espectral y clase de luminosidad), el comportamiento peculiar del mismo, especialmente en las primeras fases de clasificación estelar, unido al hecho de que persistan aún ciertos problemas como el tratamiento de espectros atípicos de bajo nivel de metalicidad o con líneas inusuales de emisión, impulsa a efectuar en este punto un proceso de revisión y perfeccionamiento con el objetivo de dar solución a algunas de estas cuestiones planteadas.

En este segundo enfoque híbrido se propone una estrategia de integración neuro-simbólica más específica que, partiendo de la experiencia adquirida en los desarrollos previos, pretende dar lugar a un sistema de información más eficiente y adaptativo que sea realmente capaz de aplicar a cada nivel de clasificación espectral (global, tipo, subtipo espectral y clase de luminosidad) el método computacional que ha demostrado ser más idóneo para llevar a cabo las estimaciones específicas de dicho nivel. Desde esta perspectiva, el sistema híbrido formalizado integra un módulo simbólico basado en un sistema experto perfeccionado en cuya base de conocimiento se han incorporado los criterios de clasificación revisados durante los procesos previos de análisis descritos en el epígrafe anterior, y un módulo conexionista formado por un conjunto específico de redes neuronales entrenadas ahora con patrones extraídos de las estrellas estándares del sistema MK, que son las que componen el catálogo de referencia recopilado expresamente para este desarrollo a fin de adecuar el proceso automático de clasificación al tradicional. Ambos módulos van a cooperar activa y eficientemente entre sí en modo de procesamiento en cadena, de forma que cada uno de ellos se convierta en el clasificador principal de aquellos niveles concretos en los que ha demostrado ser capaz de discriminar más satisfactoriamente.

El sistema híbrido neuro-simbólico final estará así estructurado en un primer nivel de procesamiento en forma de sistema experto de segunda generación, que será el que dirija principalmente el proceso de clasificación interactuando con el entorno y efectuando una discriminación inicial mediante la estimación de la clasificación global (estrellas tempranas, intermedias y tardías) y del tipo espectral, en función de la cual remitirá los espectros hacia el segundo nivel de procesamiento; este se halla constituido por catorce redes neuronales específicas, dos para cada uno de los tipos espectrales considerados (O, B, A, F, G, K, M), de tal forma que una de ellas se encargue de determinar el subtipo concreto al que pertenece cada espectro (0-9) y la otra realice una estimación apropiada de su clase de luminosidad (I-V), dependiendo del tipo espectral del que se trate.

Esta estructura en árbol se trasladó a la implementación facilitando mecanismos que permiten la comunicación apropiada entre ambos módulos o niveles de clasificación, de modo que el sistema experto inicial sea capaz no solamente de decidir a qué red del siguiente nivel se deben enviar los espectros, sino que también pueda encaminarlos hacia ella

acompañados de su propia clasificación y probabilidad parcial. En algunos supuestos concretos será preciso dirigirlos hacia dos redes diferentes, especialmente cuando se trate de espectros que se encuentren en la frontera entre dos tipos espectrales consecutivos (p. ej. A9F0 ó K9M0) o que presenten peculiaridades manifiestas (p. ej. espectros A y F con niveles de metalicidad inusuales); asimismo será también en estos casos complejos o ambiguos, para los que el sistema híbrido como tal no sea capaz de resolver satisfactoriamente, donde se complementarán o refinarán las conclusiones obtenidas mediante una clasificación adicional basada en las restantes técnicas computacionales consideradas.

En la figura 118 se muestra el esquema conceptual de este segundo modelo híbrido propuesto como solución alternativa para abordar de forma completa la clasificación estelar en el sistema MK. En las secciones siguientes se describe detalladamente cada uno de los módulos que integran dicho sistema híbrido neuro-simbólico final, el cual mediante la determinación del método de clasificación más recomendable y apropiado para cada tipo de espectro y la adopción de las estrategias de perfeccionamiento mencionadas (revisión de criterios de clasificación, elaboración de un catálogo de estrellas estándares, adquisición de conocimiento de diversas fuentes, consideración de diferentes formalismos de representación del conocimiento, etc.), debería alcanzar más versatilidad y eficiencia que un sistema de clasificación basado en una única técnica, debiendo ser capaz asimismo de adaptarse más apropiadamente al proceso de clasificación estelar clásico y de dar respuesta a algunos de los problemas que no pudieron ser resueltos mediante la primera estrategia híbrida formulada.

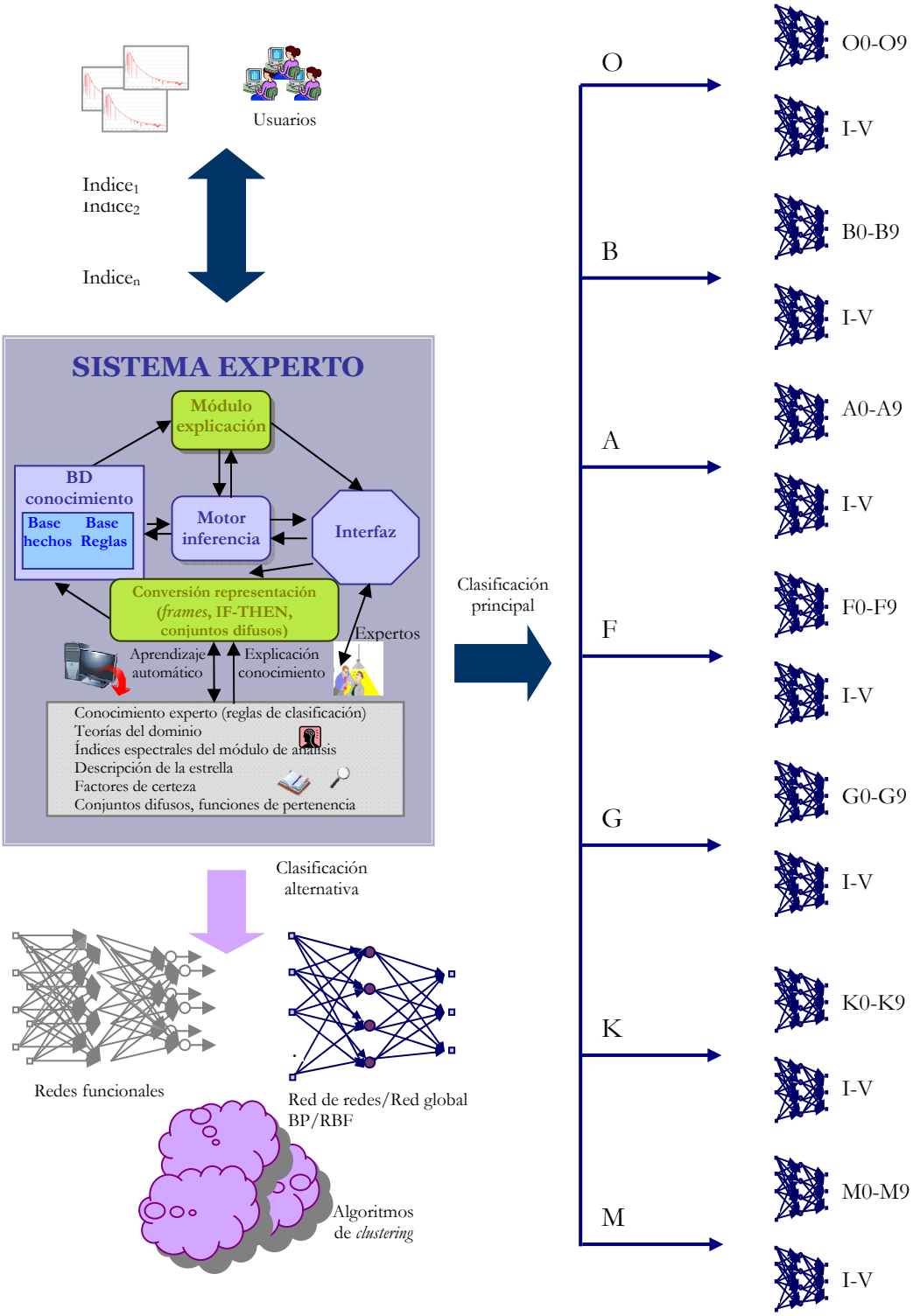


Figura 118. Esquema conceptual del modelo híbrido neuro-simbólico para la clasificación espectral

5.3.1 Sistema experto

En el sistema neuro-simbólico que constituye la solución híbrida propuesta en este segundo enfoque, la principal estrategia de diseño consiste en aplicar como herramienta de clasificación principal el método computacional que, en base a la experiencia adquirida a lo largo de todos los desarrollos previos, ha demostrado ser el que presenta un comportamiento más satisfactorio en la discriminación de cada nivel específico de clasificación estelar (tipo/subtipo espectral y luminosidad).

La estimación de la temperatura estelar en el sistema MK se lleva a cabo habitualmente mediante la determinación del tipo espectral (O, B, A, F, G, K, M), en base a la comparación directa con los espectros de un conjunto de plantillas estándares que se propusieron originalmente para caracterizar cada grupo [Morgan 1943]; por ello, es en estos primeros estadios del proceso de clasificación donde el conocimiento, pericia y experiencia acumulada del astrónomo en tales tareas resultan imprescindibles. Así, como se ha tenido ocasión de comprobar en implementaciones anteriores [Rodriguez 2004] [Manteiga 2009], la naturaleza misma de este problema específico lo hace apto para su tratamiento computacional a través de un sistema basado en el conocimiento similar al incluido en el enfoque híbrido anterior, cuyo proceso de diseño e implementación se recoge en el capítulo precedente (v. sec. 4.4).

Por lo tanto, habiéndose verificado ya la idoneidad de esta técnica para la determinación de los tipos espectrales, el primer nivel de procesamiento del sistema híbrido contemplado en este enfoque estará a cargo de un sistema basado en reglas de producción de tipo IF-THEN que reúna en su base de conocimiento los criterios de clasificación resultantes del análisis llevado a cabo sobre las estrellas estándares MK, junto al grado de confianza depositada en los mismos. Partiendo de un conjunto de parámetros morfológicos, extraídos del espectro óptico estelar con los algoritmos expuestos anteriormente (v. sec. 3.2), este sistema experto inicial tratará de simular el razonamiento humano por medio de árboles de decisión jerárquicos e inferencia difusa con el objetivo de alcanzar una conclusión acerca del tipo espectral de las estrellas, en función de la cual encaminará los espectros hacia la red neuronal más adecuada del segundo nivel, donde se completará la clasificación concretando el subtipo espectral y la clase de luminosidad. Será, asimismo, este módulo simbólico el que dirija casi por completo el procesamiento, tanto adoptando las decisiones oportunas respecto al envío de espectros a múltiples redes o relativas al lanzamiento de procesos de clasificación adicionales, como supervisando la interacción con el entorno de modo que las clasificaciones MK obtenidas se proporcionen al usuario en un formato apropiado, con su correspondiente probabilidad asociada e incluso acompañadas de una explicación del proceso de razonamiento seguido para derivarlas.

El proceso de diseño e implementación del sistema experto que constituye este primer nivel del modelo híbrido se ha llevado a cabo siguiendo, básicamente, las mismas directrices que en el caso del sistema basado en el conocimiento incluido como técnica individual en la primera estrategia propuesta. Por ello en esta sección, si bien se expondrá brevemente su estructura y características más relevantes, solamente se tratarán con profundidad aquellos aspectos en los que ambos difieren, que no son otros que las reglas específicas de producción, que en este caso emanan del estudio previo más amplio y detallado de los criterios de clasificación, y el mecanismo de gestión de la incertidumbre, que se basará ahora en la definición de conjuntos y variables difusas, funciones de pertenencia y factores de certeza a partir del análisis de un conjunto significativo de estrellas MK estándares. Las técnicas concretas de adquisición y representación del conocimiento, los procedimientos específicos implementados y los detalles relativos tanto a la estrategia de razonamiento seleccionada como al motor de inferencia considerado, pueden consultarse en la sección 4.4 del capítulo anterior, donde se incluye una descripción completa de los mismos para el sistema experto del primer enfoque híbrido formulado.

El sistema de clasificación en tipo espectral incluido como módulo simbólico del sistema híbrido formalizado, al igual que cualquier sistema experto convencional, consta principalmente de una base de conocimiento (constituida por una base de hechos y una base de reglas), en la que se articula el conocimiento característico del dominio en cuestión (en este caso serán hechos, reglas, factores de certeza, conjuntos difusos, etc., relativos al área de la clasificación estelar en tipo espectral), y un motor de inferencia que constituye la lógica necesaria para razonar sobre el conocimiento almacenado (véanse figuras 45 y 118 para más detalles) [Jackson 1998] [Giarratano 2004].

El conocimiento adquirido de diversas fuentes (análisis de los criterios del proceso de clasificación tradicional, estudio de la bibliografía disponible, experiencia en desarrollos similares, etc.) debe representarse en la base de conocimiento del sistema mediante un modelo formal que satisfaga la sintaxis y semántica adecuadas al motor de inferencia seleccionado (en este caso el que proporciona OPS/R2), de modo que este pueda interpretarlo fácilmente.

En la base de hechos del sistema experto se almacena y organiza todo el conocimiento de tipo descriptivo relativo a los espectros (información general como el nombre o identificador de la estrella, catálogo estelar al que pertenecen, valores de los índices resultantes del análisis morfológico y estadístico, etc.), el cual se representa formalmente a través de objetos con sus respectivas propiedades estructurados por niveles mediante *frames* [Brachman 2004]. Se optó por esta técnica orientada a objetos porque constituye el modo más simple y adecuado de transferir al sistema los datos de los diferentes análisis, estableciendo una equivalencia tácita entre estos y el conocimiento.

La base de reglas será la parte de la base de conocimiento donde tengan cabida los criterios que rigen el proceso de clasificación tradicional, por lo que es en este módulo del sistema experto donde se han incluido tanto los índices de clasificación como sus valores limitantes característicos para cada tipo espectral, los cuales se obtuvieron como resultado del proceso de análisis de sensibilidad sobre las estrellas del catálogo de estándares MK descrito en el epígrafe anterior. Así, el conocimiento procedimental disponible se representa en el sistema de forma objetiva mediante relaciones jerárquicas entre reglas difusas de tipo IF-THEN, cuyas condiciones (LHS) hacen referencia al conjunto de índices morfológicos medidos en los espectros, mientras que sus conclusiones (RHS) aluden a los distintos tipos de clasificación que se determinan en este nivel (global y tipo espectral). Este formalismo permite reproducir de forma sencilla la clase de razonamiento que siguen los expertos en este campo, basado principalmente en el encadenamiento sucesivo (*forward reasoning*) de diversos criterios de clasificación.

La incertidumbre es un condicionante importante que debe tenerse en cuenta a la hora de formalizar una estrategia para resolver problemas como el planteado, ya que aun para los expertos en clasificación no siempre es posible alcanzar una conclusión con absoluta certeza, viéndose estos obligados con frecuencia a hacer suposiciones sobre información que no está completamente disponible y, por consiguiente, a tomar decisiones en situaciones de ambigüedad o imprecisión que estarán sesgadas por la incertidumbre ocasionada por los errores o el ruido instrumental en las medidas científicas, la imprecisión en los juicios, la subjetividad en las observaciones o incluso la no completitud de la teoría del dominio. Para el tratamiento de esta imprecisión e incertidumbre inherentes al proceso de determinación de los tipos espectrales en el sistema MK, y en base a la experiencia de desarrollos previos, además de asociar factores de certeza del tipo de los que propusieron originalmente los autores de la metodología clásica de reglas de producción [Shortliffe 1984] tanto a los índices espectrales (o evidencias) como a las propios criterios de clasificación, se han incorporado a la base de conocimiento variables difusas, conjuntos difusos y funciones de pertenencia contextualizadas para cada tipo espectral.

El proceso de determinación de los factores de certeza y de definición de los conjuntos difusos y funciones de pertenencia difiere, en este caso, significativamente del empleado para tal fin en el sistema experto del enfoque híbrido I. Como se ha indicado, en aquel los factores de certeza asociados a los criterios de clasificación seleccionados fueron propuestos inicialmente por nuestro grupo de expertos en Astrofísica y ajustados posteriormente mediante diferentes algoritmos de aprendizaje, entre ellos la traducción conexionista-simbólica basada en el estudio de los pesos de las redes neuronales implementadas; en cambio, los diferentes conjuntos difusos y sus correspondientes funciones de pertenencia se determinaron principalmente en función del análisis de los espectros de las estrellas de

los catálogos de referencia (v. sec. 4.4.2). En el sistema basado en el conocimiento de esta segunda estrategia híbrida, ambos aspectos de la gestión de incertidumbre se sustentarán principalmente en la validación de los criterios de clasificación llevada a cabo sobre los espectros de las estrellas estándares que forman el catálogo de plantillas de referencia recopilado para este desarrollo.

En el análisis de sensibilidad efectuado durante la fase de adquisición de conocimiento, previa al diseño en sí, se obtuvieron los índices espectrales seleccionados para los 361 espectros del catálogo de referencia y, tras estudiar su comportamiento para estas estrellas estándares, se pudo establecer para cada parámetro los diferentes tipos/subtipos espectrales y clases de luminosidad sobre los que efectivamente tiene una influencia real; de este modo, del conjunto original de 109 caracteristicas morfológicas se encontró que 64 eran susceptibles de formar parte las reglas de conocimiento del sistema de inferencia y del conjunto de patrones de entrenamiento de las redes neuronales. Adicionalmente, a través de técnicas como el análisis de componentes principales o el análisis *cluster*, se redujo tal conjunto a 30 índices espectrales de clasificación, con los que se puede llegar ya a un diagnóstico preciso de los tipos MK de un espectro particular (véase sección 5.2 para más detalles).

El conjunto de índices resultantes de los análisis descritos (señalados con * en la tabla 64) son los que se han empleado para definir las variables difusas de entrada del sistema de inferencia; los conjuntos difusos para cada una de estas variables se definieron en base a las etiquetas lingüísticas empleadas por los expertos en los criterios de clasificación ("intenso", "suave", "débil", "significativo", "ausente", etcétera). Las funciones de pertenencia para los conjuntos difusos establecidos, así como las necesarias para estimar las variables de salida (relativas a los dos tipos de clasificación llevada a cabo en este primer nivel) se contextualizaron para cada tipo espectral mediante la determinación, sobre los espectros de referencia, de los valores limítrofes entre diferentes grupos de estrellas (tempranas, intermedias, tardías, OB, AF, GKM, etc.), permitiendo la superposición entre ellos. Al haber empleado ahora espectros correspondientes a las plantillas de estrellas estándares originales del sistema de clasificación MK, parece apropiado realizar también mediante esta técnica una estimación sobre la validez real de los criterios de clasificación, con la cual se pretende expresar cómo de preciso o fidedigno se juzga cada predicado. Con este objetivo, se obtuvo para cada grupo o tipo espectral el porcentaje de espectros pertenecientes al mismo en los que se cumple la condición de que su valor se encuentre dentro del intervalo esperado para cada índice, lo cual posibilitó la asignación de un cierto grado de confianza, en forma de factor de certeza, a cada uno de los criterios de clasificación evaluados. Las funciones de pertenencia y factores de certeza así definidos fueron validados posteriormente por los expertos, a fin de establecer una correcta correspondencia

entre los valores numéricos estimados mediante los procedimientos descritos y las reglas de clasificación y etiquetas lingüísticas que se suelen manejar en el proceso de clasificación tradicional.

Reglas de clasificación	Porcentaje de acuerdo	Índices espectrales implicados
N1.1	≥95%	1-4
N1.2	≥91%	6
N1.3	≥90%	12
N2.1.1	≥98%	21
N2.1.2	≥90%	16, 22, 24
N2.1.3	≥95%	27
N2.2.1	≥97%	11, 33, 34
N2.2.2	≥96%	35
N3.1	≥93%	41, 42, 43
N3.2.1	≥68%	31, 37, 44, 46
N3.2.2	100%	30, 39, 47, 48, 49
N3.4.1	≥90%	41, 49, 52, 53, 54

Tabla 65. Reglas de decisión jerárquicas y porcentajes de conformidad para la clasificación MK en tipos espectrales

Como resultado adicional de todos los análisis llevados a cabo sobre los espectros del catálogo de estándares, se consiguió establecer una cierta jerarquía entre los criterios de clasificación en función de su resolución teórica, de modo que finalmente se consideraron aptos para formar parte de las reglas difusas del sistema experto únicamente aquellos que alcanzaron un rendimiento óptimo sobre los espectros de referencia (generalmente a los que se les había asignado un grado de confianza superior al 80%). No obstante, como en la construcción de los patrones de entrenamiento de las redes neuronales del segundo nivel se han tenido en cuenta diferentes subconjuntos de índices espectrales, independientemente del factor de certeza asociado a las reglas que los incluyen, los demás criterios e índices de clasificación no se descartaron, sino que se incorporaron también a la base de conocimiento pero con factores de certeza más modestos, y solamente se tendrán en cuenta en este primer nivel en casos muy particulares donde los primeros no sean capaces de resolver. La jerarquía de las reglas de clasificación de la base de conocimiento del sistema experto se muestra en forma de árbol de decisión en la figura 119; los porcentajes de conformidad para la discriminación en tipo espectral se presentan en la tabla 65, donde también se incluye la referencia al identificador de la tabla 64 para los 30 índices espectrales principales involucrados en los distintos niveles de la jerarquía de reglas.

El conocimiento inicial almacenado en la memoria de trabajo del sistema experto será el que se use para dar comienzo al proceso de razonamiento. En general, el motor de

inferencia para llegar a una conclusión explora repetidamente la memoria de trabajo en busca de datos específicos que satisfagan la parte izquierda (LHS) de alguna de las reglas almacenadas en su base de reglas. Así, las reglas se van enlazando sucesivamente (*forward chaining*) según se vayan satisfaciendo los distintos objetivos parciales de clasificación hasta alcanzar un resultado final concluyente (este tipo de razonamiento típico es el que se incluye en trazo negro en la figura). Sin embargo, puede ocurrir también que llegue un momento en el proceso de razonamiento en el que se obtenga un resultado ambiguo (señalado como IND en la figura), es decir, que el sistema experto no sea capaz de decidir entre dos grupos/tipos espectrales consecutivos en base a las reglas activas disponibles; en estos casos será preciso ejecutar todas las reglas del siguiente nivel de clasificación para los tipos en conflicto (esta segunda vía es la que se ha resaltado en azul en la figura 120). Los expertos en clasificación optan por una clasificación combinada (F9G0 V, K7 I-II, etc.) cuando se les presentan situaciones como la descrita en las que no es posible decidir entre tipos adyacentes. Por esta razón, cuando el sistema experto obtiene una primera aproximación con un valor de verdad significativamente bajo (concretamente menor del 54%), proporciona también una clasificación alternativa del mismo tipo que la indicada (A-F, K-M, etcétera).

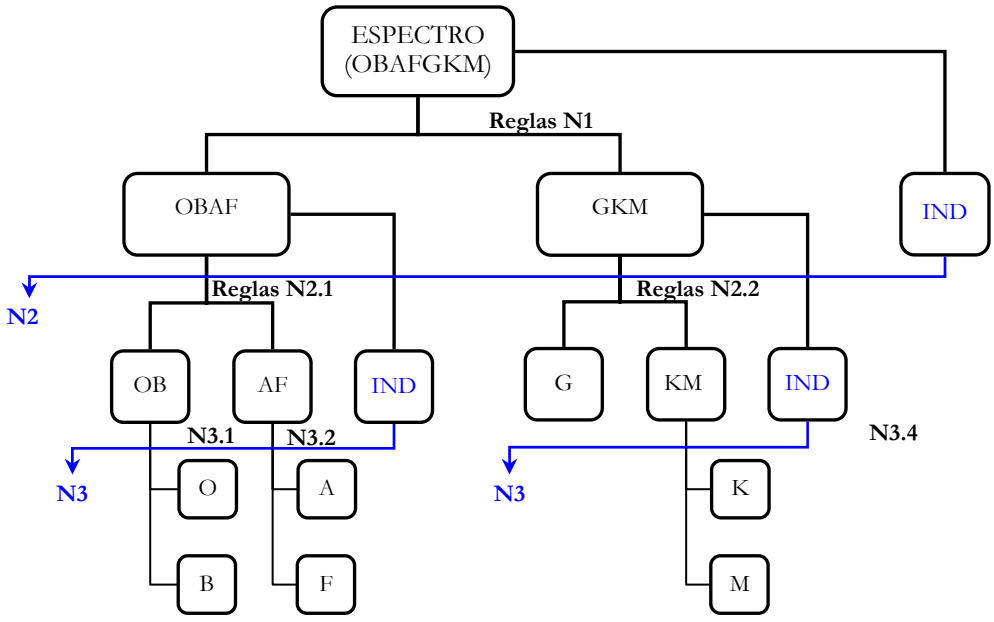


Figura 119. Esquema en forma de árbol del proceso de razonamiento del sistema experto inicial de la arquitectura híbrida del segundo enfoque automático propuesto para la clasificación estelar

La figura 120 ilustra el proceso de razonamiento del sistema experto, incluyendo el mecanismo de computación del grado de confianza para dos estrellas del catálogo de evaluación (NOAO-INDO-US [Valdes 2004]). En el primer ejemplo a la estrella HD 3817 se

le asigna el tipo espectral G con un grado de confianza alto (95.13%), puesto que cada medida de los índices contemplados en la base de hechos encaja perfectamente con las reglas para estrellas G almacenadas asimismo en la base de reglas. En cambio, para la estrella del segundo ejemplo (HD 10307, de tipo G1) se ha obtenido un grado de confianza final más moderado (47.87%); las bandas moleculares en esta estrella son bastante débiles, por lo que en el nivel N1 el sistema no es capaz de decidir categóricamente si se trata de una estrella temprana (OBAF) o más tardía (GKM), viéndose obligado a seguir ambas ramas del árbol de decisión hacia el segundo nivel (situación reflejada en la gráfica en azul por medio de la etiqueta IND). En el nivel N2.2 (G y KM), se satisfacen todas las reglas para el tipo G, con lo cual el sistema deduce dicho tipo otorgándole un grado de confianza parcial de 47.87%; en el nivel N2.1 solamente se satisfacen las reglas de la subrama AF, por lo que en el nivel siguiente será únicamente necesario discriminar entre los tipos A y F explorando las reglas N3.2; de estas últimas, sólo se logran instanciar algunas para las estrellas de tipo F, alcanzándose una clasificación con un bajo grado de confianza (22.5%). Al haberse logrado en la clasificación en tipo G un grado de confianza significativamente mayor (47.87%), el sistema concluye finalmente dicho tipo espectral para la estrella HD 10307 como clasificación principal.

La estimación de la confianza de cada conclusión es siempre relativa ya que, como muestran los ejemplos anteriores, a medida que se desciende en el árbol de decisión los grados de confianza parciales decrecen en valor a causa de la sucesiva multiplicación de los factores de certeza asociados a las reglas que se han ido aplicando en los distintos niveles. El esquema de razonamiento descrito, debido en parte al tipo de reglas de inferencia difusa consideradas en las que las variables de salida (tipos espectrales) dependen del valor de las variables de entrada (índices espectrales), se implementó tomando como punto de partida el modelo de Takagi-Sugeno [Takagi 1985], adaptando apropiadamente el método de inferencia MAX-MIN para incluir las singularidades del proceso de análisis y clasificación espectral. Con cualquiera de las dos líneas de razonamiento posibles se debería llegar al final a una clasificación que incluya el tipo global de la estrella (temprana o tardía) y su tipo espectral en el sistema MK (OBAFGKM), así como el grado de confianza que se deposita en tal conclusión (véase sección 4.4.3 para detalles concretos de la adaptación del método y de la estimación de la confianza final de las conclusiones).

En cuanto al motor de inferencia se utilizó el básico que ofrece el entorno en el que se llevó a cabo la implementación del sistema experto diseñado, i. e. OPS/R2, para el que se seleccionaron las opciones más adecuadas, como por ejemplo la estrategia MEA para la resolución de conflictos [Newel 1963], la cual guía la identificación y satisfacción de una sucesión de objetivos parciales mientras se persigue un objetivo global, decidiendo qué regla ejecutar cuando las partes condicionales de varias de ellas se satisfacen al mismo tiem-

po. Se han incorporado asimismo las modificaciones necesarias para adaptar dicho motor de inferencia a las características propias de la clasificación espectral, principalmente a través de la implementación de un módulo específico en el que se incluyeron los algoritmos para estimar la confianza parcial y final de las conclusiones, el mecanismo para posibilitar que el sistema pueda adoptar oportunamente las dos vías de razonamiento mencionadas, funcionalidades de autoexplicación del razonamiento a fin de que el usuario final pueda seguir de forma sencilla el proceso de inferencia llevado a cabo por el sistema para obtener sus conclusiones, y los procedimientos específicos relacionados con su función como conductor de la clasificación espectral, es decir, la lógica necesaria para que este sea capaz de enviar los espectros a las redes neuronales adecuadas y para que pueda asimismo invocar otros métodos alternativos de clasificación en los casos en los que estas le devuelvan una estimación no completamente satisfactoria. En el anexo IV se recogen los detalles de implementación más relevantes de los módulos desarrollados, así como el pseudocódigo de las principales reglas de clasificación incluidas en la base de conocimiento.

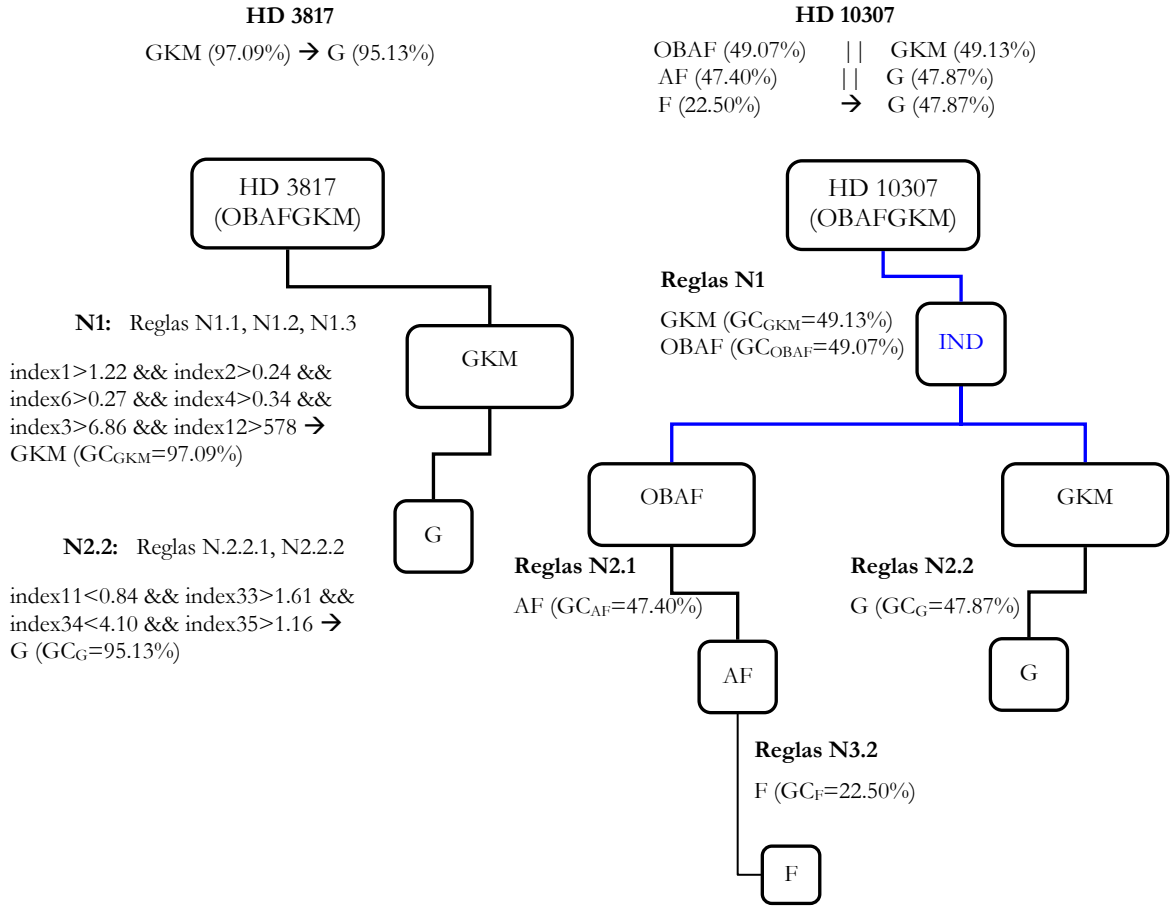


Figura 120a-b. Ejemplos de razonamiento del sistema experto para las estrellas HD 3817 y HD 10307 del catálogo NOAO-INDO-US indicando la clasificación y el grado de confianza de la misma

El sistema experto que constituye el nivel inicial de clasificación del modelo neurosimbólico propuesto en este segundo enfoque híbrido de la clasificación estelar no supervisada, es capaz de simular más apropiadamente los diagnósticos de los expertos tratando la incertidumbre e imprecisión implícitas en esta área particular de la Astrofísica a través de la estrategia de razonamiento descrita (basada en lógica difusa que se nutre además de la consideración de factores de certeza asociados a los criterios de clasificación), llegando incluso en muchas ocasiones a conclusiones sobre tipo espectral más atinadas que las que obtendrían los principiantes sobre los mismos espectros en entornos del mundo real, caracterizados por un alto grado de incertidumbre.

5.3.2 Redes de neuronas artificiales

El segundo nivel de procesamiento del sistema híbrido formulado como solución alternativa para la clasificación espectral completa se basa, como ya se ha indicado, en el diseño de un conjunto de catorce redes neuronales específicas que estimarán, de forma independiente aunque simultánea, el subtipo espectral (0-9) y la clase de luminosidad (I-V) de las estrellas a partir de la clasificación inicial en tipo espectral heredada del sistema experto inicial.

El análisis del comportamiento de esta técnica de Inteligencia Artificial a lo largo de todos los desarrollos anteriores la erige en la mejor opción para discriminar en estos niveles más concretos de clasificación, ya que mediante el entrenamiento de redes neuronales, especialmente con los algoritmos *backpropagation* en su versión perfeccionada (*enhanced backpropagation* o *backpropagation momentum*), se ha obtenido en la mayoría de las ocasiones un rendimiento ligeramente superior al logrado con otras técnicas como los algoritmos de *clustering* o el propio sistema basado en el conocimiento (véase sección 4.8 para un análisis en detalle). Por ello, las arquitecturas neuronales diseñadas en este enfoque se basarán también en esta versión óptima del algoritmo *backpropagation* que incorpora al cómputo de los pesos sinápticos de cada ciclo de entrenamiento un factor indicativo de la variación en ciclos anteriores [Rumelhart 1986].

En la tabla 66 se recogen las topologías implementadas para las redes neuronales encargadas de discriminar el subtipo y la luminosidad dentro de cada tipo espectral. Como puede observarse, en cada una de ellas los patrones de entrada se construyeron seleccionando un subconjunto distinto de los 64 índices espectrales de clasificación considerados inicialmente, en el cual en algunas ocasiones se han incluido algunos parámetros que no se emplearon en la primera fase para determinar el tipo espectral (reglas del sistema experto) pero que el análisis de sensibilidad previo señalaba como aptos para esta clasificación más refinada (p. ej. los ratios MgII/HeI, CaI/H_γ, etc.); en la última fila de la tabla se indica asi-

mismo la composición de la capa de entrada de las 7 redes de luminosidad, una para cada tipo espectral, en las que además de los parámetros reflejados en las redes de subtipo anteriores se han incluido los que se especifican, que no son otros que los índices duales (uno estrecho y otro más ancho) definidos sobre las líneas de hidrógeno de la serie de Balmer (v. tab. 64).

	Índices espectrales	Topología	Rendimiento
Red subtipos O	I16, I21, I22, I24, I27, I41, I42	7x20x10	100%
Red subtipos B	I16, I21-I24, I27, I41-I43	9x20x10	100%
Red subtipos A	I3, I4, I16, I21, I22, I24, I25, I27, I30, I31, I37, I39, I44, I46-I55, I58	24x50x20x10	100%
Red subtipos F	I3, I4, I16, I17, I21, I22, I24, I25, I27, I31, I37, I39, I44, I46, I50, I51, I53-I55, I58	20x50x20x10	88.23%
Red subtipos G	I4, I10, I11, I33, I35, I38	6x15x10	87.50%
Red subtipos K	I4, I10, I11, I33, I35, I38, I41, I43, I49, I53, I54	11x20x10	98.57%
Red subtipos M	I4, I11, I33, I35, I41, I43, I49, I53, I54	9x20x10	100%
Redes luminosidad	Índices subtipo+ I20, I24, I27, I33	50x20x5	75-82%

Tabla 66. Topología e índices espectrales empleados en las redes de clasificación en subtipo espectral y luminosidad del sistema híbrido II

Si bien se pretendía que este segundo enfoque híbrido estuviese completamente fundamentado en unas bases más sólidas en cuanto a los criterios de clasificación y a los espectros de referencia, para posibilitar la convergencia de las redes neuronales de temperatura fue forzosamente necesario completar el catálogo de estrellas estándares MK con 60 espectros adicionales (procedentes de la librería digital NOAO-INDO-US [Valdes 2004]) para algunos subtipos espectrales específicos a fin de aumentar la capacidad de generalización de las arquitecturas neuronales diseñadas, puesto que éstas entrenadas únicamente con los 361 espectros de plantillas MK ofrecieron unos resultados no enteramente satisfactorios. En la tabla 67 se refleja la distribución en subtipos espectrales del conjunto de espectros final empleado durante la fase de aprendizaje de las redes *backpropagation* diseñadas.

Las redes de luminosidad se entrenaron con patrones construidos exclusivamente a partir de los espectros del catálogo de estándares, cuya composición es la que se recoge en la tabla 63, ya que en este caso se dispone de suficientes representantes de cada clase como para posibilitar la convergencia de las mismas. En lugar de considerarse una única red glo-

bal que obtuviese de forma general la luminosidad de la estrella sin tener en cuenta su temperatura, esta se determina una vez que se ha inferido su tipo espectral, puesto que en el análisis de sensibilidad previo al diseño del sistema híbrido se tuvo la ocasión de comprobar que una gran parte de los índices espectrales de clasificación seleccionados son capaces de distinguir más apropiadamente la clase de luminosidad para unos tipos espectrales concretos.

Subtipo	O	B	A	F	G	K	M
0	--	2	15	12	30	35	3
1	--	1	7	3	7	29	5
2	--	7	9	5	9	22	2
3	--	7	2	--	2	15	7
4	--	--	2	--	1	2	1
5	--	4	1	15	15	10	--
6	--	--	2	10	6	--	2
7	1	2	1	2	7	1	--
8	--	7	--	20	36	--	--
9	4	12	1	4	15	--	--
TOTAL	5	42	40	71	128	114	20

Tabla 67. Conjuntos de entrenamiento y validación empleados en las redes de clasificación en subtipo espectral del sistema híbrido II

Antes de su presentación a la capa de entrada de las redes de clasificación, todos los espectros se normalizaron (mediante una función contextualizada para cada índice espectral similar a la presentada en la sección 4.5.1), corrigieron y adaptaron convenientemente a la resolución y dispersión de los del catálogo principal de estándares, verificándose su validez mediante un análisis visual minucioso de los mismos que se apoyó adicionalmente en técnicas estadísticas de agrupamiento.

Las redes neuronales constituyentes del módulo conexionista del sistema híbrido de este segundo enfoque computacional obtendrán como resultado de su procesamiento el subtipo espectral y la clase de luminosidad de las estrellas analizadas con una probabilidad asociada, estimaciones que remitirán al sistema experto del primer nivel para que este, combinándolas con las suyas propias y con las procedentes de otras técnicas si es el caso, concluya una clasificación completa de los espectros y se la traslade al usuario junto a la justificación de la misma.

La implementación y evaluación de las configuraciones neuronales descritas se llevó a cabo mediante el simulador XOANE (*eXtensive Object-oriented Artificial Neural Networks Engine*), cuya interfaz se muestra en la figura 121, una herramienta propia de diseño y en-

trenamiento desarrollada en nuestro grupo de investigación [Ordoñez 2007] mediante la cual es posible obtener una implementación directa en C++ de las arquitecturas neuronales óptimas después de su proceso de aprendizaje.

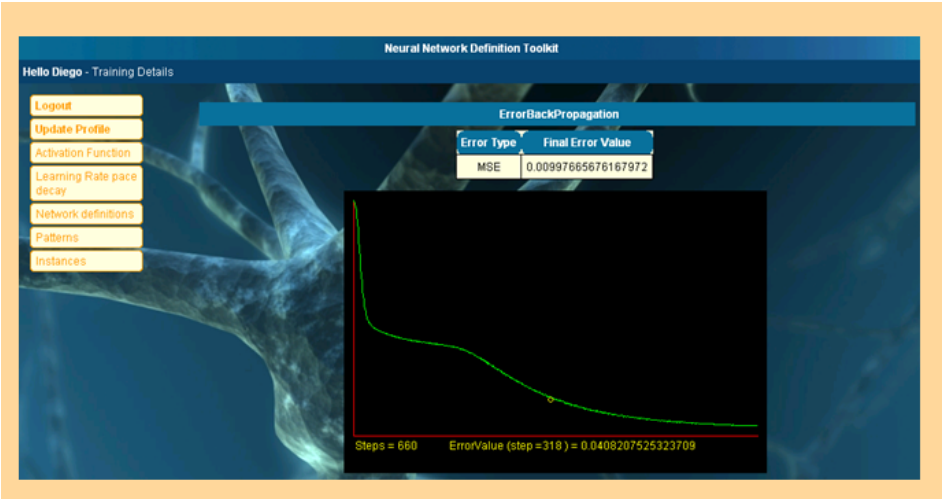


Figura 121. Interfaz de la herramienta de diseño y evaluación de redes neuronales artificiales XOANE [Ordoñez 2007]

5.4 Análisis de resultados. Discusión

El desarrollo de sistemas híbridos tiene como propósito, entre otros, la superación de las limitaciones propias de los diferentes métodos computacionales que los componen, de manera que integrando diversas técnicas cooperativas estos sean capaces de mejorar la calidad de las soluciones individuales alcanzadas con cada una de ellas, tal y como se constató que ocurría en el primer enfoque propuesto (v. sec. 4.9). Así, a través de un procedimiento similar al empleado en las etapas previas de validación de las técnicas constituyentes del mismo, se ha llevado a cabo en este punto un proceso de evaluación exhaustivo del rendimiento del sistema híbrido neuro-simbólico de clasificación espectral propuesto en este capítulo.

El conjunto de evaluación considerado para tal fin procede del catálogo NOAO-INDO-US [Valdes 2004] que consta de espectros ópticos para 1273 fuentes, recopilados de forma que se logre una amplia cobertura tanto de los parámetros atmosféricos (temperatura efectiva, gravedad en la superficie o nivel de metalicidad), como de los tipos espectrales y clases de luminosidad en el sistema MK. De la muestra original se seleccionaron 910 espectros ópticos evitando los espectros atípicos, los que presentan importantes regiones espectrales vacías (*gaps*) y aquellos ya presentes en la base de datos compuesta por 361 estrellas estándares MK; se utilizó para todos ellos el tipo estándar combinado, es decir, espectros con un rango desde 3465 Å a 9469 Å muestreado en intervalos de 0.4 Å, verificándose asimismo la clasificación MK ofrecida en el catálogo de acuerdo a la información disponible en la base de datos SIMBAD. La distribución de las metalicidades de esta base de datos de evaluación final se recoge en la figura 122, donde también se ha incluido la gráfica para el catálogo de plantillas de estrellas estándares utilizado en el diseño y formalización del sistema híbrido propuesto.

El sistema neuro-simbólico fue capaz de asignar un tipo espectral coherente con el previsto en su propio catálogo a un total de 723 de los 910 espectros que forman el conjunto de evaluación, lo que equivaldría a un 79.5% en porcentaje de acierto, con un error medio de 0.23 tipos estelares. Como ya se ha indicado, la matriz de confusión es un método de análisis de resultados muy aplicado en las ciencias computacionales para inspeccionar el funcionamiento de un sistema de clasificación supervisada, ya que resume visualmente de forma fácil y sencilla las discrepancias entre las clasificaciones reales y las estimadas; las columnas especifican el número de predicciones de cada categoría, mientras que las filas representan instancias en las clases reales. Una de las ventajas principales derivada del uso de esta herramienta es el disponer de un mecanismo rápido y sencillo de detección de confusiones sistemáticas entre un par concreto de clases o grupos consecutivos [Kohavi 1998].

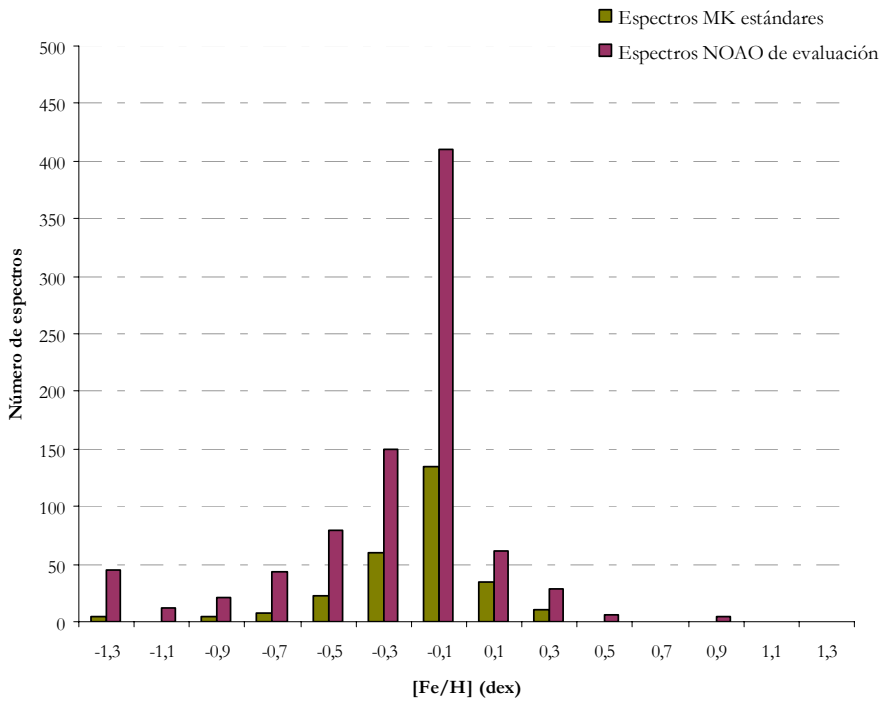


Figura 122. Distribución de metalicidades en la base de datos de referencia MK y en el conjunto de evaluación procedente del catálogo NOAO

En la tabla 68 se incluye la matriz de confusión correspondiente al rendimiento del sistema híbrido de este segundo enfoque para el tipo espectral MK, donde puede observarse que los errores se encuentran localizados principalmente en tipos contiguos, siendo notable tanto la dispersión de las estrellas de tipo A como la confusión entre los tipos G y K. Es presumible que la mayoría de los errores de clasificación del sistema estén relacionados de nuevo con el ya descrito problema de las fronteras entre tipos, que se debe fundamentalmente a la resolución espectral divergente entre el catálogo de evaluación NOAO-INDO-US (1 subtipo) y el sistema experto del primer nivel que lleva a cabo la estimación inicial del tipo espectral (1 tipo). De hecho, un análisis detallado de los resultados reveló que muchos de los errores se corresponden con estrellas que están clasificadas como pertenecientes a los subtipos 0 ó 9 en el catálogo (p. ej. una estrella B9 clasificada por el sistema híbrido erróneamente como A). Con el fin de evaluar la veracidad de esta conjetura, se elaboró una nueva matriz de confusión donde la clasificación se considera correcta en el caso de un conflicto entre tipos espectrales que afecte sólo a un subtipo (holgura típica de ±1 subtipo contemplada en la evaluación de los desarrollos anteriores). Si se consideran entonces las discrepancias de un subtipo como aceptables, el sistema híbrido neuro-simbólico obtiene una tasa de éxito en tipo espectral del 89% (con un error significativo de 0.13 tipos), lo que supone únicamente 103 espectros clasificados de forma incorrecta entre los que se incluyen 21 casos de espectros de tipo F y 16 de tipo G a los que se les ha asignado equivocadamente el tipo A, y 34 estrellas de tipo G clasificadas como K. En la tabla 69 se

incluye la matriz de confusión correspondiente a esta nueva evaluación del rendimiento admitiendo una discrepancia de 1 subtipo, donde se observa que la confusión entre estrellas de los tipos B y A casi desaparece, reduciéndose también entre los tipos G y K en más de un 40%, en cambio permanecen aún en gran medida las clasificaciones erróneas que afectan a los tipos A y F-G. Con el objetivo de buscar una posible explicación a este hecho, se estudió la distribución de metalicidades de las estrellas de tipos intermedios (F y G) implicadas, encontrándose que todas excepto una son ejemplos típicos de estrellas de bajo nivel de metalicidad, es más, el valor medio para las de tipo F es de [Fe/H] = -1.15 y para las de tipo G de [Fe/H] = -2.0; la distribución del nivel de metalicidad para la muestra completa de 354 estrellas F y G presenta una tendencia marcadamente normal con respecto al valor de metalicidad solar, si bien se observa una ligera población inusual de estrellas hacia el extremo de bajas metalicidades.

La degeneración entre la temperatura efectiva de una estrella y su contenido en metales es un problema astrofísico bien conocido: las estrellas con bajo nivel de metalicidad presenta espectros que se asemejan a aquellos de estrellas más tempranas con temperaturas más elevadas (tipo A, en este caso). Durante décadas, esta relación desafortunada ha complicado el estudio de la historia química de la Galaxia e incluso hoy en día tiene su secuela en la Astrofísica extragaláctica, donde la degeneración entre la edad y metalicidad continúa siendo un tema controvertido en el estudio de síntesis espectral de poblaciones [Vazdekis 2008]. Con el propósito de hacer frente a las clasificaciones erróneas de las estrellas F y G de baja metalicidad, problema que se arrastra desde las primeras formulaciones de las soluciones computacionales de este desarrollo, se decidió equipar al sistema híbrido II con algunas reglas de control que refuercen la clasificación de las estrellas de tipo espectral A (las líneas de hidrógeno y de Ca II son fuertes en este tipo de estrellas, mientras que la banda G aparece alrededor de las estrellas F2). Una vez que el sistema clasifica una estrella como tipo A, se estudian los valores de los índices 20 (flujo H_δ) y 51 (flujo de la banda G en 4295 Å), incluyéndose un conjunto de reglas específico mediante el cual se consigue obtener una clasificación más acertada: si el índice H_δ presenta valores bajos (≤0.4), se tratará en realidad de una estrella de los tipos F ó G de baja metalicidad; en cambio si este parámetro supera un cierto umbral

Real/Est.	O	B	A	F	G	K	M
O	6	0	0	0	0	0	0
B	3	83	1	1	0	0	0
A	0	2	82	6	0	0	0
F	0	0	21	140	4	1	0
G	0	0	16	9	212	34	1
K	0	0	0	0	1	257	3
M	0	0	0	0	0	0	27

Tabla 68. Matriz de confusión inicial del sistema híbrido final para el tipo espectral MK

Real/Est.	O	B	A	F	G	K	M
O	6	0	0	0	0	0	0
B	4	68	15	1	0	0	0
A	0	3	80	7	0	0	0
F	0	0	27	130	8	1	0
G	0	0	16	30	169	56	1
K	0	0	0	0	13	245	3
M	0	0	0	0	0	2	25

Tabla 69. Matriz de confusión final del sistema híbrido final para el tipo espectral MK

(≥0.5), se podrá entonces afirmar que se trata en realidad de una estrella de tipo A con un nivel de confianza aceptable. En el intervalo entre ambos valores ([0.4-0.5]) será preciso comprobar adicionalmente la banda G, de modo que si su valor supera un cierto umbral (≥1.2) vendrá a confirmar de nuevo la pertenencia de la estrella a los tipos intermedios. El siguiente paso para cerrar definitivamente este supuesto especial consistiría en separar las estrellas F de baja metalicidad de las de tipo G, para lo cual se usa el ratio entre la línea Ca II, K (3933 Å) y el índice H_δ. Al aplicar estas sencillas reglas a las estrellas intermedias de bajo nivel de metalicidad de la base de datos de evaluación considerada, se obtuvo una clasificación correcta en tipo espectral para todas excepto para una, con lo que teniendo en cuenta esta nueva implementación en la que se han incluido reglas suplementarias para delimitar más concretamente los tipos A, F y G, el rendimiento del sistema híbrido para el tipo espectral es ahora del 95% (865 estrellas de 910 correctamente clasificadas).

Otro caso peculiar de clasificaciones erróneas, identificado ya en el análisis de los resultados de las técnicas computacionales precedentes, lo constituye la confusión inusual entre espectros de los tipos B y M que se produce fundamentalmente cuando las líneas de absorción se invierten transformándose en líneas de emisión, especialmente para algunos tipos B tempranos; esta particularidad morfológica se produce en unas zonas espectrales tales (4600 Å - 6600 Å) que inducen al sistema a tratar a estas líneas como si fueran bandas moleculares, características de estrellas más frías. En desarrollos previos se resolvió este conflicto realizando una clasificación guiada o por niveles que, en base a criterios que no incluyan los parámetros espectrales involucrados, separa las estrellas tempranas de las tardías evitando la confusión desde el principio. En este segundo enfoque híbrido neuro-simbólico, este supuesto especial de clasificación se ha resuelto nuevamente implementando las reglas específicas necesarias en la base de conocimiento del sistema experto inicial, las cuales se basan en la detección precoz de las emisiones en las líneas de hidrógeno que causan la confusión (principalmente los índices HI_α en 6563 Å y HI_β en 4861 Å), de forma que si alguno de ellos presenta valores negativos significativos (indicativos de emisión) automáticamente se clasifica la estrella implicada como del tipo B, eludiéndose de esta manera una probable asignación incorrecta de tipo espectral M. De este modo, mediante la aplicación de esta estrategia se ha logrado resolver por completo este problema pues, tal como se refleja en las matrices de confusión anteriores, ninguna estrella de tipo B (con o sin emisión) es clasificada por el sistema híbrido como tardía.

En la figura 123 se recogen los resultados de la clasificación llevada a cabo por el comité de redes de neuronas artificiales que constituye el segundo nivel encargado de refinar las clasificaciones asignadas hasta el subtipo espectral y la clase de luminosidad en el sistema MK, siempre en función de la estimación del tipo espectral obtenida por el sistema experto encargado de resolver la etapa previa. Las redes neuronales han sido capaces de

adjudicar el subtipo correcto (con holgura ±1) al 88% de los espectros de evaluación, con un error medio de 0.76 subtipos. Al igual que en técnicas de clasificación anteriores, la mayor parte de los fallos se registran en los subtipos limítrofes entre tipos espectrales (0-9), manteniéndose asimismo la tendencia observada para la clasificación en tipo espectral, resultando los tipos intermedios más difíciles de predecir. Es preciso señalar que en este caso se ha debilitado en cierto modo la fuerte dependencia constatada hasta el momento entre los resultados de los distintos métodos de clasificación y la composición de los conjuntos espectrales en los que estos basan su diseño, ya que los tipos B, A o M logran ahora tasas de éxito muy aceptables sin presentar un número elevado de representantes en la base de datos de estándares, lo cual es definitivamente debido a que el uso de plantillas MK, aquellas en las que se sustenta el sistema de clasificación, aporta una mayor capacidad de generalización e independencia del conjunto espectral de entrenamiento. Igualmente, en la determinación del nivel de luminosidad se obtienen unos resultados muy satisfactorios que superan con creces los alcanzados en desarrollos anteriores, pues el segundo nivel de clasificación del sistema neuro-simbólico es capaz de asignar la clase de luminosidad correcta al 85% de los espectros de evaluación, comportamiento que sin duda puede atribuirse a la definición en este caso de índices específicos duales (v. tab. 64) para tratar de estimar la anchura de las líneas, factor teóricamente relacionado con el nivel de luminosidad de la estrellas.

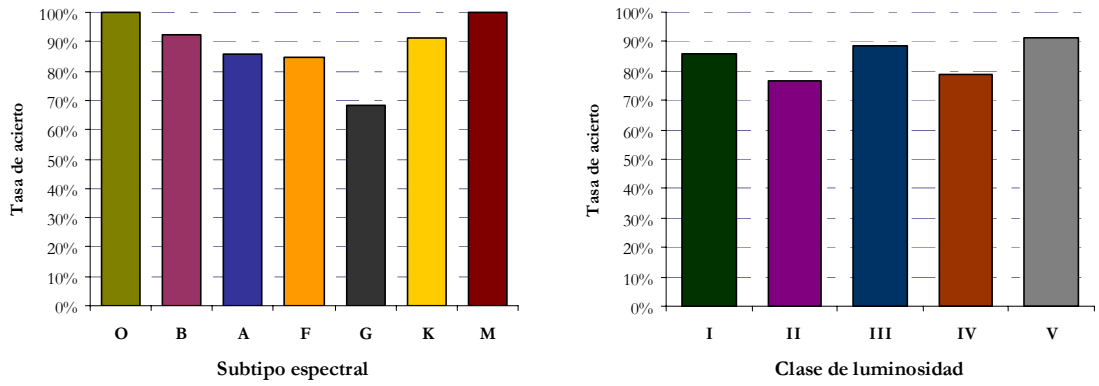


Figura 123. Resultados del sistema híbrido II en subtipo espectral y clase de luminosidad

En la figura 124 se muestra un resumen del rendimiento alcanzado en la clasificación del conjunto de espectros de prueba tanto por el sistema neuro-simbólico en su conjunto como por las principales técnicas que lo componen, así como su comparativa con el sistema híbrido del primer enfoque propuesto; la tabla 70 recoge los resultados del estudio ciego adicional efectuado con ayuda de los expertos en Astrofísica que han colaborado en el desarrollo de este trabajo, el cual consiste en la valoración de la corrección de las clasifi-

caciones asignadas a los espectros sin conocer la fuente de procedencia de las mismas, sea esta otro experto o un método computacional. El sistema híbrido II fue capaz de clasificar el 58% de los espectros de prueba de forma correcta y categórica (una única solución con una probabilidad estimada superior al 75%), obteniendo además una clasificación adecuada con un grado de confianza aceptable (entre el 55% y el 75%) para un 21% adicional. Asimismo, en un 10% de los casos se vio obligado a lanzar varias vías de razonamiento, implicando a distintas redes neuronales del segundo nivel, al haber obtenido el sistema experto inicial una clasificación ambigua en tipo espectral (estrategia similar a la resaltada en azul en la figura 119), llegando a una clasificación mixta pero al mismo tiempo correcta para el 6% de estos supuestos de clasificación. Finalmente en los espectros más controvertidos, aquellos para los que las redes devolvieron una clasificación indeterminada, fue necesario el apoyo de técnicas adicionales (algoritmos de *clustering*, redes funcionales, etc.), con las que se logró resolver satisfactoriamente la clasificación del 3% de los espectros de prueba. En síntesis, de los 910 espectros que forman la base de datos de evaluación, el sistema híbrido concluyó una única clasificación principal y correcta para un total de 718 y una clasificación mixta que incluye la correcta para 91; asimismo fue preciso lanzar varios procesos simultáneos de obtención del subtipo espectral para 90 espectros e invocar métodos alternativos de clasificación para 47 de ellos.

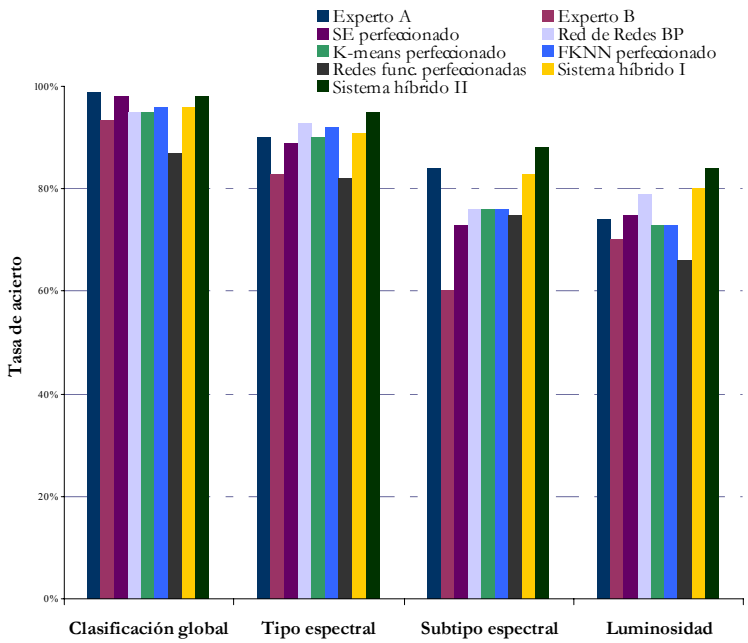


Figura 124. Análisis final del rendimiento del segundo enfoque híbrido en contraste con los métodos óptimos de las técnicas consideradas, desglosado por nivel de clasificación estelar

El estudio final del rendimiento llevado a cabo en estas últimas fases del desarrollo ha puesto de manifiesto que la solución computacional basada en un sistema híbrido neuro-simbólico con procesamiento en cadena constituye una forma más que apropiada de automatización del proceso tradicional de clasificación estelar, ya que su tasa de acierto tanto en subtipo espectral (88%) como en nivel de luminosidad (84%) está por encima de cualquiera de las obtenidas con las diferentes técnicas individuales que lo componen (redes neuronales, sistemas expertos, algoritmos de *clustering*, etcétera). En la figura 125 se muestra esta opción de clasificación alternativa en la interfaz de aplicación del sistema, desde la que ahora es posible visualizar y analizar los espectros al mismo tiempo que se permite efectuar clasificaciones con el conjunto completo de técnicas disponibles, con la estrategia híbrida que combina los métodos óptimos de las mismas o a través del sistema neuro-simbólico objeto de este segundo enfoque híbrido.

	Experto A	**Experto B**	**SE difuso**	**Redes BP**	**Alg. K-means**	**Alg. FKNN**	**Redes func.**	**Sist. híb. I**	**Sist. híb. II**
Experto A	100%	78%	86%	85%	85%	85%	71%	89%	93%
Experto B	87%	100%	86%	86%	86%	87%	82%	83%	71%
SE difuso	84%	76%	100%	79%	76%	75%	71%	78%	85%
Redes BP	84%	78%	79%	100%	75%	76%	72%	75%	91%
K-means	83%	76%	76%	75%	100%	78%	70%	71%	86%
FKNN	83%	77%	75%	76%	78%	100%	70%	72%	82%
Red func.	78%	72%	71%	72%	70%	70%	100%	70%	65%
Sist. híb. I	85%	72%	78%	75%	71%	72%	70%	100%	85%
Sist. híb. II	93%	71%	85%	91%	86%	82%	65%	85%	100%

Tabla 70. Análisis de resultados del estudio ciego efectuado para evaluar el porcentaje de acuerdo entre los expertos humanos, el segundo sistema híbrido propuesto y las diferentes técnicas óptimas de clasificación

El sistema híbrido basado en dos niveles de clasificación cooperativos que se ha expuesto a lo largo de este capítulo supone, como se ha comprobado, la opción de clasificación más adecuada ya que, mediante la elección del método más apropiado para cada tipo de espectro y la aplicación de las estrategias de perfeccionamiento descritas (construcción de un catálogo de estrellas estándares, revisión exhaustiva de los criterios de clasificación, inclusión de diferentes formalismos de representación del conocimiento, etc.), es capaz de

alcanzar mayor eficiencia, versatilidad y flexibilidad que un sistema basado en una única técnica computacional e incluso que el sistema híbrido propuesto en el primer enfoque (v. sec. 4.9), logrando al mismo tiempo adaptarse más satisfactoriamente al tipo de estrategias de razonamiento que se emplean en el proceso de análisis y clasificación estelar clásico, y resolviendo asimismo en gran medida algunos de los problemas que no encontraron solución en desarrollos previos, como la clasificación de las estrellas con líneas de emisión o la correcta determinación del tipo espectral de las estrellas intermedias con bajo nivel de metalicidad. En el anexo IV se incluyen los detalles de implementación específicos de los principales módulos que constituyen el sistema híbrido de clasificación estelar que se ha formulado como solución final para abordar la clasificación MK de las estrellas a través del análisis de su espectro óptico.

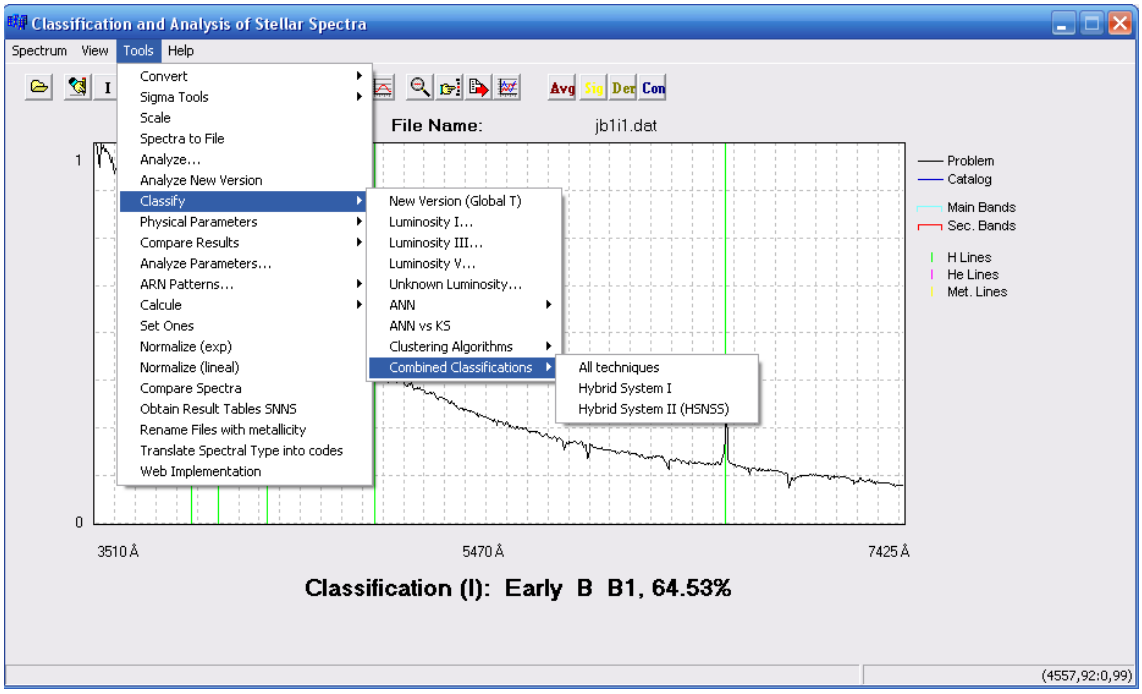


Figura 125. Interfaz del sistema híbrido desarrollado mostrando la opción de clasificación basada en un sistema neuro-simbólico

6 PARAMETRIZACIÓN DE ESPECTROS ESTELARES

La diversidad de los fenómenos de la Naturaleza es tan grande y los tesoros que encierran los cielos tan ricos, precisamente para que la mente del hombre nunca se encuentre carente de su alimento básico

Johannes Kepler

Desde el punto de vista de la Astrofísica, las estrellas constituyen la unidad básica de información: conjuntos de estrellas forman entidades más complejas, las galaxias, y conjuntos de galaxias, finalmente, el Universo. La caracterización física de las estrellas es el paso previo y necesario para comprender el origen, la estructura y evolución de nuestra Galaxia, la Vía Láctea, e interpretar sus propiedades en términos de modelos cosmológicos que permitan profundizar en el conocimiento sobre el origen y evolución del Universo.

Es importante resaltar que, en estos momentos, la Astrofísica estelar y galáctica está experimentando un acelerado avance debido fundamentalmente a que se han llevado a cabo los primeros mapeados observacionales completos de amplias regiones del cielo, lo que se ha venido a denominar *surveys* observacionales masivos. Entre los más significativos que ya están disponibles se podrían mencionar el SDSS (*Sloan Digital Sky Survey*), el IRAS (*Infrared Astronomical Satellite*) o el 2MASS (2-*Micron All-Sky Survey*); mientras que RAVE (*Radial Velocity Experiment*), Pan-STARRS (*Panoramic Survey Telescope and Rapid Response System*), SEGUE (*Sloan Extension for Galactic Understanding and Exploration*) y GAIA (*Global Astrometric Interferometer for Astrophysics*) se encuentran en curso o todavía en fase de diseño y/o desarrollo. Para desentrañar la compleja historia de la Galaxia, estos *surveys* deberían ser capaces de identificar sus diferentes poblaciones estelares e, idealmente, permitir la determinación con grandes precisiones de las posiciones, distancias y velocidades, así como de los parámetros físicos (temperaturas efectivas, gravedades o radios) y químicos (abundancias metálicas y abundancias de elementos químicos individuales) de conjuntos de estrellas amplios y significativos en todas las regiones del diagrama H-R [Russel 1914].

El espectro de una estrella, tal y como se ha tenido ocasión de comprobar en los capítulos precedentes, puede utilizarse para determinar su posición en el diagrama H-R, de hecho gran parte del éxito del sistema de clasificación MK radica precisamente en el aprovechamiento de esta característica. El espectro es la huella de identidad que refleja con detalle el paso de la luz por la estructura atmosférica de una estrella, la presencia de diferentes elementos químicos en la misma, la distancia a la que se encuentra y sus movimientos. A partir de estos parámetros y del uso de modelos de evolución estelar apropiados se podrían inferir incluso otras propiedades fundamentales tales como la masa o la edad de la estrella. Todos estos parámetros físico-químicos están acoplados de tal forma que no resulta un problema trivial extraerlos a partir del espectro estelar resultante. Aunque existen diferentes parametrizaciones fotométricas de la temperatura, gravedad o metalicidad a partir de medidas fotométricas de la luz estelar en diversas bandas, si se pretende abordar de forma sistemática el estudio de amplias poblaciones estelares es importante recurrir a modelos de atmósferas y programas de síntesis espectral que permitan su correcta determinación.

En este capítulo se presenta la contribución de esta tesis doctoral a la extracción automática de parámetros de las estrellas, tales como la temperatura y gravedad efectivas, a partir del análisis de sus espectros ópticos. Los trabajos previos en este campo [Bailer-Jones 1997] [Snider 2001] y la experiencia adquirida en el exhaustivo estudio de diferentes técnicas computacionales efectuado durante el desarrollo previo del sistema híbrido de clasificación estelar, aconsejan que esta parametrización automática se lleve a cabo mediante el diseño e implementación de redes de neuronas artificiales, entrenadas con un conjunto de espectros generados a partir de modelos de atmósferas con un programa de síntesis espectral, las cuales posteriormente se integrarán en el sistema final de tratamiento de espectros estelares.

6.1 Transporte de energía a través de una atmósfera estelar

La energía que se genera en el núcleo central de una estrella se emite hacia el exterior atravesando las diferentes capas de la misma. El trasporte de energía que se produce normalmente en una estrella tiene lugar principalmente mediante dos mecanismos: convección o transporte de energía por movimientos verticales debidos a diferencia de flotabilidad en el fluido o plasma estelar, y radiación o transporte mediante ondas electromagnéticas.

El transporte por convección es importante cuando existe un gradiente de temperaturas que supera un cierto gradiente límite, conocido como el gradiente adiabático [Salaris 2006]; la estabilidad ante movimientos verticales y el gradiente de temperaturas adiabático, como límite a los movimientos espontáneos en una atmósfera, son conceptos habituales en Física para estudiar el equilibrio de una atmósfera estratificada en densidad. El transporte por radiación es significativo, por el contrario, en aquellas capas de una estrella en las que el gradiente de temperatura no supera el valor adiabático que desencadena el proceso convectivo, donde al mismo tiempo la opacidad o extinción de la luz por procesos de absorción o dispersión es lo suficientemente baja como para permitir el paso de las ondas electromagnéticas a través del medio material.

La estructura interna de una estrella, o lo que es lo mismo la disposición del gas o plasma que la compone en diferentes estratos desde el núcleo hacia el exterior en los que cambian sus principales propiedades (densidad, presión, temperatura, etc.), depende tanto de su masa como de su edad. En estrellas de masa similar a la del Sol (entre 0.3 y 1.5 masas solares) las reacciones principales que tienen lugar en el núcleo son las originadas por la transformación de hidrógeno en helio mediante la cadena protón-protón. Este tipo de reacciones nucleares no establece un gradiente de temperaturas muy acusado en las capas internas de la estrella, de modo que el transporte energético en las capas profundas tiene lugar de forma predominante por radiación. Las capas más externas de estas estrellas presentan temperaturas lo suficientemente bajas como para que el hidrógeno no se encuentre ionizado y sea opaco a los fotones ultravioleta, de forma que la convección pasaría aquí a ser dominante. Así, se dice entonces que las estrellas de baja masa tienen un núcleo radiativo y una envoltura convectiva. En la figura 126 se muestra un corte en la estructura de una estrella de tipo solar con las características mencionadas.

En el caso de las estrellas con mayor masa (superior a 1.5 veces la del Sol), las temperaturas que se alcanzan en el núcleo son más elevadas (por encima de 18000 K) y, por tanto, las reacciones que allí se originan tienen lugar principalmente mediante el ciclo CNO. Esta cadena de reacciones nucleares produce energía con unas tasas que dependen de la

T^{15}, mientras que en la cadena protón-protón las tasas de producción de energía dependerían de T^{14}). La alta dependencia de la producción de energía con la temperatura favorece que se establezca un fuerte gradiente de temperaturas que provoca que el trasporte de energía se produzca de manera convectiva en el interior de la estrella. Si bien la temperatura decrece hacia las capas externas de la misma, se mantienen valores tan altos que ocasionan que el hidrógeno se encuentre totalmente ionizado en la envoltura y que sea transparente a la radiación ultravioleta, de modo que en este caso las estrellas masivas presentarían una envoltura radiativa.

El modelo de estructura estelar utilizado habitualmente es el modelo quasi-estático con simetría esférica, en el que se asume que la estrella está en un estado de equilibrio y que tiene simetría esférica. Este modelo maneja cuatro ecuaciones diferenciales básicas de primer orden, dos de las cuales expresan como varían la presión y la masa con el radio de la estrella, mientras que las otras dos reflejan la variación de la temperatura y la luminosidad con dicho radio. Así, las ecuaciones de estructura estelar se formulan considerando la variación de la densidad de materia $\varrho(r)$, la temperatura $T(r)$, la presión total (de materia y de radiación) $p(r)$, la luminosidad $l(r)$ y la tasa de producción de energía por unidad de masa $\varepsilon(r)$, en una capa esférica de anchura dr situada a una distancia r del centro. La estrella se supone en estado de equilibrio termodinámico local (LTE), de manera que se asume que la temperatura es la misma para la materia y para los fotones. Esta aproximación es normalmente válida en una estructura estelar debido a que el camino libre medio de los fotones (distancia estadística media sin interaccionar con otras partículas), λ, es mucho menor que la distancia a lo largo de la cual varía la temperatura, es decir, $\lambda << |T/\nabla T|$.

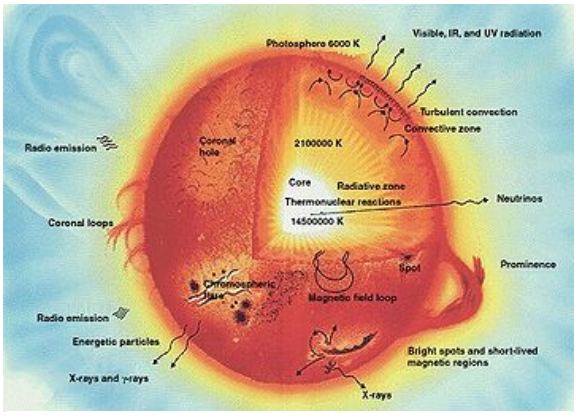


Figura 126. Estructura interna de una estrella similar al Sol (créditos: NASA)

La ecuación de equilibrio hidrostático expresa el equilibrio entre la fuerza, debida al gradiente de presión, y la gravedad que mantiene la estructura de la estrella estable. Esto es:

$$\frac{dP}{dr} = -\frac{G\, m(r)\, p}{r^2},$$

siendo $m(r)$ la masa de la estrella desde el centro hasta el interior de la capa situada a distancia r y G la constante de la gravitación universal. El valor de esta masa crece con el radio según la siguiente ecuación de continuidad:

$$\frac{dm(r)}{dr} = 4\pi r^2 p$$

El valor de la energía que emite la estrella en la capa situada a una distancia r puede obtenerse a través de la denominada ecuación de energía, la cual podría expresarse matemáticamente como sigue:

$$\frac{dl}{dr} = 4\pi r^2 p(\varepsilon - \varepsilon_\upsilon),$$

donde ε_v es la luminosidad producida en forma de neutrinos por unidad de masa. Fuera del núcleo de la estrella no tienen lugar reacciones nucleares y no se genera energía, de modo que la luminosidad será constante.

Finalmente, la ecuación de transporte de energía adopta diferentes formas dependiendo del mecanismo de transporte que tenga lugar en la capa estelar. En el caso de una zona en la que este se produzca por radiación, esta ecuación se formularía como sigue:

$$\frac{dT}{dr} = -\frac{1}{k}\frac{l}{4\pi r^2},$$

donde se asume valor 1 para la constante de Stephan-Boltzman, y k es la opacidad de la materia. Cuando atraviesan el medio atmosférico, los fotones sufren procesos de absorción-dispersión que pueden describirse mediante un coeficiente de absorción, k, que se definiría como el inverso del camino libre medio del fotón. La disminución de intensidad en el haz de luz puede expresarse como $dI = k\rho I\, ds$, donde I es la intensidad y s el camino recorrido en la atmósfera. Si se integra esta ecuación para un valor inicial de intensidad I_0, tal que $\ln (I/I_0) = -k\rho s$, se define entonces la profundidad óptica, $\tau = k\rho s$, como el número medio de caminos libre en la atmósfera. Así, en función del valor de la profundidad óptica a una determinada longitud de onda las atmósferas se clasificarían en espesas (*thick*) o diáfanas (*thin*) [Zombeck 2007].

En relación con el transporte por convección es preciso mencionar que no existe una formulación matemática rigurosa de las zonas convectivas atmosféricas. Este tipo de transporte de energía se suele modelizar utilizando la teoría de la longitud de mezcla (*mixing length*), la cual parametriza los movimientos libres en una atmósfera convectiva mediante el valor de una longitud de mezcla, ξ que expresaría la distancia recorrida en la atmósfera a lo largo de la cual una porción de fluido mantiene las mismas propiedades físicas antes de dispersarse en el medio que la rodea. En la figura 127 se muestra una representación gráfica de tal distancia, donde la longitud de la mezcla viene indicada por la barra vertical situada a

la izquierda. Otra ecuación necesaria y útil para caracterizar este tipo de atmósferas es la denominada ecuación de estado, que relaciona la presión con el resto de variables locales (temperatura, densidad, composición química) apropiadas al tipo de materia que compone la atmósfera. Normalmente se considera la ecuación de los gases ideales, la presión de radiación, la presión debida a la degeneración de electrones, etc.

Las ecuaciones diferenciales descritas unidas a las condiciones de contorno pertinentes, valores de las variables en el centro (r = 0) y en la superficie (r = R) de la estrella, se pueden integrar para determinar la estructura estelar. Los modelos de atmósferas consistirían básicamente entonces en tabulaciones de diversas magnitudes físicas características (presión, temperatura, densidad, coeficiente de absorción, intensidad media, parámetros magnéticos, etc.), construidas sobre la base de observaciones y leyes físicas conocidas para determinadas profundidades estelares ópticas y/o geométricas seleccionadas, a través de las cuales se trata de describir la estructura física de las atmósferas estelares y sus espectros observables. Este tratamiento simplificado de los procesos físicos que tienen lugar en el interior de una estrella proporciona en general una buena aproximación, permitiendo comprender de forma satisfactoria la estructura estelar en la mayor parte de las fases evolutivas observables en el diagrama H-R. No obstante su simplicidad, las principales limitaciones de este modelo están relacionadas con nuestro conocimiento restringido de los fenómenos de transporte, del tratamiento de la convección y de la turbulencia [Gray 2005].

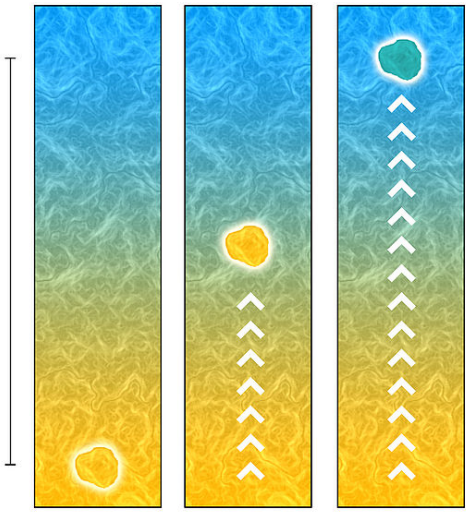


Figura 127. Representación gráfica del concepto de longitud de la mezcla en una atmósfera convectiva

El estudio y la generación de modelos de atmósferas para estrellas de distintos tipos espectrales es de importancia fundamental en la actualidad, no solamente por el desarrollo que en sí mismo supone, sino también por su significancia en distintas áreas de la Astronomía, entre las que destacarían sin duda el estudio de la dinámica galáctica, la determinación de parámetros estelares tan relevantes como la temperatura efectiva, la gravedad o las abundancias químicas y la síntesis de poblaciones estelares.

6.2 Modelos de síntesis espectral en estrellas. El programa SPECTRUM

Los modelos de síntesis espectral obtienen espectros estelares teóricos a partir de los modelos de atmósferas expuestos en el epígrafe anterior. En el desarrollo llevado a cabo en esta tesis doctoral se ha calculado un entramado de espectros para estrellas de nivel de metalicidad solar con un amplio rango de temperaturas y gravedades efectivas, cubriendo los valores de dichos parámetros en estrellas normales con tipos espectrales desde B hasta K. Para crear esta batería de espectros se ha empleado el programa de síntesis espectral SPECTRUM [Gray 1994a], disponible de forma libre en Internet [SPECTRUM 2010]; este software es capaz de generar un espectro sintético a partir de un modelo de atmósfera específico bajo la hipótesis de equilibrio termodinámico local (LTE). En concreto en este desarrollo se han utilizado los modelos de atmósferas estelares calculados por R. Kurucz [Kurucz 1992], pues son los de uso más frecuente y más referenciados en Astrofísica estelar; asimismo tales modelos se han generado mediante el programa ATLAS12 escrito también por dicho autor [ATLAS12 2010].

En la figura 128 se incluyen a modo de ejemplo las primeras líneas del modelo de atmósfera particular correspondiente al Sol, presentado en formato ASCII (fichero *sun.mod*). El archivo continuaría con 59 líneas adicionales, de manera que en total en este modelo particular la atmósfera se divide en 64 capas cada una de las cuales se caracteriza mediante valores específicos de la temperatura, la presión, la densidad de electrones, etc. La primera línea, denominada cabecera, recoge en primer lugar la temperatura efectiva (en este caso T_{eff} = 5777 K), a continuación el logaritmo de la gravedad superficial (log g = 4.4377 cm/s^2), el nivel de metalicidad total con respecto al valor solar en escala logarítmica ([M/H] = 0.0) y finalmente el número de capas (64 para esta atmósfera). Después de esta cabecera, las siguientes líneas contienen los datos que el programa de síntesis espectral precisa para computar y generar el espectro sintético, estructurados en capas de tal modo que la primera de ellas represente la superficie estelar. En cada una de estas capas, la primera columna se corresponde con la profundidad óptica, la segunda con la temperatura y, sucesivamente, se incluyen la presión gaseosa, la densidad de electrones, el coeficiente de absorción medio de Rosseland, la presión de radiación y la velocidad de microturbulencia en unidades de m/s. Los nuevos modelos de Kurucz/Castelli contienen tres columnas adicionales que expresan la cantidad de flujo transportada mediante convección, la velocidad de convección y la velocidad del sonido [Castelli 2004].

Además de los modelos de atmósfera, para efectuar los cálculos SPECTRUM precisa también de una serie de datos atómicos y moleculares, que se le proporcionan de nuevo a través de ficheros específicos. En la figura 129 se muestra un esquema del proceso de

creación de los espectros sintéticos mediante este paquete software, en el que se han indicado todas las entradas de información necesarias para la correcta generación de los mismos.

```
5777.0 4.43770 0.00 64
2.62383508E-03 3398.7 7.188E+01 6.618E+09 7.359E-04 1.133E-01 1.500E+05
2.62384162E-03 3871.5 7.188E+01 1.301E+10 7.359E-04 8.267E-02 1.500E+05
3.17880896E-03 3901.4 8.709E+01 1.566E+10 8.502E-04 7.839E-02 1.500E+05
4.02509434E-03 3937.8 1.103E+02 1.966E+10 1.019E-03 7.581E-02 1.500E+05
4.97406188E-03 3969.0 1.363E+02 2.409E+10 1.202E-03 7.460E-02 1.500E+05
.
.
.
```

Figura 128. Modelo de atmósfera del Sol creado a partir de los modelos de R. Kurucz

La lista de líneas que se distribuye con el software, fichero *luke.lst*, contiene datos de aproximadamente un millón de líneas atómicas y moleculares en la región espectral entre 3000 Å y 6800 Å (espectro óptico), siendo por consiguiente válida para generar espectros con temperaturas entre 4000 K y 20000 K. En este archivo se incluyen tanto los elementos e iones más relevantes de los espectros estelares como las moléculas diatómicas de CH, NH, OH, MgH, SiH, CaH, SiO, C2, CN, CO y TiO. El formato de una línea típica sería el siguiente:

4045.813 26.0 11976 36686 0.280 1.000 01 NIST,

donde el primer dígito corresponde a la longitud de onda expresada en Ángstroms (Å); el segundo es el código del elemento químico que proporciona información tanto del número atómico como del estado de ionización, por ejemplo 26.0 se referiría a una línea de hierro en estado neutro (FeI), siendo 26 el número atómico del elemento Fe y codificándose el estado neutro mediante el valor decimal 0 (el código para el Fe II sería 26.1, para el Ca III 20.2 y así sucesivamente); la tercera y cuarta entradas se corresponden con la energía en el estado más bajo y más alto, respectivamente, expresadas en unidades de cm^{-1}; el quinto valor alude al logaritmo del producto del peso estadístico del nivel energético inferior multiplicado por la intensidad de oscilación de la transición, esto es, log (gf); la sexta columna indica el factor de retoque (*fudge factor*) empleado para el cálculo del ensanchamiento de van der Waals de la línea; el séptimo valor codifica el tipo de transición, de forma que 01 hace referencia a una transición s–p, 12 a una transición p–d, etcétera; y finalmente, la octava entrada proporciona la fuente de los datos. En el ejemplo anterior de la línea de hierro neu-

tro (FeI), en esta última columna se especifica NIST para indicar el servidor de información localizado en el *National Institute of Standards and Technology* [NIST 2010]; si la fuente comenzase por K, se trataría de la lista de líneas del modelo de Kurucz, la cual contiene centenares de millones de líneas tanto atómicas como moleculares. La mayoría de los datos incluidos en el fichero *luke.lst* provienen de estas dos fuentes.

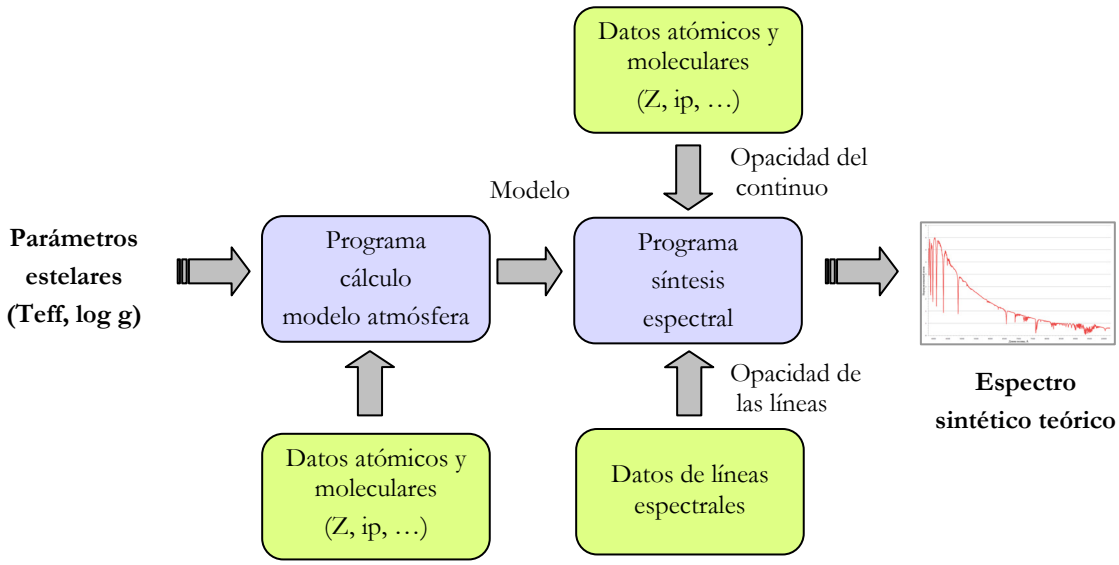


Figura 129. Proceso básico de generación de un espectro sintético

Tal y como se observa en la figura 129, la otra entrada básica de información del programa SPECTRUM está constituida por el fichero de datos atómicos y moleculares, denominado *stdatom.dat* para el caso de estrellas de nivel de metalicidad solar. Este archivo contiene las abundancias atómicas del Sol de Grevesse y Sauval [Grevesse 1998], siendo el formato de cada una de sus líneas el siguiente:

1 - 0.0360 1.008 13.5984 0.000 0.000 0.000 0,

donde la primera columna es el código de átomo o molécula descrito para el archivo *luke.lst*; la segunda contiene, para los átomos, el logaritmo de la abundancia solar calculado como la densidad numérica de dicho elemento relativa a la densidad numérica total, es decir, log (A/N_{total}), mientras que en el caso de las moléculas el valor de esta columna se fija a -7.50; la tercera entrada se refiere a la masa atómica media tanto para los átomos como para las moléculas; en la cuarta se especifica la energía de la primera ionización en electrón voltios (eV) y, en el caso de moléculas, la energía de disociación; la quinta entrada contiene, para los átomos, la energía de la segunda ionización, y, para las moléculas, la denominada

masa reducida (m1m2/(m1+m2)); la sexta columna incluye la energía de la tercera ionización y, para las moléculas, el factor de retoque por el cual ha de multiplicarse el valor gf de cada línea espectral, información que permite al usuario disponer de un instrumento robusto y directo para modificar, por ejemplo, el valor de las bandas moleculares tras comparar su apariencia con la de un espectro observado; la séptima columna proporciona la energía para la cuarta ionización, siendo 0 para las moléculas; por último, la octava entrada se refiere al máximo valor de la carga admitido por el programa de síntesis donde, por ejemplo, el valor 1 en este campo significaría que el software únicamente puede calcular líneas espectrales para especies químicas en estado neutro y una vez ionizado (I y II), etc.

Antes de proceder con el cómputo del espectro en sí, SPECTRUM lleva a cabo una serie de cálculos previos tales como la extracción de los valores de la profundidad óptica, de la temperatura y de la presión gaseosa a partir del modelo de atmósfera con el objetivo de calcular las densidades numéricas de electrones y de otras especies importantes (hidrógeno, helio, carbono, nitrógeno, oxígeno, etc.), así como de sus respectivos iones y de las moléculas diatómicas más relevantes. En esta fase inicial se resuelve un sistema de siete ecuaciones de equilibrio no lineales para determinar el valor de las densidades antes mencionadas, cuyos detalles precisos dependen del valor de la temperatura efectiva de la estrella: para temperaturas superiores a 8500 K en el balance de equilibrio no se incluye ninguna molécula salvo H2, en cambio para temperaturas más bajas se tienen en cuenta varios tipos de moléculas (H2O, CH, NH, etcétera). Esto es:

- La ecuación de equilibrio para el hidrógeno, incluyendo los estados neutro e ionizado (H^-, H_2 y H^+) y, únicamente para temperaturas inferiores a 8500 K, las moléculas H_2O, CH, NH y OH.

- La ecuación de equilibrio para el helio, incluyendo dos niveles de ionización.

- La ecuación de equilibrio para el carbono, incluyendo dos niveles de ionización (CI, CII y CIII) y, en bajas temperaturas, las moléculas CH, CN, CO y C_2; para temperaturas efectivas superiores a 8500 K se consideran cuatro estados de ionización pero, al igual que para las ecuaciones siguientes de nitrógeno y oxígeno, no se tienen en cuenta las moléculas.

- La ecuación de equilibrio para el nitrógeno, con dos estados de ionización y las moléculas CN, NH, NO y N_2.

- La ecuación de equilibrio para el oxígeno, con dos estados de ionización y las moléculas CO, NO, OH y O_2.

- La ecuación de balance de cargas, con la contribución de los electrones procedentes de las ionizaciones de los elementos involucrados en las ecuaciones precedentes

(hidrógeno, helio, carbono, nitrógeno y oxígeno) y además las siguientes especies: sodio, magnesio, aluminio, silicio, azufre, potasio, calcio y hierro.

- La densidad numérica total incluyendo todas las especies químicas mencionadas, la cual debe concordar con el valor de P_{gas}/kT que se obtenga del modelo de atmósfera.

Este sistema de ecuaciones se resuelve de forma iterativa en cada uno de los niveles de la atmósfera estelar, siendo rápida su convergencia. Las abundancias de las diferentes especies químicas en cada nivel atmosférico se almacenan en memoria tras los cálculos, teniendo en cuenta que los valores de la densidad electrónica derivados deben estar siempre por debajo del 1% de los proporcionados por el modelo de atmósfera. Seguidamente, SPECTRUM procede al cálculo de las opacidades y profundidades ópticas de referencia en cada nivel de la atmósfera; para H, HeI, HeII y el ión H- se incluyen las opacidades *bound-free* y *free-free*, y la dispersión de tipo Rayleigh para H, H_2 y HeI; además para bajas temperaturas se consideran opacidades que incluyen el continuo debido a CI, MgI, AlI, SiI, CaI, FeI, CH, OH y MgH y, para temperaturas intermedias, las debidas a NI, OI, MgII, CaII y SiII.

Una vez finalizado el cálculo de las opacidades, SPECTRUM aborda la generación del espectro sintético en sí mismo, computándolo básicamente en bloques de 20 Å, si bien se pueden considerar segmentos menores. En cada uno de estos bloques, el programa calcula en primer lugar la opacidad del continuo y el flujo continuo emergente en los extremos de cada intervalo de 0.05 Å, interpolándose a continuación estos valores de opacidad y flujo en cada punto intermedio hasta llegar a un borde de absorción. Inmediatamente después se calcula la opacidad de las líneas en cada punto del espectro correspondiente al intervalo de longitudes de onda en cuestión. Seguidamente, utilizando las ecuaciones de Boltzmann y Saha, se calculan las abundancias iónicas y las poblaciones de niveles para cada transición de las líneas que han contribuido en concreto a la opacidad total; el parámetro de ensanchamiento de las líneas se obtiene teniendo en cuenta el ensanchamiento natural de van der Waals y el cuadrático por efecto Stark. La opacidad de cada línea se vuelve entonces a computar para cada nivel en la atmósfera utilizando una función de Voigt como envolvente [Zombeck 2007].

La opacidad y la profundidad óptica tanto de la línea como del continuo se tienen en cuenta para calcular la contribución de cada línea, que una vez dividida por el flujo del continuo proporciona la intensidad residual en cada punto del espectro (de forma predeterminada se calcula el espectro del disco estelar integrado). En la figura 130 se muestra un fragmento del espectro solar en el que se refleja la forma del continuo atmosférico y la contribución de las líneas espectrales al valor del flujo. El flujo residual obtenido (espectro de líneas) junto con las longitudes de onda correspondientes se almacenan en el archivo de

salida del programa de síntesis; en la dirección de Internet en la que está disponible el código de este software se pueden consultar detalles más específicos sobre la forma de calcular las opacidades de algunas líneas [SPECTRUM 2010]. La figura 131 refleja la superposición de un espectro sintético generado siguiendo el procedimiento descrito y su correspondiente espectro real perteneciente al mismo tipo.

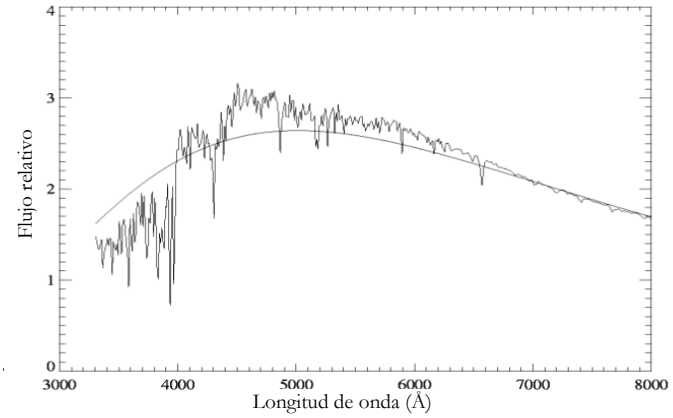


Figura 130. Redistribución del flujo del azul al rojo en el espectro solar debida a la absorción de metales

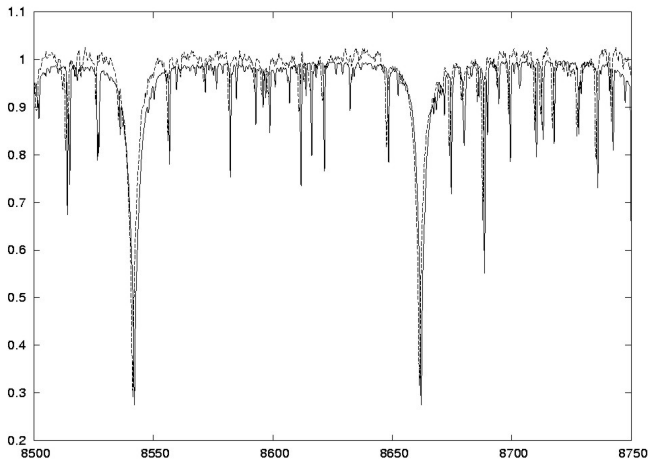


Figura 131. Comparación entre un espectro real y el sintético generado correspondiente al mismo tipo

6.3 Parametrización en temperatura y gravedad efectivas mediante redes de neuronas artificiales

La extracción de los parámetros físicos y químicos de las estrellas a partir del análisis de su espectro, i. e. parametrización espectral, trata de simplificar el proceso de clasificación MK obviando los estudios visuales y concretos que caracterizan a este y obteniendo directamente las medidas de parámetros atmosféricos tales como la temperatura superficial o la magnitud absoluta de la estrella, sin necesidad de incluir el espectro previamente en ningún grupo predeterminado (tipo espectral o clase de luminosidad). En principio esta aproximación más específica al problema de caracterización física y química de las estrellas podría considerarse más adecuada, ya que permitiría estudiar fácilmente (mediante modelos de atmósferas de nivel de metalicidad subsolar) espectros que no sería posible clasificar apropiadamente con el sistema MK, si bien es preciso indicar que en este caso la calidad de las estimaciones depende en gran medida del modelo teórico subyacente que se haya seleccionado.

La dependencia de los rasgos espectrales con los dos parámetros atmosféricos principales (temperatura y gravedad efectivas) es fuertemente no lineal, por lo que cabe esperar que el paradigma de redes de neuronas artificiales represente una buena elección a la hora de plasmar dicha relación, ya que desde sus primeras implementaciones esta técnica de Inteligencia Artificial ha demostrado sobradamente su eficacia en la resolución de problemas donde las salidas dependen de forma no lineal de una o varias variables incluidas en los patrones de entrada [Haykin 2008]. Asimismo los estudios de extracción de parámetros astrofísicos realizados en los últimos años [Bailer-Jones 1997] [Snider 2001] [Willemsem 2005] [Giridhar 2006] y nuestra propia experiencia en problemas similares, aconsejan de igual modo basar la automatización de dicho proceso en esta técnica computacional.

Será, por tanto, el objetivo principal de este desarrollo explorar el funcionamiento de las redes de neuronas artificiales para obtener de forma automática las temperaturas y gravedades efectivas de las estrellas a partir de sus espectros ópticos, tomando como referencia espectros sintéticos generados con el software mencionado (SPECTRUM) y empleando los modelos de atmósferas descritos en las secciones precedentes (Kurucz). La metodología a seguir consistirá básicamente en el diseño y entrenamiento de diferentes configuraciones de redes neuronales con la batería de espectros sintéticos, y en la validación posterior de la calibración obtenida con los diferentes conjuntos de espectros disponibles pertenecientes a los catálogos estelares seleccionados como referencia para la clasificación automática (véase capítulo 4 para detalles más específicos). En concreto se seleccionarán aquellas arquitecturas neuronales que han mostrado mayor solvencia, alcanzando un rendimiento óptimo en el estudio comparativo previo llevado a cabo durante el desarrollo del

sistema híbrido de clasificación estelar presentado, en el cual finalmente también estas se integrarán. En las secciones siguientes se incluyen los detalles relativos a los procesos de diseño, implementación y evaluación del rendimiento de las redes neuronales propuestas para llevar a cabo la estimación automática de la temperatura y gravedad efectivas de las estrellas a partir de su espectro óptico.

6.3.1 Batería de espectros sintéticos

En este desarrollo, como se ha mencionado, se han empleado los modelos de atmósferas estelares de Kurucz [Kurucz 1992] y el programa de síntesis espectral SPECTRUM [Gray 1994a] para generar una batería de espectros sintéticos en la región visible que cubren el rango de propiedades atmosféricas esperables en estrellas normales de nivel de metalicidad solar, correspondientes a los tipos espectrales B-K y pertenecientes a todas las clases de luminosidad del sistema estándar MK. Por consiguiente, las atmósferas elegidas para crear tales espectros se caracterizarán por valores de la temperatura efectiva comprendidos entre 4000 K y 20000 K y de la gravedad (expresada como log g) entre 0.5 y 5.0. Además, se considerarán únicamente modelos de metalicidad solar ([M/H] = 0.0) y con una velocidad de microturbulencia de 2 km/s. Este último parámetro se refiere a movimientos grupales de los átomos cuyo tamaño es considerablemente menor que el espesor de la capa que forma la línea; la distribución de velocidades es gaussiana y contribuye al ensanchamiento de las líneas espectrales.

SPECTRUM, como se ha descrito, es un programa de uso bien documentado al que una vez que se le proporciona el correspondiente modelo de atmósfera en el formato que detalla la bibliografía, sólo resta indicarle el rango espectral (3510 Å a 6800 Å en este caso) y el valor de microturbulencia, el cual ha de ser consistente con el modelo de atmósfera seleccionado (2 km/s). Después de efectuarse la síntesis mediante el proceso resumido en el epígrafe anterior, cada uno de los espectros sintéticos generados se recogerá finalmente en un fichero ASCII que relaciona las longitudes de onda en Ángstroms y el flujo energético en unidades de $erg^{-1}\ cm^{-2}\ s^{-1}\ Å^{-1}$. En total se han considerado las 352 combinaciones de los parámetros atmosféricos citados que se muestran en la tabla 71. Como puede observarse, en el presente trabajo no se han considerado estrellas correspondientes a tipos ni muy tempranos ni muy tardíos en los que los efectos de formación de líneas en la cromosfera y de no equilibrio termodinámico local (NLTE) pueden llegar a ser importantes.

El método empleado en este enfoque de la parametrización espectral automática consiste en el diseño y entrenamiento de redes de neuronas artificiales con los espectros sintéticos generados, las cuales posteriormente se utilizarán para la obtención de parámetros físicos de espectros reales observados. Por esta razón el procesado de los espectros

sintéticos y de los espectros estelares reales ha de ser necesariamente homogéneo, ya que la bondad de la estimación de los parámetros T_{eff} y log g dependerá en gran medida de la idoneidad del conjunto de espectros sintéticos empleados durante la fase de aprendizaje.

T_{eff}	log g									
	0.5	**1.0**	**1.5**	**2.0**	**2.5**	**3.0**	**3.5**	**4.0**	**4.5**	**5.0**
4000	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
4250	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
4500	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
4750	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
5000	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
5250	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
5500	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
5750	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
6000	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
6250	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
6500	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
6750	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
7000	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
7250	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
7500	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
7750	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
8000		X	X	X	X	X	X	X	X	X
8250		X	X	X	X	X	X	X	X	X
8500			X	X	X	X	X	X	X	X
8750			X	X	X	X	X	X	X	X
9000			X	X	X	X	X	X	X	X
9250				X	X	X	X	X	X	X
9500				X	X	X	X	X	X	X
9750				X	X	X	X	X	X	X
10000				X	X	X	X	X	X	X
10250				X	X	X	X	X	X	X
10500				X	X	X	X	X	X	X
10750				X	X	X	X	X	X	X
11000				X	X	X	X	X	X	X
11250				X	X	X	X	X	X	X
11500				X	X	X	X	X	X	X
11750				X	X	X	X	X	X	X
12000					X	X	X	X	X	X
12250					X	X	X	X	X	X
12500					X	X	X	X	X	X
12750					X	X	X	X	X	X
13000				X	X	X	X	X	X	X
14000				X	X	X	X	X	X	X
15000					X	X	X	X	X	X
16000					X	X	X	X	X	X
17000					X	X	X	X	X	X
18000					X	X	X	X	X	X
19000					X	X	X	X	X	X
20000						X	X	X	X	X

Tabla 71. Combinación de parámetros atmosféricos empleada para la generación de la batería de espectros sintéticos con el programa de síntesis espectral SPECTRUM

Así, con el objetivo por tanto de transformar los espectros sintéticos a un formato equivalente al de los espectros observacionales, se utilizó un programa de reducción de datos astronómicos [IRAF 2010] para, en primer lugar, muestrear dichos espectros nuevamente a la dispersión de 5 Å, conservando el flujo en el proceso, puesto que los espectros generados artificialmente se habían obtenido con una resolución inicial mucho mayor a cualquiera de las contempladas en los distintos catálogos de referencia (0.1 Å). A continuación se midió la resolución característica de cada conjunto de espectros de catálogo mediante el ajuste a un perfil gaussiano de aquellas líneas metálicas no afectadas por otro tipo de ensanchamiento, determinándose de este modo la anchura de la gaussiana resultante que refleja el perfil instrumental durante las observaciones (anchura de la rendija del espectrógrafo). Para que la morfología de las líneas de los espectros sintéticos fuese similar a las de los espectros de estrellas del catálogo, se llevó a cabo la convolución de cada espectro sintético generado con dicho perfil gaussiano calculado. Como resultado de todos estos procesos de ajuste se construyó un conjunto final formado por 352 espectros sintéticos que cubren el rango comprendido entre 3510 Å a 6800 Å con una dispersión de 5 Å, con los que se procedió a realizar el entrenamiento de las arquitecturas neuronales que se exponen a continuación.

6.3.2 Diseño e implementación de las redes neuronales

Las redes de neuronas artificiales que se han empleado durante esta experimentación se basan en el modelo de aprendizaje supervisado y en la retropropagación de los errores a través del algoritmo *backpropagation* [Chauvin 1995]. Esta arquitectura neuronal específica se ha seleccionado principalmente porque suele dar lugar a implementaciones fáciles, sencillas y muy eficientes, tal y como se ha comprobado durante el estudio de las diferentes configuraciones neuronales llevado a cabo en los capítulos precedentes dedicados a la clasificación espectral automática. Además, es también este el tipo de red que se ha aplicado con más éxito y frecuencia en contextos similares de parametrización estelar [Snider 2001] [Willemsen 2005]. En concreto, después de evaluar la capacidad de resolución de diversas variantes de este algoritmo de aprendizaje (*vanilla backpropagation*, *backpropagation momentum*, *batch backpropagation*, *quickpropagation*, etc.), se optó por implementar las redes neuronales de parametrización mediante la versión mejorada del mismo, *backpropagation momentum* [Rumelhart 1986], en la que se incorpora un término (momento) que indica el porcentaje de la variación anterior de los pesos que se utiliza de nuevo en cada ciclo de ejecución para el cómputo de los nuevos cambios (véase sección 4.5.2 para un desarrollo teórico completo de este algoritmo de aprendizaje).

	Capa de entrada	Capas ocultas	Capa de salida	Rendimiento
Red T_{eff}	659 valores de flujo	5x5	(log T_{eff}-3)/2	80%
Red T_{eff}	659 valores de flujo	**10x5x3**	(log T_{eff}-3)/2	**88%**
Red T_{eff}	659 valores de flujo	100x50x10x3	(log T_{eff}-3)/2	82%
Red T_{eff}	25 índices espectrales	10x5x3	(log T_{eff}-3)/2	61%
Red T_{eff}	25 índices espectrales	100x50x10x3	(log T_{eff}-3)/2	54%
Red log g	659 valores de flujo	**20x20**	log g	**58**%
Red log g	659 valores de flujo	10x5x3	log g	55%
Red log g	659 valores de flujo	100x50x10x3	log g	52%
Red log g	25 índices espectrales	20x20	log g	50%
Red log g	25 índices espectrales	100x50x10x3	log g	47%

Tabla 72. Diferentes topologías de las redes *backpropagation momentum* consideradas para la parametrización de la temperatura efectiva (T_{eff}) y de la gravedad (log g)

En la tabla 72 se incluyen las diferentes topologías consideradas para el citado algoritmo de aprendizaje en la fase de diseño de las redes de temperatura y gravedad efectivas. Como puede apreciarse, los patrones de entrada de las redes se construyeron tanto con los 659 valores de flujo energético existentes entre 3510 Å y 6800 Å, como con 25 los índices resumen de los espectros que se refieren a características tales como intensidad de líneas de absorción o profundidad de bandas moleculares (v. tab. 4). La salida de las redes será en unos casos una función continua de la temperatura efectiva de la forma T_{red} = (log T_{eff} - 3)/2, y en otros de la gravedad, G_{red} = log g.

Los patrones del conjunto de entrenamiento y validación (cruzada cada 10 ciclos de aprendizaje) están compuestos por los 352 espectros sintéticos generados a partir del programa de síntesis espectral SPECTRUM. Tal y como se ha indicado, previamente a la fase de aprendizaje estos espectros se corrigieron y adaptaron al formato de los espectros reales, contrastándose asimismo mediante técnicas de *clustering* estadístico para verificar la conveniencia y calidad del conjunto de datos y descartar aquellos espectros que difieren significativamente del resto, con el objetivo último de evitar dispersiones en la muestra total y garantizar la homogeneidad y coherencia de la misma.

Los espectros empleados para la evaluación del rendimiento de las redes corresponden a aquellos de los catálogos de referencia [Silva 1992] [Pickles 1998] y de la librería digital NOAO-INDO-US [Valdes 2004] que se encuentran en el rango considerado de

temperaturas y gravedades efectivas ($4000 \leq T_{eff} \leq 20000$, $0.5 \leq \log g \leq 5.0$); la librería de espectros de Jacoby, tercer catálogo de referencia principal [Jacoby 1984], no se pudo aplicar en este caso para la evaluación de las redes debido a que no incluye valores para los parámetros espectrales que se pretenden determinar en esta implementación (T_{eff}, log g), puesto que únicamente recoge el tipo espectral y la clase de luminosidad de los espectros que relaciona. En la tabla 73 se refleja la distribución en rangos de temperatura de los conjuntos espectrales empleados durante las fases de aprendizaje y evaluación de las redes diseñadas; en el conjunto de prueba se han resaltado en diferentes colores los espectros según su fuente de procedencia (verde para el catálogo de Silva, rojo para el de Pickles y azul para el NOAO-INDO-US).

T_{eff}	Conjunto Entrenamiento	Conjunto Validación	Conjunto Prueba
4000-6000 K	56	24	267 (7/36/224)
6000-8000 K	56	24	72 (5/19/48)
8000-10000 K	44	19	18 (2/10/6)
10000-20000 K	90	39	28 (3/14/11)
TOTAL	246	106	385 (17/79/289)

Tabla 73. Composición de los conjuntos espectrales para las redes de parametrización automática desglosados por rango de temperaturas efectivas

Durante la experimentación inicial se encontró que la mejor alternativa neuronal para determinar la temperatura efectiva se corresponde con una red *backpropagation momentum* de topología 659x10x5x3x1, es decir, una red con 659 valores de flujo en la capa de entrada, 3 capas ocultas con 10, 5 y 3 neuronas, respectivamente, y una capa de salida que proporciona el valor de la temperatura en escala logarítmica.

En la fase de aprendizaje de esta red óptima para estimar la temperatura efectiva se consideraron supuestos de entrenamiento basados en 3000, 6000, 9000 y 12000 iteraciones, comprobándose que a mayor número de presentaciones del conjunto de espectros sintéticos mayor tasa de acierto, si bien al mismo tiempo se verificó que a partir de 10000 ciclos aparece el fenómeno de sobreentrenamiento, observado y descrito en secciones previas para las redes de clasificación espectral; finalmente fue la opción de entrenamiento con 9000 ciclos de la que demostró ser la más eficiente. A partir de esta configuración óptima se han añadido 1600, 2000, 2600, 5600, 8600, 21600 y 41600 iteraciones pero afectando únicamente al grupo de espectros sintéticos con temperaturas comprendidas entre 4000 y 5000 kelvin o entre 7000 K y 20000 K, puesto que fue en estos rangos donde se produjeron las tasas más altas de error en la calibración inicial; los mejores resultados se obtuvieron para 5600 ciclos más, mejorando la estimación de la temperatura efectiva en los dos intervalos mencionados, aunque el número de errores únicamente se redujo en el primero de

ellos (4000-5000 K). La evolución del entrenamiento a partir de este punto, basado en la presentación de patrones únicamente para el intervalo de temperaturas peor calibrado (7000-20000 K), puso de manifiesto que a medida que se aumenta el número de ciclos los resultados tienden a mejorar ligeramente para este rango de temperaturas pero empeoran significativamente para el resto. Así, finalmente se optó por una solución de compromiso capaz de minimizar los errores en todos los rangos de temperaturas, la cual se basa en una arquitectura neuronal 659x10x5x3x1 entrenada mediante el algoritmo de aprendizaje *back-propagation momentum* con 18000 ciclos de presentación aleatoria de los patrones de entrada, formados estos por los valores de flujo energético correspondientes a la región espectral situada entre 3510 Å y 6800 Å.

En cuanto a la gravedad efectiva, tal y como se observa en la gráfica de topologías evaluadas, ninguna de las redes diseñadas consiguió converger apropiadamente y alcanzar un rendimiento digno de consideración, si bien la arquitectura neuronal con una tasa de error menos elevada fue la formada por 659 valores de flujo en la capa de entrada y dos capas ocultas de 20 neuronas cada una.

En el caso de la parametrización espectral en temperatura y gravedad, a diferencia de lo que ocurría en el supuesto de clasificación espectral automática tratado en los capítulos precedentes, las alternativas basadas en patrones de entrada formados por índices espectrales han mostrado, sin excepción, un comportamiento mucho menos adecuado que las que emplean el espectro completo (con errores medios de entrenamiento y validación significativamente superiores), lo cual en cierto modo puede ser atribuible a la procedencia de los índices empleados, pues estos se seleccionaron a partir de los criterios de clasificación más relevantes que utilizan los expertos para llevar a cabo las clasificaciones en tipo espectral y luminosidad y, tal y como claramente indican los resultados obtenidos, no parecen ser directamente extrapolables a la determinación específica de la temperatura y de la gravedad efectivas.

El diseño, implementación y validación de las arquitecturas neuronales finalmente seleccionadas se llevó a cabo del mismo modo que en las redes de clasificación estelar, es decir, mediante el simulador SNNS v4.3 [SNNS 2010a] y empleando nuevamente la utilidad *snns2c* para transformar directamente las configuraciones óptimas en código C, de manera que estas puedan integrarse de forma fácil e inmediata en el sistema híbrido de tratamiento de espectros estelares desarrollado.

6.4 Análisis de resultados. Discusión

En esta sección se procederá a realizar la evaluación del rendimiento de las configuraciones neuronales de parametrización estelar óptimas (topología 659x10x5x3x1 para T_{eff} y 659x20x20x1 para log g) sobre un conjunto de 385 espectros ópticos, los cuales se corresponden con aquellos de los catálogos de referencia principales [Silva 1992] [Pickles 1998] y de la librería de espectros de evaluación NOAO-INDO-US [Valdes 2004] que se encuentran dentro del rango de temperaturas y gravedades que cubren los espectros sintéticos con los que se ha llevado a cabo el entrenamiento ($4000 \leq T_{eff} \leq 20000$, $0.5 \leq \log g \leq 5.0$), cuya distribución es la que se muestra en la tabla 73. Al igual que en los desarrollos previos, la estrategia aplicada para estudiar el comportamiento de los modelos neuronales que se han llevado a la implementación se basa en la validación empírica por discrepancia, esto es, las estimaciones de la temperatura y gravedad efectivas obtenidas como salida de las redes se comparan directamente con los valores de las mismas proporcionados por los propios catálogos espectrales de referencia; como ya se ha indicado, los espectros del catálogo de Jacoby se han excluido del conjunto de evaluación debido a que esta base de datos espectrales no incluye medidas propias para los parámetros atmosféricos que se pretende determinar [Jacoby 1984].

El catálogo de Silva está compuesto por 72 espectros promediados que cubren el rango de 3510 Å a 8930 Å, obtenidos con una resolución espectral de 11 Å FWHM (*Full Width at Half Maximum*) y una dispersión de 5 Å. Cada espectro es una combinación de un número variable de fuentes que los propios autores observaron entre diciembre de 1988 y mayo de 1989 [Silva 1992], corregidos previamente de extinción interestelar. Debido a que inicialmente las redes neuronales consideradas en esta experimentación se diseñaron para estimar temperaturas efectivas superiores a 20000 K, únicamente fue posible seleccionar 17 objetos de este catálogo dentro de los límites establecidos de los parámetros físicos estudiados, siendo prácticamente todos ellos de metalicidad solar.

La librería digital de Pickles, concebida con el propósito inicial de contribuir al desarrollo de modelos de síntesis de poblaciones en galaxias, se compone de 131 espectros calibrados en flujo que cubren todos los tipos espectrales y clases de luminosidad [Pickles 1998]. El rango espectral incluido es muy amplio, extendiéndose desde los 1150 Å hasta los 10600 Å, llegando incluso hasta 25000 Å para los tipos tardíos, con una frecuencia de muestreo de 5 Å y una resolución de 10 Å. Prácticamente todos los espectros catalogados presentan metalicidad solar, aunque el catálogo también recoge objetos pobres y ricos en metales. Como en el caso anterior, nuevamente cada espectro es el resultado de promediar los flujos de diferentes objetos del mismo tipo espectral, con el fin de suavizar las diferencias y establecer un modelo para cada tipo. Para formar parte del conjunto de evaluación de

las redes neuronales de estimación automática de parámetros físicos, de este catálogo se han seleccionado un total de 79 espectros correspondientes a niveles de metalicidad de tipo solar con temperaturas y gravedades efectivas dentro de los rangos permitidos.

La librería NOAO-INDO-US [Valdes 2004] cuenta con un total de 1273 espectros estelares reales (no promediados) observados con el telescopio de 0.9 m del Observatorio KPNO (*Kitt Peak National Observatory*). Los espectros se obtuvieron con una dispersión de 0.44 Å/píxel y una resolución de 1 Å FWHM, cubriendo el rango espectral que va desde 3460 Å hasta 9464 Å. Para la evaluación de los modelos neuronales de parametrización estelar se seleccionaron 289 objetos no corregidos de extinción interestelar, eliminándose de nuevo del conjunto inicial de espectros disponibles en esta base de datos todos aquellos que quedasen fuera del rango de temperaturas y gravedades considerado ($4000 \leq T_{eff} \leq 20000$, $0.5 \leq \log g \leq 5.0$) y/o presentasen huecos (*gaps*).

Los detalles específicos (estrella de referencia, parámetros físicos, clasificación, etc.) sobre los objetos que componen los conjuntos de evaluación seleccionados de las distintas librerías, así como la distribución en temperaturas y gravedades efectivas de cada uno de ellos se incluye en forma de tablas en el anexo II.

T_{eff}	Número de espectros	Tasa de acierto	Error medio
4000-6000 K	267 (7/36/224)	80.89% (100%/97.22%/76.57%)	±280K (250/230/380)
6000-8000 K	72 (5/19/48)	95.83% (80%/89.47%/100%)	±140K (150/180/100)
8000-10000 K	18 (2/10/6)	72.22% (100%/60%/83%)	±300K (250/360/320)
10000-20000 K	28 (3/14/11)	71.42% (33%/85.75%/63.63%)	±550K (500/580/600)
TOTAL	**385 (17/79/289)**	**82.59% (82.35%/88.60%/80.96%)**	**±340K (360/300/350)**

Tabla 74. Resultados obtenidos con las redes neuronales de parametrización estelar automática sobre los diferentes conjuntos de evaluación [Silva 1992] [Pickles 1998] [Valdes 2004], desglosados por rango de temperaturas efectivas

En las figuras 132 y 133 se recoge una gráfica comparativa de los resultados que se obtuvieron con las redes neuronales en la determinación de la temperatura y gravedad efectivas, respectivamente, desglosados por la fuente de procedencia de los espectros del conjunto de evaluación. Como puede apreciarse, la red de neuronas de topología óptima es capaz de obtener una estimación adecuada de la temperatura efectiva para más del 80% de

los espectros del conjunto de evaluación, con una desviación máxima del 10% de la temperatura reflejada en el catálogo y un error medio de ±340 K; para la gravedad efectiva, en cambio, el rendimiento de la red óptima es más modesto (tasa de éxito en torno al 60% con un error medio de 0.14), lo cual parece señalar que en la estimación de este parámetro físico podría ser beneficioso ampliar el conjunto de entrenamiento para propiciar una mayor generalización de los modelos neuronales.

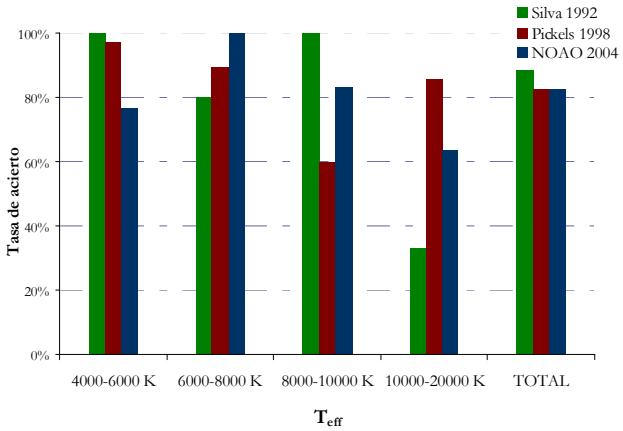


Figura 132. Rendimiento de la red óptima de estimación de la temperatura efectiva

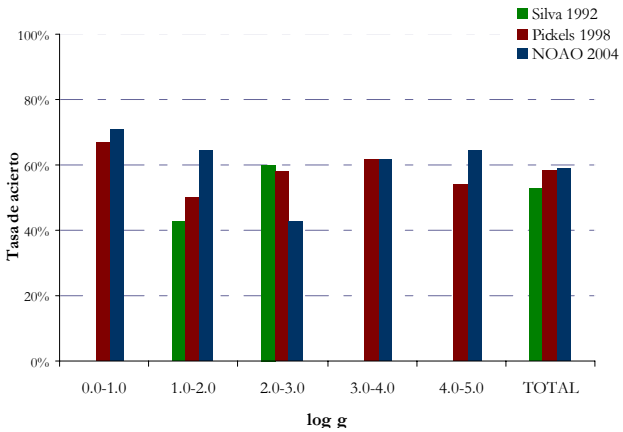


Figura 133. Rendimiento de la red óptima de estimación de la gravedad efectiva

En la tabla 74 se resumen las tasas de acierto y errores medios obtenidos en la calibración en función del rango de temperaturas efectivas de los datos de entrada. Asimismo, en la figura 134 se muestra el resultado de la parametrización específica en temperatura efectiva llevada a cabo sobre los 3 conjuntos espectrales de evaluación junto con los errores ocurridos en la estimación de la misma (de nuevo se han empleado diferentes colores según la fuente de procedencia de los espectros del conjunto de evaluación, esto es, verde para el catálogo de Silva, rojo para el de Pickles y azul para la base de datos NOAO). Tal como se aprecia en las figuras y como verifican los porcentajes de éxito recogidos en la tabla, en

general para las estrellas más frías de la muestra, con temperaturas efectivas entre 4000 K y 7500 K, se obtienen estimaciones muy precisas, con errores medios de aproximadamente 200 kelvin. El hecho de que para estrellas más tempranas (calientes) se obtengan mayores errores es atribuible, por un lado a que se dispone de un número menor de espectros sintéticos en el rango de temperaturas implicado (de 8000 K a 20000 K) y, por otro, a que las atmósferas de las estrellas más tempranas de la muestra son más susceptibles de verse afectadas por efectos de no equilibrio termodinámico local (NLTE), de modo que los espectros sintéticos no serían en estos casos modelos suficientemente precisos para caracterizarlas.

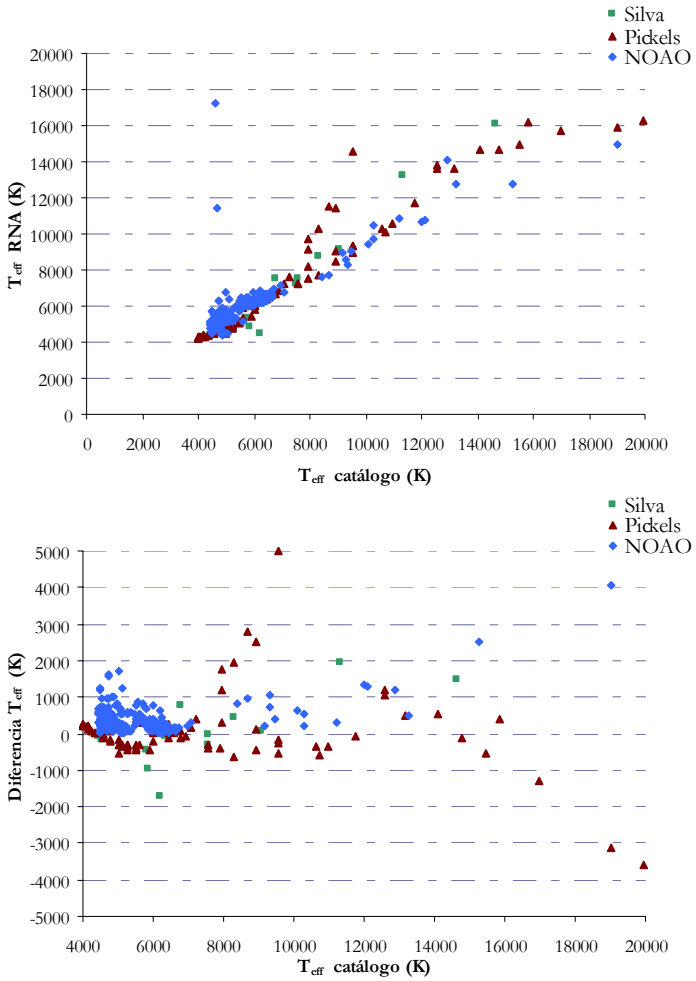


Figura 134. Resultados de la parametrización de temperatura y gráfica de errores del conjunto de espectros de evaluación

El análisis minucioso del comportamiento y resultados de las redes neuronales de parametrización puso de relieve que todas las arquitecturas implementadas presentaban un ajuste más fino y, por tanto un mejor funcionamiento, para los espectros situados en el rango de temperaturas efectivas entre 4000 K y 8000 K. Por ello, se decidió dividir el conjunto de entrenamiento inicial en dos rangos (4000-8000 K y 8000-20000 K) con el objetivo de repetir de nuevo la fase de aprendizaje para la configuración óptima pero ajustando

esta vez específicamente los parámetros configurables del algoritmo *backpropagation* (número de ciclos, coeficiente de aprendizaje, término momento, etc.) para cada subconjunto de datos. Esta alternativa de entrenamiento proporcionó en general mejores resultados, consiguiendo un aumento de hasta el 5% en la precisión de las estimaciones para los espectros del conjunto de evaluación con temperaturas efectivas superiores a 8000 K, rango en el cual inicialmente la red había obtenido una aproximación peor. Otra estrategia de perfeccionamiento que se contempló en este desarrollo, consistió en reducir el número de nodos de entrada de la red óptima de estimación de la temperatura efectiva (valores de flujo del espectro) mediante el análisis de los pesos de la capa de salida para cada subconjunto de entrenamiento o intervalo de temperaturas, lo cual condujo a diseñar nuevas redes de neuronas que convergieron más rápidamente logrando asimismo un rendimiento mayor, con un incremento de las tasas de acierto de hasta un 2% en los rangos más problemáticos (T_{eff}>8000 K).

Las diferentes alternativas de parametrización estelar descritas en esta sección se integraron en el sistema híbrido de tratamiento de espectros estelares mediante la transformación a código C++ de las arquitecturas neuronales óptimas (con la herramienta *snns2c* que proporciona el propio simulador en el que se ha sustentado el desarrollo), incluyéndose estas en forma de menús en la interfaz de usuario final. En la figura 135 se muestran las diferentes opciones de determinación de los parámetros físicos de las estrellas que se han trasladado finalmente a la implementación.

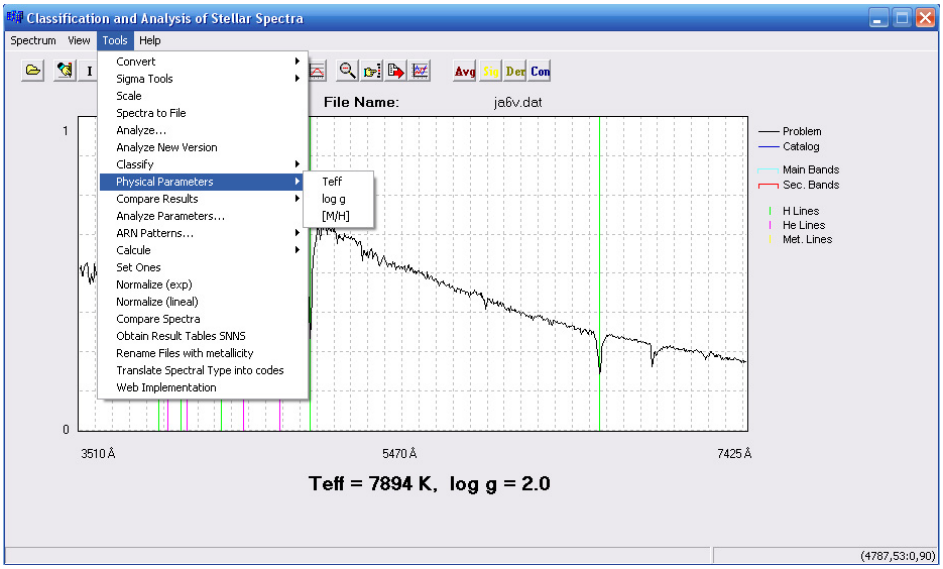


Figura 135. Implementación en C++ de los modelos neuronales para la parametrización espectral en temperatura y gravedad efectivas

Los dos enfoques distintos de la caracterización de las estrellas a partir de su espectro óptico abordados en este capítulo y en los precedentes, esto es, la automatización de la

clasificación MK y la extracción no supervisada de algunos de los parámetros físicos más relevantes, permitiría ahora unir ambas perspectivas para proponer una calibración propia del sistema MK, al menos entre temperatura efectiva y tipo espectral, dado que en la otra dimensión (luminosidad) los resultados no han sido tan satisfactorios. Así en la tabla 75 y, de forma esquemática, en la figura 136 se incluye la calibración obtenida del tipo espectral MK con respecto a la temperatura efectiva después de clasificar automáticamente con el sistema híbrido final los 289 espectros de la base de datos espectral NOAO [Valdes 2004] que se han seleccionado como conjunto de evaluación de las redes de parametrización expuestas en esta sección.

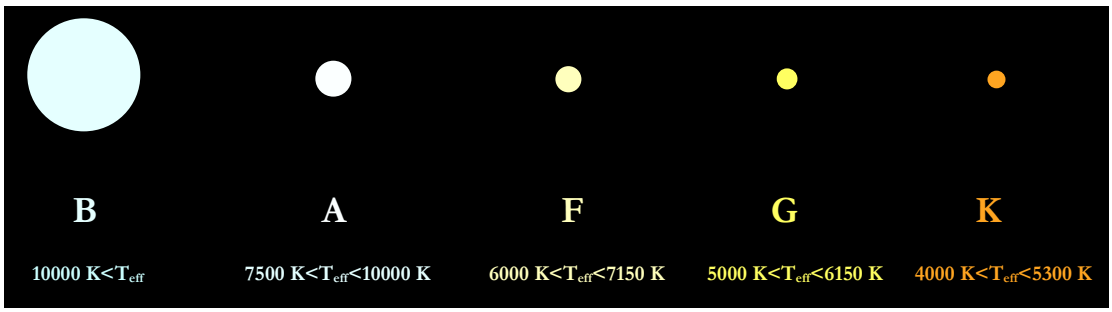


Figura 136. Correspondencia entre tipos espectrales y T_{eff} obtenida clasificando 289 espectros de la librería NOAO con el sistema híbrido y estimando la temperatura mediante la red neuronal propuesta

Los rangos de temperatura efectiva obtenidos para cada tipo espectral son muy similares a los recogidos en la calibración original del sistema MK (v. sec. 2.2), si bien en este caso se han eliminado del proceso las estrellas muy calientes (tipo O) y muy frías (tipo M) al no incluirse estas en los modelos atmosféricos ($4000 \leq T_{eff} \leq 20000$) con los que se generó la batería de espectros sintéticos en la que se basan las redes neuronales de parametrización automática. Como puede observarse, el solapamiento de temperaturas se produciría únicamente en los subtipos limítrofes del tipo G (F9-G0 y G9-K0), apareciendo los demás tipos correctamente delimitados. Las correspondencias específicas entre tipos espectrales y temperaturas efectivas para las 289 estrellas seleccionadas se incluyen en el anexo II.

	T_{eff} mínima	T_{eff} máxima
O	20000 K	---
B	10684 K	19040 K
A	7601 K	10080 K
F	5981 K	7050 K
G	4989 K	6140 K
K	3960 K	5260 K
M		3960 K
TOTAL	20000 K	---

Tabla 75. Calibración propia entre tipo espectral MK y temperatura efectiva

7 STARMIND: SISTEMA DE INFORMACIÓN DE ESPECTROS ESTELARES

Data is not information, information is not knowledge, knowledge is not understanding, understanding is not wisdom

Clifford Stoll

En cualquier proyecto de investigación astronómica contemporáneo que suponga la recopilación de datos a gran escala, como por ejemplo la misión espacial GAIA [GAIA 2010], para efectuar una explotación automática racional y completa de los mismos es fundamental articular su almacenamiento y organización apropiada a través de una base de datos especializada que incorpore facilidades de uso y acceso [Allende 2004]. Así, la justificación principal para el desarrollo de STARMIND fue la necesidad de ofrecer una herramienta que permita almacenar, gestionar y clasificar grandes volúmenes de información procedentes de observatorios astronómicos y/o espaciales [STARMIND 2010].

En los capítulos precedentes se han expuesto con detalle los distintos enfoques que se proponen en este trabajo de tesis doctoral para sistematizar el tratamiento de espectros estelares dentro del rango de luz visible, los cuales finalmente se fusionaron en un único sistema híbrido en el que se integran y cooperan las diferentes técnicas computacionales consideradas (algoritmos de procesado de señales, sistemas basados en el conocimiento que implementan lógica difusa, redes de neuronas artificiales, análisis *cluster* y redes funcionales). Tal sistema debería disponer de una interfaz ergonómica y sencilla que permita a los futuros usuarios obtener de forma rápida y cómoda la clasificación en el sistema MK y/o la parametrización física de sus espectros.

Aunque la primera aproximación para el desarrollo del sistema de información mencionado se efectuó a través de una aplicación *stand-alone* implementada en C++ para el sistema operativo Windows™, finalmente se han portado los diferentes métodos de clasificación a una plataforma web desarrollada en tecnología Java que proporciona una forma más rápida, sencilla y eficiente de gestionar toda la información que se precise. De este mo-

do, el sistema STARMIND estructurará de forma centralizada mediante una base de datos relacional toda la información aportada por los usuarios, administrándola a través de la citada aplicación web que ofrece al mismo tiempo herramientas gráficas para el análisis de los espectros de luz y donde los diferentes mecanismos de clasificación y parametrización se ejecutarán por medio de un servicio web independiente. En las siguientes secciones se recogen los detalles de estas dos partes bien diferenciadas (aplicación y servicio web) que constituyen, junto a la base de datos estelares formalizada, el sistema de información que se propone en este capítulo.

7.1 Organización de la información: base de datos astronómica

El almacenamiento y gestión de la información en este desarrollo se ha llevado a cabo mediante una base de datos relacional que mantiene y estructura la información disponible sobre las estrellas en un soporte físico de una manera segura, efectiva y organizada, permitiendo de este modo el acceso a la misma de forma rápida, ordenada y concisa. Esta organización de la información supone, al mismo tiempo, un método sencillo y eficiente de contrastar los resultados de los análisis, clasificaciones y parametrizaciones estelares efectuadas por los diferentes expertos y/o herramientas automáticas.

En la base de datos se han de volcar todas las entidades y relaciones obtenidas en las fases previas de análisis y diseño (en este caso serán espectros, fotometrías, observatorios, catálogos, etcétera), por lo que es preciso realizar un correcto modelado conceptual de la misma a fin de que refleje apropiadamente los conceptos del mundo real que se requieren para el procesamiento. Puesto que a la hora de desarrollar sistemas de análisis de datos basados en conocimiento como el que nos ocupa cada vez se busca más combinar la información de los históricos, esto es, la integración a través de bases de datos relacionales de los resultados de otros análisis, los parámetros resultantes del pre-procesado digital de las series temporales, resultados de la correlación de distintos registros, análisis de sensibilidad de parámetros, etc. es fundamental que la representación del conocimiento (objetos, variables, reglas) y el modelo relacional asociado a la base de datos sean lo más equivalentes posible.

El modelo relacional ofrece diferentes herramientas para reflejar la información extraída anteriormente del dominio de aplicación a la vez que asegura un almacenamiento eficiente y no redundante de la misma, permitiendo asimismo una cómoda recuperación de los datos en base a distintos criterios de búsqueda. En la figura 137 se incluye una parte del diagrama de clases, en concreto la correspondiente a la clasificación, resultante del análisis del contexto del problema de tratamiento de espectros estelares; en el anexo I se recoge en forma de distintos diagramas el modelo conceptual completo en el que se basó la creación de la base de datos astronómica.

El desarrollo la base de datos relacional para STARMIND se ha realizado mediante *PostgreSQL* (v8.3) bajo Linux [Douglas 2005]. Este gestor de bases de datos proporciona unas excelentes prestaciones en relación a los requisitos de máquina que exige (puede funcionar adecuadamente en equipos con 64 MB de RAM), además de disponer de conectividad con muchos lenguajes de programación como Perl, PHP, Java, C++, etc. *PostgreSQL* cubre sin dificultades las necesidades de la aplicación requerida, pues soporta prácticamen-

te- todos los constructores del lenguaje SQL (*Standard Query Lan*guage) tales como funciones de agregación, consultas anidadas, transacciones de distinta granularidad, integridad referencial, definición de tipos específicos, creación de reglas, procedimientos almacenados y restricciones para mantener en todo momento la integridad de la información, creación de índices para un acceso más rápido y óptimo a la información almacenada, creación de vistas para proporcionar diferentes modos de consulta, etc.

La base de datos astronómica así diseñada e implementada dispondrá de un contenido con un carácter altamente dinámico, ya que se irá enriqueciendo tanto con los nuevos objetos (estrellas, espectros, catálogos completos, etc.) que los distintos usuarios depositen como con los resultados de las clasificaciones que se efectúen durante su fase de explotación. El acceso público a la información almacenada en la base de datos diseñada se efectuará en todo momento a través de la interfaz web, cuyos detalles de diseño y funcionalidades se describen en el epígrafe siguiente.

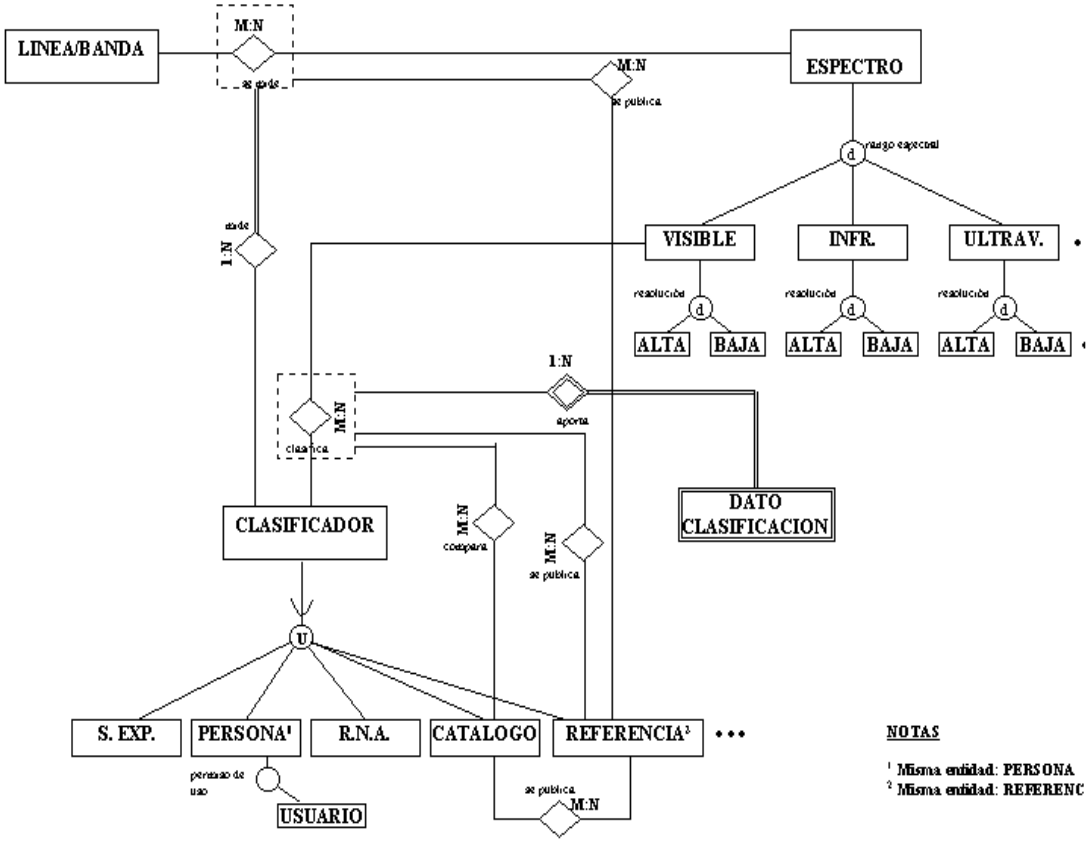


Figura 137. Diagrama Entidad/Relación parcial de la base de datos astronómica diseñada

7.2 Acceso a la información: aplicación web

La seguridad y robustez de las tecnologías que dan soporte a las aplicaciones web actuales, así como la extraordinaria evolución experimentada por Internet en los últimos años condujo a considerar este planteamiento como el más adecuado para la implantación final del sistema de tratamiento de espectros estelares. La gestión de la información a través de una aplicación de estas características se espera que aporte al usuario final del sistema de información, entre otras, las siguientes ventajas:

- Ahorro de tiempo, al posibilitarse la realización de tareas de procesado espectral de forma sencilla sin necesidad de descargar ni instalar ningún programa adicional.
- Alta compatibilidad, pues la aplicación es multiplataforma y para interactuar con ella será suficiente cualquier navegador web actualizado.
- Ahorro de espacio, puesto que al no precisarse la instalación de ningún software adicional, excepto el ya mencionado navegador web estándar, no se ocupará espacio en el equipo del usuario ni se crearán incompatibilidades con otros programas.
- Alta portabilidad, al ser la aplicación totalmente independiente del equipo donde se utiliza, siendo el único requisito indispensable para su ejecución el disponer de acceso a Internet.
- Actualizaciones inmediatas, ya que se alojará en un servidor de aplicaciones gestionado por el equipo de desarrollo, de forma que se mantendrá disponible siempre la versión más actualizada del producto.

En definitiva, el acceso a las funcionalidades del sistema de tratamiento de espectros estelares a través de una aplicación web supondrá disponer permanentemente de una interfaz sencilla, cómoda, altamente compatible, portable y actualizada para la base de datos dinámica que integra y estructura toda la información disponible, conteniendo en todo momento un conjunto uniforme de estrellas estándares de clasificación.

Si bien existen en la actualidad diversas alternativas para emprender el diseño de aplicaciones web (J2EE, .Net, LAMP, Ruby on Rails, etcétera), para el sistema de información de espectros estelares se ha seleccionado J2EE como tecnología principal [Alur 2003], sustentando el desarrollo de la aplicación en soluciones bien definidas y contrastadas como el patrón *Model-View-Controller* (MVC) [Gamma 1996]. J2EE es conjunto de especificaciones de APIs (*Application Programming Interface*) Java para la construcción de aplicaciones empresariales; se trata además de un software libre, con gran soporte de la comunidad de desarrolladores, en el cual se cuenta con experiencia suficiente adquirida por nuestro grupo de

investigación en diferentes proyectos previos. La principal ventaja que proporciona esta tecnología es que las aplicaciones finales no dependen de la implementación concreta seleccionada.

Metodológicamente el desarrollo de la aplicación web de análisis espectral se ha basado, al igual que el de su homóloga para Windows™, en la técnica de modelado y diseño orientada a objetos OMT [Rumbaugh 1991], empleando específicamente el lenguaje UML [Rumbaugh 2004] [Dennis 2009] y el mencionado patrón de diseño *Model-View-Controller* [Shalloway 2004], el cual se caracteriza por separar los datos de la aplicación de la interfaz de usuario y de la lógica de control, en los tres componentes que se muestran en la figura 138; esto es, el modelo que representa la lógica de negocio del dominio de la aplicación, la vista o interfaz de usuario y el controlador o capa encargada de gestionar los eventos necesarios para la interacción entre los dos anteriores. Los modelos, diagramas específicos, casos de uso, etc., fruto de la aplicación de esta metodología se relacionan en el anexo I.

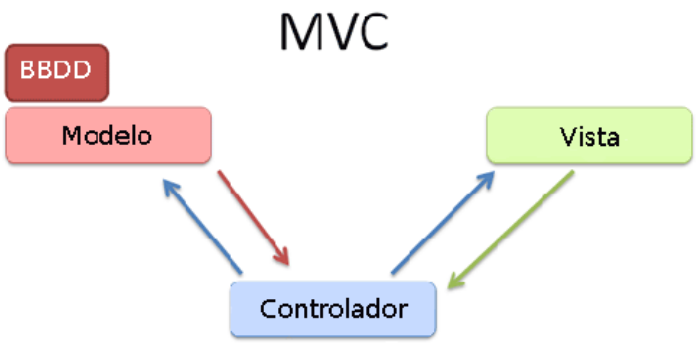


Figura 138. Componentes del patrón de diseño *Model-View-Controller* (MVC) [Gamma 1996]

El ciclo de vida de desarrollo en cascada se fundamentó en las fases clásicas de análisis de requisitos, diseño del sistema, diseño del programa, codificación, validación y verificación, implantación (fase actual) y mantenimiento. El sistema se concibió en varios módulos funcionales independientes, entre los que destacan los encargados de la gestión de usuarios, el análisis y visualización, las consultas y la clasificación/parametrización estelar.

El módulo de de gestión usuarios es el responsable de administrar la información relativa a los usuarios de la aplicación, asignándoles diferentes permisos en función de los cuales estos podrán acceder a distintas partes del sistema. Para posibilitar esta gestión se han definido cuatro niveles de interactividad que quedan especificados por los siguientes roles:

- ROLE_ANONYMOUS: usuarios que no necesitan estar registrados en la aplicación para poder tener acceso, restringido obviamente, a la misma; pueden realizar búsquedas, consultar estadísticas y acceder al módulo de visualización de espectros, aunque únicamente sobre los datos etiquetados como de uso público por el propietario.

- ROLE_USER: usuarios comunes registrados que podrán tanto modificar su perfil como realizar búsquedas, acceder al módulo de visualización de espectros y consultar estadísticas de datos propios y públicos; adicionalmente, los usuarios a los que se les asigne este rol podrán también registrar nuevos objetos en la aplicación.

- ROLE_ADMIN: usuarios administradores que podrán realizar todas las operaciones comunes (editar su perfil, realizar búsquedas, consultar estadísticas, etc.) sobre datos propios y públicos, teniendo acceso además a la gestión de usuarios para modificar la asignación de roles de los mismos.

- ROLE_SUPER: superusuarios, es decir, aquellos que tienen los mismos privilegios que un usuario del nivel anterior (administrador) pero cuyos permisos no pueden modificarse desde la aplicación web.

En la figura 139 se muestra la interfaz de gestión de usuarios que se ha incluido en el sistema de información y tratamiento de espectros estelares STARMIND.

Figura 139. Interfaz de gestión de usuarios de STARMIND

El módulo de visualización permite mostrar los espectros estelares resaltando sus características morfológicas más relevantes en distintos colores (líneas de absorción y emisión, bandas moleculares, etc.), realizar diferentes análisis sobre ellos (estadísticos y morfológicos) e incluso visualizar varios espectros al mismo tiempo con el fin de comprobar sus coincidencias, a semejanza del procedimiento que siguen los expertos en el proceso manual de análisis y clasificación estelar cuando superponen sus espectros problema con las plantillas de estrellas estándares.

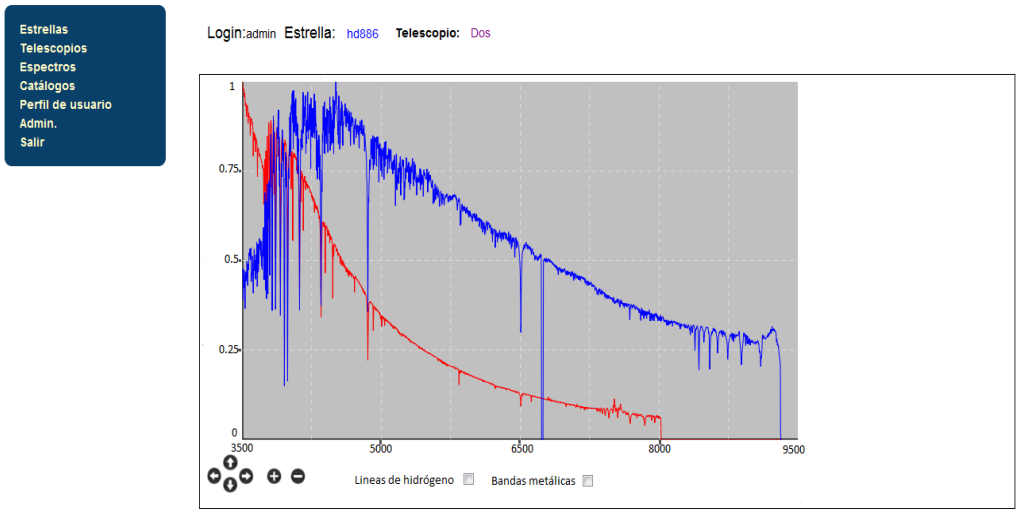


Figura 140. Funcionalidad de comparación entre espectros incluida en el módulo de visualización de la aplicación STARMIND

El desarrollo del módulo de visualización se ha llevado a cabo mediante la especificación SVG (*Scalable Vector Graphics*) para describir gráficos vectoriales utilizando XML [Frost 2008]; esta opción se seleccionó principalmente debido a su compatibilidad con los principales navegadores (es un estándar), su posibilidad de integración con javascript y la capacidad de gestión de eventos que proporciona Para la creación de los ficheros SVG se ha implementado una librería específica en lenguaje Java en la que se incluyen operaciones para la definición de componentes. De esta manera desde STARMIND se accede a la base de datos relacional para obtener los espectros que es preciso visualizar, siendo la propia aplicación web la responsable de generar su representación gráfica; a este efecto, es imprescindible que esta incluya todo el comportamiento dinámico necesario para efectuar las operaciones que ofrece este módulo, entre las que cabe destacar la representación de uno o varios espectros, la comparación de los espectros con plantillas de estrellas estándares MK (tal y como se muestra en la figura 140), el escalado de los mismos (*zoom in*, *zoom out*) para permitir el estudio detallado de sus peculiaridades, la posibilidad de realizar traslaciones tanto en el eje X como en el Y, la obtención de las coordenadas en cualquier punto del

espacio y la superposición de características morfológicas típicas tales como las líneas de absorción de la serie de Balmer o las bandas moleculares de óxido de titanio.

En el módulo de consultas se incluyen aquellas operaciones que permiten recuperar toda la información disponible en la base de datos sobre los diferentes catálogos, estrellas, espectros, instrumentación, etc., presentándola al usuario en un formato que posibilite su fácil interpretación.

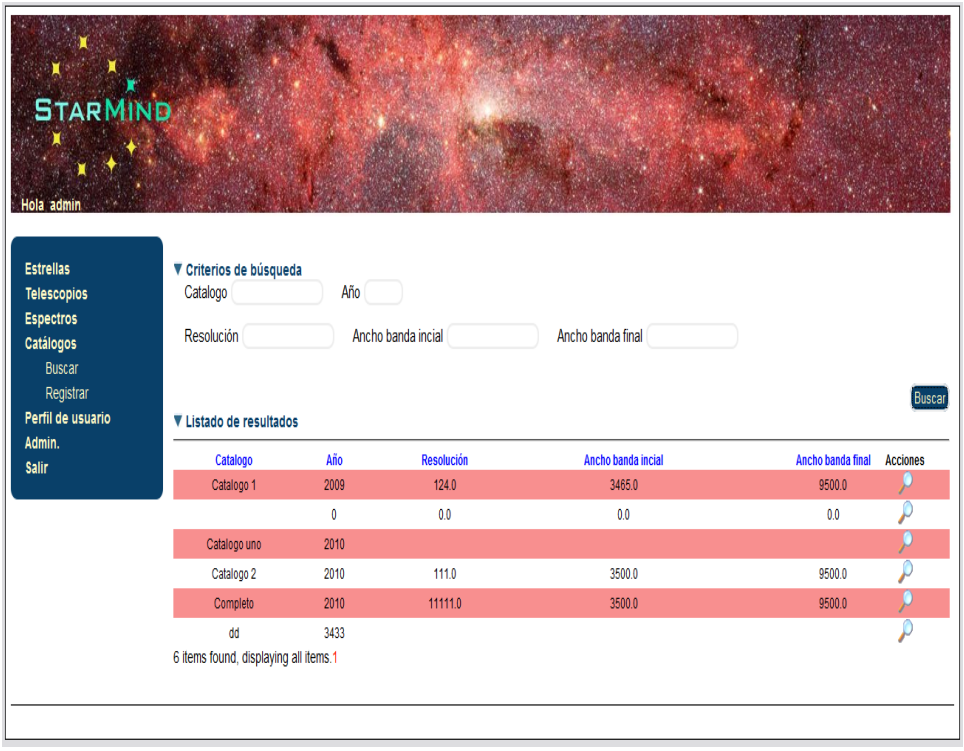


Figura 141. Funcionalidad de búsqueda por catálogo espectral incluida en el módulo de visualización de STARMIND

Así, en las búsquedas por catálogo estelar se pueden proporcionar diferentes criterios específicos (como podrían ser su autor, la fecha de publicación, su procedencia, las estrellas que incluye, etcétera) y la información obtenida como resultado de la consulta se presentará en forma de estadística del conjunto de espectros englobados en dicho catálogo solicitado. La figura 141 muestra una consulta de estas características, mientras que en la 142 se relacionan los resultados obtenidos después de la ejecución de la misma, en los que se observa que aparece en primer plano un gráfico con estadísticas que recogen la información por tipo espectral donde se representa en color verde el porcentaje de espectros de cada tipo y en azul la confianza media en las estimaciones obtenidas de forma automática; en este caso, los espectros de tipo O son los que se han clasificado con una tasa de éxito media mayor, mientras que los de tipo K serían los más abundantes en el catálogo consultado. Además de obtener esta información esquematizada, es posible efectuar una búsque-

da por tipo de espectros navegando por la estructura de pestañas de los resultados, puesto que para cada una de ellas se presenta la visualización del mejor espectro de dicho tipo espectral, ofreciéndose asimismo la posibilidad de consultar tanto sus detalles específicos (resolución, dispersión, etc.) como los de la estrella a la que pertenece (nombre, coordenadas, etcétera).

La otra consulta básica que se incluye en este módulo consiste en la recuperación de datos sobre estrellas específicas mediante búsquedas por criterios como su nombre común, las coordenadas galácticas, etc., las cuales permiten al mismo tiempo acceder a la información descriptiva de la estrella y visualizar sus espectros, haciendo especial hincapié en el espectro de mejor resolución del que se dispone. Además, cuando sus coordenadas son conocidas, se mostrará también la imagen capturada de *Google Sky*, tal y como se aprecia en la figura 143.

Figura 142. Resultados en forma de estadística de una consulta por catálogo espectral realizada a través de STARMIND

Antes de presentar al usuario los detalles relacionados con una estrella o con alguno de sus espectros, STARMIND se sincroniza con la base de datos astronómica SIMBAD, perteneciente al CDS (*Centre* de *Données astronomiques* de *Strasbourg*) [CDS 2010], la cual dispone de una serie de servicios web implementados que permiten su consulta, funcionalidad que se ha aprovechado en este desarrollo para completar la información almacenada localmente y que permite contrastar los resultados de las clasificaciones y/o parametrizaciones

obtenidas automáticamente. En la figura 144 se muestra el resultado de una consulta realizada sobre una estrella particular de la que se dispone de tres espectros distintos para su análisis y visualización.

El módulo de clasificación/parametrización estelar automática se ha desarrollado a través de la implementación de un servicio web específico, cuyos detalles principales se exponen a continuación, en el que se ha adaptado la aplicación *stand-alone* diseñada previamente para tal fin.

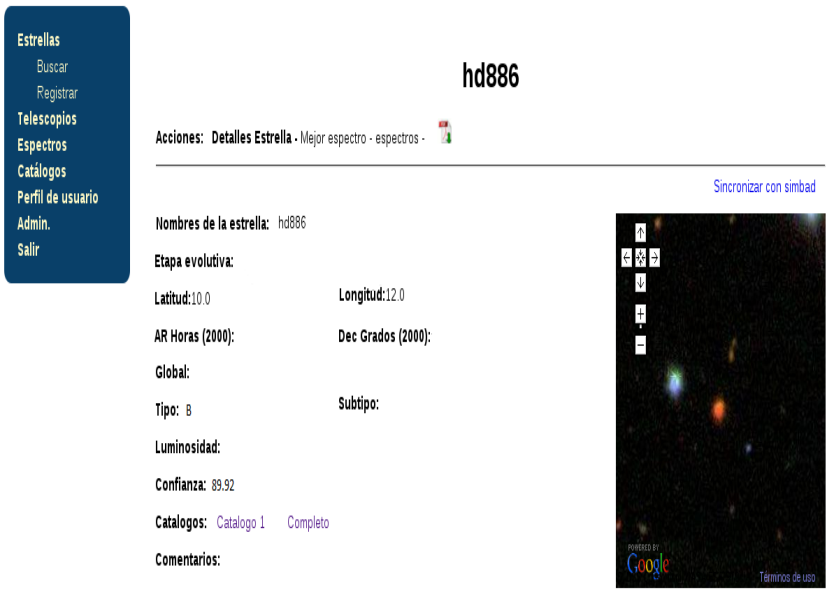


Figura 143. Información descriptiva obtenida como resultado de una consulta realizada sobre una estrella particular con STARMIND

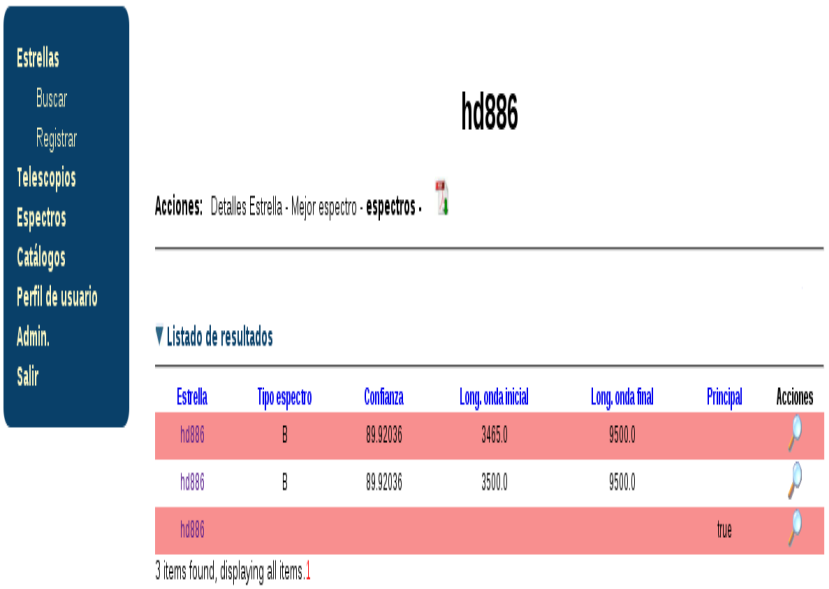


Figura 144. Espectros disponibles en la base de datos de una estrella particular obtenidos como resultado de una consulta realizada con STARMIND

7.3 Clasificación y parametrización: servicio web

El sistema de información de espectros estelares desarrollado, además de las capacidades mencionadas de almacenamiento, visualización y consulta de datos astronómicos, dispone de una herramienta eficiente de explotación inteligente de los mismos que se basa principalmente en la clasificación estelar no supervisada en el sistema MK y en la parametrización física automática por medio de técnicas de Inteligencia Artificial.

Originariamente este sistema de tratamiento de espectros estelares se concibió como una aplicación *stand-alone* para Windows™ desarrollada en lenguaje C++, aunque posteriormente la necesidad de que un gran número de usuarios pudiese acceder al sistema compartiendo sus datos de forma fácil y sencilla, y otros aspectos como la disponibilidad permanente o la actualización dinámica de la base de datos espectrales, condujeron a plantear su explotación definitiva a través de Internet.

Si bien inicialmente se consideró la posibilidad de modificar la plataforma disponible para permitir las peticiones externas a través de red, finalmente se optó por una reimplementación integral que permitiera utilizar un planteamiento más robusto y actual como son los servicios web. Dentro de esta área de desarrollo, las dos alternativas de diseño más habituales son las arquitecturas REST y SOAP [McGovern 2003], pero dado que la primera obliga al análisis sintáctico manual de la respuesta, mientras que la segunda hace este proceso casi transparente al desarrollador [Richardson 2007], se optó por el estilo arquitectónico SOAP para la implementación del servicio web de clasificación estelar automática. SOAP es un protocolo basado en XML para el envío de mensajes estructurados que se concreta mediante un archivo de definición WSDL (*Web Services Description Language*), el cual puede ser interpretado y traducido a los principales lenguajes de programación, creando así la infraestructura necesaria para su gestión desde el código del usuario. Por ejemplo, en lenguaje Java o C++ el fichero WSDL generará un conjunto de clases que se encargarán de la comunicación entre el cliente y el servidor de forma transparente, de modo que el usuario sólo tenga que invocar los métodos ofrecidos por el servicio web como si de una clase cualquiera se tratase.

Durante el proceso de migración al servicio web del código disponible en *Builder C++*, entorno en el que se desarrolló la primera versión de la herramienta de clasificación automática cuyas funcionalidades se han expuesto a lo largo de los capítulos precedentes, fue preciso resolver diversos problemas relacionados con la especificidad del compilador, siendo necesario simplificar el código con especificaciones estándar de lenguaje C con la ayuda de la herramienta *Gsoap*. Otro de los problemas hallados fue la ingente cantidad de datos que es necesario enviar para procesar una petición simple de clasificación o parame-

trización. Los espectros almacenados en la base de datos están constituidos por un conjunto muy amplio de pares de longitud de onda y flujo energético (del orden de 8000 para objetos obtenidos con una buena resolución) que hacen extremadamente pesado su envío a través de la red para la clasificación de un solo espectro. Por lo tanto, para evitar este comportamiento ineficiente, se optó por una alternativa de diseño en la que la propia aplicación web almacena la información procedente de la base de datos y, en lugar de enviar los espectros directamente en el cuerpo de los mensajes SOAP, se incluye únicamente su identificador para que sea el propio servicio web el que acceda a la base de datos recuperando y procesando la información de una forma mucho más rápida y eficaz. Una vez obtenida la clasificación o parametrización estelar, será también el servicio web el que tenga la responsabilidad de identificar y almacenar sus resultados nuevamente en la base de datos.

El servicio web implementado ofrece las mismas posibilidades de clasificación y parametrización que las descritas para la herramienta *stand-alone* (véanse capítulos 4 al 6), es decir, para efectuar sus clasificaciones el usuario de la aplicación podrá elegir cualquiera de las técnicas computacionales implementadas (sistemas expertos, redes de neuronas artificiales, algoritmos de *clustering*, redes funcionales, etc.), decantarse por una clasificación basada en la combinación de las implementaciones óptimas de las mismas (enfoque híbrido I) o incluso seleccionar la alternativa basada en un sistema híbrido neuro-simbólico (enfoque híbrido II). Así, a través de la aplicación web será ahora posible almacenar, consultar, visualizar, analizar y clasificar automáticamente tantos espectros como se desee de una forma rápida, simple y fiable, lo cual constituye el objetivo principal que se perseguía con el desarrollo del sistema de información de espectros estelares.

8 CONCLUSIONES

Las conclusiones más importantes a las que se ha llegado después de llevar a cabo la investigación que constituye esta tesis doctoral son las siguientes:

- El sistema de información desarrollado, STARMIND, permite automatizar la clasificación en el sistema MK y la extracción de parámetros físicos tales como la temperatura efectiva o la gravedad, mediante la combinación de algoritmos de procesamiento de señales, métodos estadísticos y técnicas de Inteligencia Artificial integradas por medio de una base de datos astronómicos disponible a través de Internet [STARMIND 2010].

- La revisión exhaustiva de los criterios que rigen el proceso de clasificación en el sistema MK ha posibilitado la adquisición y representación del conocimiento heurístico de los astrónomos expertos en tales tareas, integrándose este en una base de reglas jerarquizadas que reflejan de manera objetiva las relaciones implícitas entre los diferentes índices relativos a características morfológicas de los espectros y los distintos grupos considerados en el sistema estándar, esto es, tipos espectrales y clases de luminosidad.

- El grado de adecuación de cada uno de los criterios de clasificación obtenidos como resultado del mencionado estudio, se ha evaluado objetivamente por medio de la verificación de su capacidad real de discriminación sobre un conjunto completo y consistente de espectros de estrellas estándares del sistema MK, recopilado a través de diversas campañas propias de observación llevadas a cabo en el Observatorio Astronómico Internacional del Roque de los Muchachos. Como resultado de este análisis de sensibilidad, ha sido posible obtener un conjunto final completo de índices y criterios de clasificación entre los que se recogen algunos que, si bien no se consideran explícitamente en las técnicas manuales (SiII, bandas tempranas de TiO, etc.), han demostrado un comportamiento altamente satisfactorio.

- Durante el proceso de búsqueda de soluciones eficientes para el tratamiento automático de espectros estelares, se llevó a cabo un análisis diferencial completo de distintos métodos computacionales tanto estadísticos (*K-means*, FCM, ISODATA, PCA, Max-Min, FKNN) como pertenecientes a la rama de la Inteligencia Artificial (redes neuronales, sistemas basados en el conocimiento, lógica difusa, redes funcionales), que condujo de manera natural a la formalización de un sistema híbrido que representa una forma más versátil, adaptada y eficiente de emular el proceso actual

de clasificación basado en el estudio visual de las características morfológicas más relevantes de los espectros.

- En una primera aproximación, el desarrollo de tal sistema se abordó desde la perspectiva de la integración funcional de las implementaciones de los métodos computacionales evaluados que redundaron en un rendimiento óptimo, incluyendo asimismo un mecanismo de traducción conexionista-simbólico basado en la estimación de los factores de certeza de las reglas de conocimiento a partir de los pesos sinápticos de las arquitecturas neuronales. Finalmente, se llegó a un enfoque neuro-simbólico que se sustenta en la cooperación activa entre un sistema experto difuso, encargado de efectuar las estimaciones iniciales, y un conjunto de redes neuronales de clasificación que refinan las conclusiones obtenidas hasta los niveles de subtipo y clase de luminosidad, asignándoles asimismo un valor de probabilidad que indica el grado de confianza que se puede depositar en sus respuestas.

- La experiencia adquirida en el diseño de arquitecturas neuronales eficientes durante el desarrollo del sistema híbrido de clasificación tuvo una aplicación adicional en el problema de obtención de los parámetros físicos más relevantes de las estrellas, lográndose una caracterización adecuada de las mismas especialmente en temperatura, lo cual condujo a proponer asimismo una calibración propia e inicial entre tipo espectral MK y temperatura estelar efectiva.

- La estructuración de toda la información disponible a través de una base de datos relacional permite disponer en todo momento de un catálogo uniforme y estadísticamente significativo de estrellas estándares de clasificación. El diseño de una interfaz ergonómica para el acceso público a esta base de datos astronómica *online* ha conseguido que el carácter de esta sea fuertemente dinámico, pues se nutre de los espectros, medidas y clasificaciones que se obtienen durante su fase de explotación. Asimismo, ofrece al usuario-astrónomo la posibilidad de visualizar, analizar y clasificar los espectros de una forma fácil y sencilla sin necesidad de la ejecución de código adicional alguno.

- La interfaz web desarrollada, además de posibilitar la realización no supervisada de tantos análisis morfológicos, clasificaciones y parametrizaciones físicas como se desee, constituye una herramienta óptima para solicitar y recibir la retroalimentación de la comunidad astrofísica, lo cual facilita enormemente el mantenimiento y perfeccionamiento del sistema, logrando que este se adapte más convenientemente para satisfacer las necesidades específicas de los usuarios. Asimismo, el diseño modular de la misma garantiza la flexibilidad del sistema de información desarrollado, pues posibilita la fácil integración de nuevos métodos de tratamiento estelar basa-

dos en técnicas astronómicas y/o computacionales distintas que puedan resultar apropiadas en un futuro para tratar el problema de clasificación/parametrización estelar.

- La incorporación de un módulo autoexplicativo en la aplicación final facilita la comprensión tanto del proceso de razonamiento llevado a cabo por el sistema como del significado de las respuestas obtenidas, convirtiéndose al mismo tiempo en un mecanismo muy útil de verificación de criterios de clasificación que adquiere un valor añadido como herramienta didáctica en la formación y entrenamiento de nuevo personal en el campo de la clasificación espectral.

- El sistema híbrido desarrollado, que supone la solución computacional final propuesta para el problema planteado al inicio de esta tesis doctoral, ha demostrado ser capaz de estimar la clasificación bidimensional de los espectros estelares con una tasa de éxito similar, y en algunos casos ligeramente superior, al porcentaje de acuerdo entre los expertos humanos que los han clasificado manualmente (alrededor del 85% tanto para tipo espectral como para clase de luminosidad), seleccionando y aplicando a cada tipo de espectro particular el método más idóneo para su procesamiento automático, lográndose de este modo una mayor eficiencia, versatilidad y adaptación al proceso tradicional de clasificación de espectros ópticos estelares en el sistema MK.

9 TRABAJO FUTURO: EXPLOTACIÓN DE BASES DE DATOS ASTRONÓMICAS, TERRESTRES Y ESPACIALES. EL PROYECTO ESPACIAL GAIA

GAIA es la misión espacial clave de la Agencia Espacial Europea (ESA) para los próximos años, concebida con el ambicioso objetivo de determinar la composición, formación y evolución de nuestra Galaxia. El satélite, cuya puesta en órbita está prevista para el verano de 2012, cuenta con una instrumentación compleja compuesta por dos fotómetros y un espectrómetro de velocidades radiales; los instrumentos a bordo permitirán determinar de forma precisa las posiciones, distancias, movimientos en el espacio y principales características físicas de alrededor de un billón de estrellas de nuestra Galaxia y más allá de la misma. Para cumplir este último propósito, GAIA dispondrá de dos espectrofotómetros que cubrirán un amplio rango espectral entre 300 y 10000 micras, con los que se pretende identificar y clasificar los objetos que componen nuestra Galaxia.

Durante muchos años, la cartografía celeste se ha limitado a los *surveys* de Palomar y ESO, realizados mediante cámaras Schmidt y digitalizados posteriormente. GAIA proporcionará la distribución detallada tridimensional y los movimientos en el espacio completos hasta magnitud 20, con una precisión en las medidas que no tiene precedentes, alcanzándose en los mejores casos la millonésima del segundo de arco; se espera asimismo conocer la distancia a varios millones de estrellas con una precisión superior al 1%, lo cual permitirá obtener información, entre otros aspectos, sobre la evolución estelar y la formación de estrellas en nuestra Galaxia.

El equipamiento científico de GAIA incluye también un espectrógrafo de resolución intermedia, denominado RVS, operativo en la región del triplete infrarrojo de Ca II que, además de permitir la medida de las velocidades radiales de las fuentes, contribuirá también al estudio de su naturaleza y propiedades químicas.

Las tareas de clasificación, simulación y, en general, la gestión de los datos relativos a todos los objetos celestes de hasta 20 magnitudes en el visible, involucra a unas 10^9 fuentes y constituye, sin duda, un desafío tanto desde el punto de vista de la Astrofísica como de las Ciencias de la Computación. Para la mayoría de las fuentes recogidas (estrellas individuales, estrellas binarias, galaxias, cuásares, planetas menores, etc.) no se dispondrá de información alguna a priori sobre sus propiedades, sino que estas serán simplemente obje-

tos puntuales no resueltos de los que se pretende derivar los parámetros astrofísicos intrínsecos a partir de fotometría multi-banda, espectroscopia e información astrométrica.

Nuestro grupo de investigación colabora en las labores de diseño de herramientas de análisis automático de los datos de la futura misión GAIA desde el año 2005, participando activamente en la Unidad de Coordinación 8 del Consorcio Científico de Procesado y Análisis de Datos (GAIA DPAC) que se encarga de preparar programas para la clasificación y parametrización de las futuras observaciones del satélite, los cuales se basan por el momento en datos simulados de la misión calculados por el propio consorcio. En particular estamos desarrollando aplicaciones basadas en técnicas de Inteligencia Artificial tanto para la parametrización físico-química de los espectros estelares del instrumento RVS, como para la clasificación de todos los objetos observados por GAIA en clases preestablecidas (estrellas, galaxias de fondo, cuásares, objetos múltiples, objetos del sistema solar, *outliers*, etcétera). El sistema híbrido propuesto en esta tesis doctoral ha servido de base para algunas de las aplicaciones que se han realizado en el marco del proyecto GAIA, y nuestra intención es continuar contribuyendo al desarrollo de la misión y a la explotación de sus datos cuando el satélite empiece a observar el cielo a partir del año 2012.

BIBLIOGRAFÍA

[ADC 2010] *Astronomical Data Center.* Accesible online vía ftp://adc.astro.umd.edu/pub/adc/archives/catalogs/3/3092/, 2010.

[Albert 2003] Albert, F., Valor, M., Gomis, J. M., Contero, M. *Analysis Tool for Cataloguing Textile and Tile Pattern Designs.* Proc. of the International Conference on Computer Science and Its Applications, vol. 3, pp. 569-578, 2003.

[Allende 2004] Allende, C. *Automated Analysis of Stellar Spectra.* Astronomische Nachrichten, vol. 325, n. 6, pp. 604-609, 2004.

[Alonso 2000] Alonso, A., Arcay. B., Castro, A. *Analysis and Evaluation of Hard and Fuzzy Clustering Segmentation Techniques in Burned Patients Images.* Image and Vision Computing, vol. 18, pp. 1045-1054, 2000.

[Alur 2003] Alur, D., Malks, D., Crupi, J. *Core J2EE Patterns: Best Practices and Design Strategies. 2nd Edition* Prentice Hall, 2003.

[Andreon 2000] Andreon, S., Gargiulo, G., Longo, G., Tagliaferri, R., Capuano, N. *Wide field imaging - I. Applications of neural networks to object detection and star/galaxy classification.* Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, vol. 319, n. 3, pp. 700-716, 2000.

[Andronov 1999] Andronov, I. L. *The expert system for time series analysis of variable stars.* Treasure-hunting in astronomical plate archives, pp. 254-257, 1999.

[Arbib 1997] Arbib, M. A., Erdi, P., Szentagothai, J. *Neural Organization: Structure, Function and Dynamics.* The MIT Press, 1997.

[Arbib 2002] Arbib, M. A. *The Handbook of Brain Theory and Neural Networks, 2nd Edition.* The MIT Press, 2002.

[ATLAS12 2010] *Grids of Model Atmospheres.* Accesible online vía http://kurucz.harvard.edu/grids.html, 2010.

[Ayel 1991] Ayel, M., Laurent, J. P. *Validation, verification and test of knowledge-based systems.* John Wiley & Sons, Inc., 1991.

[Bahill 1991] Bahill, A. T. *Verifying and Validating Personal Computer-Based Expert Systems.* Prentice-Hall Inc., 1991.

[Bailer-Jones 1997] Bailer-Jones, C. A. L., Irwin, M., Gilmore, G., von Hippel, T. *Physical Parametrization of Stellar Spectra: the neural Network Approach.* Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, vol. 292, pp. 157-166, 1997.

[Bailer-Jones 1998] Bailer-Jones, C. A. L., Irwin, M., von Hippel, T. *Automated Classification of Stellar Spectra – II. Two-dimensional Classification with Neural Networks and Principal Components Analysis.* Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, vol. 298, pp. 361-377, 1998.

[Bailer-Jones 2008] Bailer-Jones, C. A. L., Smith, K., Tiede, C., Elting, C. *Automated Classification of Gaia Sources*. Proc. of the Astronomical Data Analysis Software and Systems ASP Conference Series, vol. 394, pp. 539, 2008.

[Ball 1967] Ball, G. H., Hall, D. J. *A Clustering Technique for Summarizing Multivariate Data*. Behavorial Science, vol. 12, n. 2, pp. 153-155, 1967.

[Ball 2004] Ball, N. M., Loveday, J., Fukugita, M., Nakamura, O., Okamura, S., et ál. (2). *Galaxy types in the Sloan Digital Sky Survey using supervised artificial neural networks*. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, vol. 348, n. 3, pp. 1038-1046, 2004.

[Barker 1887] Barker, G. F., *On the Henry Draper Memorial Photographs of Stellar Spectra*, Proc. of the American Philosophical Society, vol. 24, pp. 166-172, 1887.

[Barnbaum 1996] Barnbaum, C., Stone, P. S., Keenan, P. C. *A Moderate-Resolution Spectral Atlas of Carbon Stars: R. J, N, CH, and Barium Stars*. Astrophysical Journal Supplement, vol. 105, pp. 419, 1996.

[Bazarghan 2008] Bazarghan, M., Gupta, R. *Automated Classification of Sloan Digital Sky Survey (SDSS) Stellar Spectra using Artificial Neural Networks*. Astrophysics and Space Science, vol. 315, n. 1-4, pp. 201-210, 2008.

[Bezdek 1984] Bezdek, J. C., Ehrlich, R., Full, W. *FCM: the Fuzzy C-Means Clustering Algorithm*. Computer and Geosciences, vol. 10, n. 2-3, pp. 191-203, 1984.

[Bezdek 2005] Bezdek, J. C., Keller, J., Krisnapuram, R., Pal, N. R. *Fuzzy Models and Algorithms for Pattern Recognition and Image Processing*. Springer, 2005.

[Birney 2006] Birney, D. C., González, G., Oesper, D. *Observational Astronomy, 2nd Edition*. Cambridge University Press, 2006.

[Blum 1992] Blum, A. *Learning Boolean Functions in a Infinite Attribute Space*. Machine Learning, vol. 9, n. 4, pp. 373-386, 1992.

[Bologna 2000] Bologna,G. *Symbolic Rule Extraction from the DIMLP Neural Network*. In Hybrid Neural Systems. Springer, 2000.

[Bors 1994] Bors, A. G., Gabbouj, G. *Minimal Topology for a Radial Basis Function Neural Network for Pattern Classification*. Digital Signal Processing: a review journal, vol. 4, n. 3, pp. 173-188, 1994.

[Bors 1998] Bors, A. G., Pitas, I. *Optical Flow Estimation and Moving Object Segmentation based on Median Radial Basis Function Network*. IEEE Transactions on Image Processing, vol. 7, n. 5, pp. 693-702, 1998.

[Brachman 2004] Brachman, R. Levesque, H. *Knowledge Representation and Reasoning*. The Morgan Kaufmann Series in Artificial Intelligence, 2004.

[Breiman 1985] Breiman, L., Friedman, J. H. *Estimating Optimal Transformations for Multiple Regression and Correlation*. Journal of the American Statistical Association, vol. 80, n. 391, pp. 580-598, 1985.

[Bromhead 1988] Bromhead, D. S., Lowe, D. *Multivariable Functional Interpolation and Adaptive Networks*. Complex Systems, vol. 2, pp. 321-355, 1988.

[Brown 1995] Brown, D. E., Pomykalski, J. J. *Reliability Estimation during Prototyping of Knowledge-Based Systems*. IEEE Transactions on Knowledge Data Engineering, vol. 7, n. 3, pp. 378-390, 1995.

[Buchanan 1983] Buchanan, B. G., Barstow, R. Bechtal, R., Bennet, J., Clancey, W. et ál. (3). *Constructing an Expert System*. Addison Wesley, 1983.

[Calvo 1995] Calvo, R. A., Ceccato, H. A., Piacentini, R. D. *Neural network prediction of solar activity*. Astrophysical Journal, Part 1 (ISSN 0004-637X), vol. 444, n. 2, pp. 916-921, 1995.

[Cannon 1901] Cannon, A. J., Pickering, E. C., *Spectra of bright southern stars photographed with the 13-inch Boyden telescope as part of the Henry Draper Memorial.* Annals of Harvard College Observatory, vol. 28, part 2, pp. 129-263, 1901.

[Cannon 1918] Cannon, A. J., Pickering, E. C., *The Henry Draper Catalogue***.** Annals of Harvard College Observatory**,** vol. 91-99, Cambridge Mass., The Observatory, 1918-1924.

[Cannon 1925] Cannon, A. J., Pickering, E. C., *The Henry Draper Extension.* Annals of Harvard College Observatory, vol. 100, pp. 1-226, Cambridge Mass., The Observatory, 1925-1936.

[Cannon 1949a] Cannon, A. J., Pickering, E. C., *The Henry Draper Catalogue*, *Vol. 112: HD Extension*, Annals of Harvard College Observatory, vol. 112, pp. 1-295, Cambridge Mass., The Observatory, 1949.

[Cannon 1949b] Cannon, A. J., Pickering, E. C., *The Henry Draper Catalogue*, Annals of Harvard College Observatory, vol. 91-100, n. 112, Cambridge Mass., The Observatory, 1918-1949.

[Cardiel 1999] Cardiel, N. *Formación Estelar en Galaxias dominantes de Cúmulos. (Ph. D. thesis*). Universidad Complutense de Madrid, 1999. Accesible online vía *http://www.ucm.es/info/Astrof/software/reduceme/reduceme.html.*

[Carnap 1967] Carnap, R. *Logical Foundations of Probability, 2nd Edition.* University of Chicago Press, 1967.

[Carpenter 1988] Carpenter, G. A., Grossberg, S. *The ART of adaptive pattern recognition by a self-organizing neural network*. Computer, vol. 21, n. 3, pp. 77-88, 1988.

[Casdagli 1989] Casdagli, M. *Nonlinear Prediction of Chaotic Time Series.* Physica D, vol. 35, n. 3, pp. 335-356, 1989.

[Castelli 2004] Castelli, F., Kurucz, R. L. *New Grids of ATLAS9 Model Atmospheres*. Proc. of IUA Symposium, n. 210, 2004.

[Castillo 1998] Castillo, E., Gutiérrez, J. M. *Nonlinear Time Series Modeling and Prediction Using Functional Networks. Extracting Information Masked by Chaos*. Physics Letters A, vol. 244, pp. 71-84, 1998.

[Castillo 1999a] Castillo, E., Cobo, A., Gutiérrez, J. M., Pruneda, E. *Functional Networks with Applications. A Neural Based Paradigm.* Kluwer Academic Publishers, 1999.

[Castillo 1999b] Castillo, E., Cobo, A., Gutiérrez, J. M., Pruneda, E. *Working with differential, functional and difference equations using functional networks.* Applied Mathematical Modeling, vol. 23, n. 2, pp. 89-107, 1999.

[Castillo 2001] Castillo, E. Hadi, A. L., Gutiérrez, J. M., Lacruz, B. *Some Applications of Functional Networks in Statistics and Engineering.* Technometrics, vol. 43, n. 1, pp. 10-24, 2001.

[Castillo 2005] Castillo, E. Iglesias, A., Ruiz-Cobo, R. *Functional Equations in Applied Sciences.* Mathematics in Science and Engineering, vol. 199, Elsevier B. V., 2005.

[CDS 2010] *CDS. Centre de Données astronomiques de Strasbourg.* Accesible online vía http://cdsweb.u-strasbg.fr/, 2010.

[Cha 1996] Cha, I., Kassam, S. A. *RBFN Restoration of NonLinearly Degraded Images.* IEEE Transactions on Image Processing, vol. 5, n. 6, pp. 964-975, 1996.

[Chatzis 1999] Chatzis, V., Bors, A. G., Pitas, I. *Multimodal Decision-Level Fusion for Person Authentication.* IEEE Transactions on Systems, Man and Cybernetics, part A: Systems and Humans, vol. 29, n. 6, pp. 674-680, 1999.

[Chauvin 1995] Chauvin, Y., Rumelhart, D. E. (Eds). *Backpropagation: Theory, Architectures, and Applications.* Lawrence Erlbaum, 1995.

[Chen 1991] Chen, S., Cowan, C. F. N., Grant, P. M. *Orthogonal Least Squares Learning Algorithm for Radial Basis Function Networks.* IEEE Transactions on Neural Networks, vol. 2, n. 2, pp. 302-309, 1991.

[Clark 1992] Clark, A., Lutz, R. *Connectionism in Context (Artificial Intelligence and Society).* Springer, 1992.

[Cloete 2000] Cloete, I., Zurada, J. (Eds.). *Knowledge-Based Neurocomputing.* MIT Press, 2000.

[Coenen 1999] Coenen, F., Vermesan, A. *Validation and Verification of Knowledge Based Systems - Theory, Tools and Practice.* Springer, 1st Edition, 1999.

[Colmerauer 1996] Colmerauer, A., Roussel, P. *The birth of Prolog, History of programming languages---II.* ACM, pp. 331-367, 1996.

[Connel 1989] Connel, J. L., Shafer, L. B. *Structured Rapid Prototyping: An Evolutionary Approach to Software Development.* Yourdon, 1989.

[Copérnico 1543] Copérnico, N. *De revolutionibus orbium coelestium, Libri VI.*, Nuremberg, Johannes Petreius, 1543.

[Crossman 2007] Crossman, A. R., Neary, D. *Neuroanatomía: Texto y Atlas, 3ª Edición.* Masson Elsevier, 2007.

[Dafonte 2005] Dafonte, C., Rodríguez, A., Arcay, B., Carricajo, I., Manteiga, M. *A Comparative Study of KBS, ANN and Statistical Clustering Techniques for Unattended Stellar Classifica-*

tion. Lecture Notes in Computer Science: Progress in Pattern Recognition, Image Analysis and Applications, vol. 3773, pp. 566-577, 2005.

[Davis 1991] Davis, L. *Handbook of Genetic Algorithms*. Van Nostrand Reinhold Company, 1991.

[de Toro 1999] de Toro y Llaca, C. *La evolución de los conocimientos astronómicos a través de la historia*. Publicaciones del Instituto de Astronomía y Geodesia, Universidad Complutense de Madrid, n. 194, pp. 1-57, 1999.

[Delorme 2008] Delorme, P., Delfosse, X., Abert, L., Artigau, E., Forveille, T. et ál. (7). *CFBDS J005910.90-011401.3: reaching the T-Y Brown Dwarf transition?*. arXiv:0802.4387v2, 2008.

[Dennis 2009] Dennis, A., Haley-Wixom, B., Tegarden, D. *Systems Analysis and Design with UML*. Wiley& Sons, Inc., 2009.

[Douglas 2005] Douglas, K., Douglas, S. *PostgreSQL, 2nd Edition*. Sams, 2005.

[Downs 1998] Downs, J., Harrison, R. F., Cross, S. S. *A decision support tool for the diagnosis of breast cancer based upon Fuzzy ARTMAP*. Neural Computing & Applications, vol. 7, n. 2, pp. 147-165, 1998.

[Droke 2001] Droke, C. *Moving Averages Simplified*. Marketplace Books, 2001.

[Dubois 1980] Dubois, D., Prade, H. *Fuzzy Sets and Systems: Theory and Applications*. Academic press, 1980.

[Durkin 1994] Durkin, J. *Expert Systems: Design and Development*. Macmillan Coll Div, 1994.

[Eberhart 1996] Eberhart, R. C., Simpson, P. K., Dobbins, R., *Computational. Intelligence PC Tools*. Academic Press Professional, 1996.

[Eden 1992] Eden, A., *The Search for Christian Doppler*. Springer-Verlag, 1992.

[Edirisinghe 2002] Edirisinghe, G., Edirisinghe, D., Messer, O., Guidry, M. *Genetic Algorithms and Neural Networks Applied to Galaxy Collisions*. American Astronomical Society, 201st AAS Meeting; Bulletin of the American Astronomical Society, vol. 34, pp. 1256, 2002.

[ELODIE 2010] *Elodie: The Stellar Libray*. Accesible online vía http://leda.univ-lyon1.fr//fG.cgi?n=11&b=LH_ELODIE, 2010.

[El-Sebakhy 2009] El-Sebakky, E. A. *Software reliability identification using functional networks: A comparative study*. Expert Systems with Applications, vol. 36, n. 2, pp. 4013-4020, 2009.

[Estévez 1998] Estévez, P., Pérez, C., Caballero, R., Buhler, G., Goles, E. *Classification of Defects on Wood Boards Based on Neural Networks and Genetic Selection of Features*. IIIS World Multiconference on Systemics, Cybernetics and Informatics, vol. 1, pp. 624-629, 1998.

[Everitt 2009] Everitt, B., Landau, S., Leese, M. *Clustering Analysis*. Wiley, 2009.

[Faber 1985] Faber, S. M., Friel, E. D., Burstein, D., Gaskell, C. M. *Old stellar populations. II - an analysis of K-giant spectra.* Astrophysical Journal Supplement Series, vol. 57, pp. 711-741, 1985.

[Faúndez-Abans 1996] Faundez-Abans, M., Ormeno, M. I., de Oliveira-Abans, M. *Classification of Planetary Nebulae by Cluster Analysis and Artificial Neural Networks.* Astronomy and Astrophysics Supplement Series, vol.116, pp. 395-402, 1996.

[Feigenbaum 1980] Lindsay, R. K., Buchanan, B. G., Feigenbaum, E. A., Lederberg, J. *Applications of Artificial Intelligence for Organic Chemistry: The Dendral Project.* McGraw-Hill Book Company, 1980.

[Finlay 1988] Finlay, P. N., Forsey, G. J., Wilson, J. M. *The Validation of Expert Systems--Contrasts with Traditional Methods.* Journal of Operational Research Society, vol. 39, n. 10, pp. 933-938, 1988.

[Foody 1999] Foody, G. M. *Applications of the self-organising feature map neural network in community data analysis.* Ecological Modelling, vol. 120, n. 2-3, pp. 97-107, 1999.

[Forgy 1981] Forgy, C. *OPS5 User's Manual.* Technical Report CMU-CS-81-135. Carnegie Mellon University, 1981.

[Forgy 1982] Forgy, C. *Rete: A Fast Algorithm for the Many Pattern/Many Object Pattern Match Problem.* Artificial Intelligence, vol. 19, pp. 17-37, 1982.

[Forgy 1986] Forgy, C. L. *The OPS User's Manual, System Version 2.2.* Production Systems Technologies Inc., 1986.

[Forgy 1995a] Forgy, C. L. *The OPS/R2 User's Manual.* Production Systems Technologies Inc., 1995.

[Forgy 1995b] Forgy, C. L. *The OPS Languages: An Historical Overview.* PC AI, vol. 9, n. 5, 1995.

[Freeman 1991] Freeman, J. A, Skapura, D. M. *Neural Networks algorithms, applications and programming techniques.* Addison-Wesley, 1991.

[Freund 1997] Freund, Y., Schapire, R. E. *A Decision-Theoretic Generalization of on-line Learning and an Application to Boosting.* Journal of Computer and System Sciences, vol. 55, n. 1, pp. 119-139, 1997.

[Friedman 1991] Friedman, J. H. *Multivariate Adaptive Regression Splines.* The Annals of Statistics, vol. 19, n. 1, pp. 1-141, 1991.

[Friedman-Hill 2003] Friedman-Hill, E. *Jess in Action: Java Rule-Based Systems.* Manning Publications, 2003.

[Frost 2008] Frost, J., Goessner, S., Hirtzler, M. *Learn SVG: The Web Graphics Standard,* Learn SVG, 2008.

[Furuhashi 2001] Furuhashi, Y., Tano, S., Jacobsen, H.-A. *Deep Fusion of Computational and Symbolic Processing*. Physica-Verlag, Studies in Fuzziness and SoftComputing Series, vol. 59, 2001.

[GAIA 2010] *ESA Science & Technology: the Gaia Mission*. Accesible online vía http://www.esa.int/science/gaia, 2010.

[Gaines 1990] Gaines, B. *Knowledge Acquisition Systems*. Knowledge Engineering, vol. 1: Fundamentals, McGraw-Hill, 1990.

[Galilei 1610] Galileo Galilei, *Sidereus Nuncius*, Venecia, 1610.

[Gamma 1996] Gamma, E., Helm, R., Johnson, R., Vlissides, J. M *Design Patterns: Elements of Reusable Object-oriented Software*. Addison Wesley, 1996.

[Garrison 2002] Garrison, R. F. *Highlights of Astronomy*, vol. 12, pp. 673, 2002.

[Giarratano 2004] Giarratano, J. C., Riley, G. D. *Expert Systems: Principles and Programming, 4th Edition*. Course Technology, 2004.

[Giridhar 2006] Giridhar, S., Muneer, S., Goswami, A. *Automated Classification and Stellar Parametrization*. Mem.S.A.It., vol. 77, pp. 1130, 2006.

[Goderya 2002] Goderya, Shaukat N., Lolling, Shawn M. *Morphological Classification of Galaxies using Computer Vision and Artificial Neural Networks: A Computational Scheme.* Astrophysics and Space Science, vol. 279, n. 4, pp. 377-387, 2002.

[Goebel 1989] Goebel, J., Stutz, J., Volk, K., Walker, H., Gerbault, F. et ál. (3). *A Bayesian classification of the IRAS LRS Atlas***.** Astronomy and Astrophysics, vol. 222, n. 1-2, p. L5-L8, 1989.

[Golshani 1990] Golshani, F. *Rule-Based Expert Systems*. Knowledge Engineering, vol. 1: Fundamentals, McGraw-Hill, 1990.

[Gövert 1999] Gövert, N., Lalmas, M., Fuhr, N. *A probabilistic description-oriented approach for categorising Web documents*. Proc. of the 8th International Conference on Information and Knowledge Management, pp. 475-482, 1999.

[Gray 1987] Gray, R. O., Garrison, R. F. *The early A-type stars - Refined MK classification, confrontation with Stroemgren photometry, and the effects of rotation*. The Astrophysical Journal Supplement Series, vol. 65, pp. 581-602, 1987.

[Gray 1989a] Gray, R. O., Garrison, R. F. *The early F-type stars - Refined MK classification, confrontation with Stroemgren photometry, and the effects of rotation*. The Astrophysical Journal Supplement Series, vol. 69, pp. 301-321, 1989.

[Gray 1989b] Gray, R. O., Garrison, R. F. *The late A-type stars - Refined MK classification, confrontation with Stroemgren photometry, and the effects of rotation*. The Astrophysical Journal Supplement Series, vol. 70, pp. 623-636, 1989.

[Gray 1994a] Gray, R. O., Corbally, C. J. *The calibration of MK spectral classes using spectral synthesis. 1: The effective temperature calibration of dwarf stars*. The Astronomical Journal, vol. 107, n. 2, pp. 742-746, 1994.

[Gray 1994b] Gray, R. O., Garrison, R. F. *The late B-type stars - Refined MK classification, confrontation with Stroemgren photometry, and the effects of rotation*. The Astronomical Journal, vol. 107, n. 4, pp. 1556-1564, 1994.

[Gray 2001] Gray, R. O., Napier, M. G., Winkler, L. I. *The Physical Basis of Luminosity Classification in the Late A-, F-, and Early G-Type Stars. I. Precise Spectral Types for 372 Stars*. The Astronomical Journal, vol. 121, n. 4, pp. 2148-2158, 2001.

[Gray 2005] Gray, D. F. *The Observation and Analysis of Stellar Photospheres*. Cambridge University Press, 2005.

[Gray 2009] Gray, R. O., Corbally, C. J. *Stellar Spectral Classification*. Princeton University Press, 2009.

[Gray 2010] Gray, R. O. *A Digital Spectral Classification Atlas*. Accesible online vía http://nedwww.ipac.caltech.edu/level5/Gray/frames.html, 2010.

[Green 1990] Green, C. J., Keyes, M. M. *Verification and Validation of Expert Systems. In Expert Systems: A Software Methodology For Modern Applications*. IEEE Computer Society Reprint Collection. IEEE Computer Society Press, pp. 444-449, 1990.

[Grevesse 1998] Grevesse, N., Sauval, A. J. *Standard Solar Composition*. Space Science Reviews, n. 85, pp. 161-174, 1998.

[Guinan 2007] Guinan, Edward F., Hollon, N., Prsa, A., Devinney, E. *The EBAI Project: Testing Artificial Intelligence / Neural Network Approaches to Automatically Solve Light Curves of Eclipsing Binary Systems*. American Astronomical Society, AAS Meeting. Bulletin of the American Astronomical Society, vol. 39, p. 729, 2007.

[Gulati 1994] Gulati, R. K., Gupta, R., Gothoskar, P., Khobragade, S. *Stellar spectral classification using automated schemes*. The Astrophysical Journal, vol. 426, n. 1, pp. 340-344, 1994.

[Gupta 2004] Gupta, R., Singh, H. P., Volk, K., Kwok, S. *Automated Classification of 2000 Bright IRAS Sources*. The Astrophysical Journal Supplement Series, vol. 152, pp. 201-209, 2004.

[Hahn 2007] Hahn, B., Valentine, D. *Essential MATLAB for Scientists and Engineers, 3rd Edition*. Newnes, 2007.

[Ham 2000] Ham, F. M., Kostanic, I. *Principles of Neurocomputin for Science and Engineering*. McGraw-Hill, 2000.

[Hartigan 1975] Hartigan, J. A. *Clustering Algorithms*. John Wiley & Sons, 2001.

[Hartigan 2001] Hartigan, J. A. *Statistical Clustering*. International Encyclopaedia of the Social and Behavioral Sciences, pp. 15014-15019, Elsevier Ltd., 2001.

[Hastie 1990] Hastie, T. J., Tibshirani, R. J. *Generalized Additive Models*. Monographs on Statistics and Applied Probability, vol. 43, Chapman & Hall/CRC, 1990.

[Hayes-Roth 1983] Hayes-Roth, F., Waterman, D.A., Lenat, D.B. *Building Expert Systems*. Adisson-Wesley, 1983.

[Haykin 2008] Haykin, S. *Neural Networks and Learning Machines, 3rd Edition*. Prentice-Hall, 2008.

[Hebb 1949] Hebb, D. O. *The Organization of Behavior: A Neuropsychological Theory*. Wiley, 1949.

[Heck 1984] Heck, A., Egret, Jaschek, M., Jaschek, C. *IUE Low Dispersion Spectra Reference Atlas. Part 1. Normal Stars*. ESA SP-1052, p. 476, 1984.

[Henry 1994] Henry, T. J., Kirkpatrick, J. D., Simons, D. A. *The solar neighbourhood, 1: Standard spectral types (K5-M8) for northern dwarfs within eight parsecs*. The Astronomical Journal, vol. 108, n. 4, pp. 1437-1444, 1994.

[Hewitson 2002] Hewitson, B. C., Crane, R. G. *Self-organizing maps: applications to synoptic climatology*. Climate Research, vol. 22, pp. 13-26, 2002.

[Hilario 1997] Hilario, M. *An overview of Strategies for Neurosymbolic Integration In Connectionist-Symbolic Integration: From Unified to Hybrid Approaches*. Lawrence Erlbaum Associates, 1997.

[Hippel 1994] von Hippel, T., Storrie-Lombardi, L. J., Storrie-Lombardi, M. C., Irwin, M. J. *Automated Classification of Stellar Spectra – I. Initial Results with Artificial Neural Networks*. R.A.S. Monthly Notices, Vol. 269, n. 1, p. 97, 1994.

[Hitimajshima 2000] Hitimajshima, P. *A new modified fuzzy c-means algorithm for multispectral satellite images segmentation*. Proc. of the IEEE Geoscience and Remote Sensing Symposiym, vol. 4, pp. 1684-1686, 2000.

[Holland 1992] Holland, J. H. *Adaptation in Natural and Artificial Systems*. Massachusetts Institute of Technology, 1992.

[Hopfield 1982] Hopfield, J. J. *Neural networks and physical systems with emergent collective computational properties*. Proc. of the National Academy of Sciences USA, vol. 79, pp`. 2554-2588, 1982.

[Hopfield 1999] Hopfield, J. J. *Brain, Neural Networks and Computation*. Reviews of Modern Physics, vol. 71, n. 2, pp. 431-437, 1999.

[Houk 1994] Houk, N. *The Michigan Survey and the Continuing Importance of Spectral Surveys*. The MK process at 50 years. A powerful tool for astrophysical insight. Astronomical Society of the Pacific Conference Series, p.285, 1994.

[Howlett 2001] Howlett, R. J., Jain, L. C. (Editores). *Radial Basis Function Networks 1: Recent Developments in Theory and Applications*. Physica-Verlag, 2001.

[Hüllermeier 2007] Hüllermeier, E. *Case-Based Approximate Reasoning*. Springer, 2007.

[IAC 2010] *Instituto de Astrofísica de Canarias*. Accesible online vía http://www.iac.es, 2010.

[IFA 2010] *Institute for Astronomy. University of Hawaii.* Accesible online vía http://www.ifa.hawaii.edu/users/pickles/AJP/hilib.html, 2010.

[Ignizio 1990] Ignizio, J. P. *An Introduction to Expert Systems: The Development and Implementation of Rule Based Expert Systems*. McGraw-Hill, 1990.

[IRAF 2010] IRAF Project. *National Optical Astronomy Observatories.* Accesible online vía, http://iraf.noao.edu/, 2010.

[Jackson 1998] Jackson, P. *Introduction to Expert Systems, 3rd Edition.* Addison Wesley, 1998.

[Jacoby 1984] Jacoby, G. H., Hunter, D. A., Christian, C. A. *A Library of Stellar Spectra.* The Astrophysical Journal Supplement Series, vol. 56, pp. 257-281, 1984.

[Jang 1997] Jang, J. S. R., Sun, C. T., Mizutani, E. *Neuro-Fuzzy and Soft Computing: A Computational Approach to Learning and Machine Intelligence*. Prentice Hall Inc, 1997.

[Jaschek 1991] Jaschek, C. Jaschek, M. *The Classification of Stars.* Cambridge University Press, 1990.

[Johnson 1967] Johnson, S. C. *Hierarchical Clustering Schemes***.** Psychometrika, vol. 32, n. 3, pp. 241-254, 1967.

[Jones 1966] Jones, D. H., *Multivariate Analysis as a Tool in Spectral Classification.* Proc. of Spectral Classification and Multicolour Photometry, Symposium no. 24. Edited by Kerstin Loden, L. O. Loden, and Ulf Sinnerstand. International Astronomical Union., Academic Press, p. 37, 1966.

[Kaler 1989] Kaler, J. B. *The stars and their spectra.* Cambridge University Press, 1989.

[Kaler 2006] Kaler, J. B. *The Cambridge Encyclopedia of Stars.* Cambridge University Press, 2006.

[Kandel 1992] Kandel, A., Langholz, G. (Eds.). *Hybrid Architectures for Intelligent Systems***.** CRC Press, 1992.

[Kaufman 1990] Kaufman, L., Rousseeuw, P. J. *Finding Groups in data: An introduction to Cluster Analysis*. John Wiley & Sons, 1990.

[Keenan 1976] Keenan, P. C., McNeil, R. C. *An Atlas of Spectra of the Cooler Stars: Types G,K,M,S and C.* Ohio State University Press, 1976.

[Keenan 1989] Keenan, P. C., McNeil, R. C. *The Perkins Catalog of Revised MK Types for the Cooler Stars.* Astrophysical Journal Supplement Series, vol. 71, pp. 245-266**,** 1989.

[Keenan 1993] Keenan, P. C. *Revised MK Spectral Classification of the Red Carbon Stars.* Publications of the Astronomical Society of the Pacific, vol. 105, n. 691, pp. 905-910, 1993.

[Keenan 1999] Keenan, P. C., Barnbaum, C. *Revision and Calibration of MK Luminosity Classes for Cool Giants by HIPPARCOS Parallaxes.* The Astrophysical Journal, vol. 518, n. 2, pp. 859-865, 1999.

[Keller 1985] Keller, J. M., Gray, M. R., Givens, J. A. *A Fuzzy K-Nearest Neighbour Algorithm*. IEEE Transactions on Systems, Man and Cybernetics, vol. 15, n. 4, 1985.

[Kepler 1609] *Astronomia nova seu, Physica coelestis, tradita commentariis De motibus stellae martis, ex observationibus G.V. Tychonis Brahe*. Pragae, 1609.

[Kerber 1995] Kerber, A., Benecke, C., Grund, R., Laue, R., Wieland, T. *Chemical Education via MOLGEN*, Journal of Chemical Education, vol. 72, pp. 403-406, 1995.

[Kirchhoff 1860] Kirchhoff, G., Bunsen R., *Chemical Analysis by Observation of Spectra*. Annalen der Physik und der Chemie. Heidelberg, vol. 110, pp. 161-189, 1860.

[Kirkpatrick 1995] Kirkpatrick, J. D., Henry, T. J., Simons, D. A. *The solar neighbourhood. 2: The first list of dwarfs with spectral types of M7 and cooler*. The Astronomical Journal, vol. 109, n. 2, pp. 797-807, 1995.

[Kohavi 1998] Kohavi, R., Provost, F. *Glossary of Terms*. Machine Learning, vol. 30, pp. 271-274, 1998.

[Kohonen 1982] Kohonen, T. *Self-organized formation of topologically correct feature maps*. Biological Cybernetics, vol. 43, pp. 59-69, 1982.

[Kohonen 1996] Kohonen, T., Oja, E., Simula, O., Visa, A., Kangas, J. *Engineering Applications of the Self-Organizing Map*, IEEE Proceedings, vol. 84, n. 10, pp. 1358-1384, 1996.

[Kohonen 2001] Kohonen, T. *Self-Organizing Maps*. Springer, 3th extended edition, 2001.

[Kolen 1991] Kolen, J. F., Goel, A. K. *Learning in parallel distributed processing networks: Computational complexity and information content*. IEEE Transactions on System, Man and Cybernetics, vol. 21, n. 2, pp. 359-367, 1991.

[Krasnopolsky 2006] Krasnopolsky, V., Cherkassky, V., Solomatine, D. P., Valdes, J., *Computational intelligence in earth sciences and environmental applications: Issues and challenges*. Neural Networks, vol. 19, pp. 113-121, 2006.

[Kurtz 1984] Kurtz, M. J. *Progress in Automation Techniques for Spectral Classification*. Proc. of the Workshop in honour of W.W. Morgan and P.C. Keenan, University of Toronto, David Dunlap Observatory, pp. 136-152, 1984.

[Kurucz 1992] Kurucz, R. L. *Model Atmospheres for Population Synthesis*. The Stellar Populations of Galaxies: Proc. of the 149th Symposium of the International Astronomical, Kluwer Academic Publishers, pp. 225-232, 1992.

[Lacruz 2006] Lacruz, B., Pérez-Palomares, A., Pruneda R. E. *Functional Networks for Clasifcation and Regression Problems*. International Conference on Mathematical and Statistical Modeling, 2006.

[LaSala 1994] LaSala, J. *Automatic Spectral Classification Using Metric Distance Techniques*. The MK process at 50 years. A powerful tool for astrophysical insight. Astronomical Society of the Pacific Conference Series, p. 312, 1994.

[Leung 2001] Leung, H., Lo, T., Wang, S. *Prediction of Noisy Chaotic Time Series using an Optimal Radial Basis Function Neural Network*. IEEE Transactions on Neural Networks, vol. 12, n. 5, pp. 1163-1172, 2001.

[Levy 1988] Levy, D. *Computer Chess Compendium*. Springer-Verlag New York, Inc., 1988.

[Liebowitz 1997] Liebowitz, J. *The Handbook of Applied Expert Systems*. CRC, 1997.

[Ligeza 2006] Ligeza, A. *Logical Foundations for Rule-Based Systems (Studies in Computational Intelligence), 2nd Edition*. Springer, 2006.

[Lockyer 1874] Lockyer, N., *Contributions to Solar Physics*. Macmillan & co., 1874.

[Lucas 2001] Lucas, P. J. F. *Certainty-factor-like structure in Bayesian belief networks*. Knowledge-based systems, vol. 14, n. 7, pp. 327-335, 2001.

[MacQueen 1967] MacQueen, J. B. *Some Methods for Classification and Analysis of Multivariate Observations*. Proc. of 5th Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability, vol.1, pp. 281–297, 1967.

[Mahoney 1993] Mahoney, J., Mooney, R. *Combining Connectionist and Symbolic Learning to Refine Certainty-Factor Rule-Bases*. Connection Science, vol. 5, pp.339-364, 1993.

[Malik 2008] Malik, *D. S. C++ Programming: From Problem Analysis to Program Design, 4th Edition*. Course Technology, 2008.

[Mamdani 1975] Mamdani, E. H., Assilian, S. *An Experiment in Linguistic Synthesis with a Fuzzy Logic Controller*. International Journal of Man-Machine Studies, vol. 7, n. 1, pp. 1-13, 1975.

[Manteiga 2009] Manteiga, M., Carricajo, I., Rodríguez, A., Dafonte, C., Arcay, B. *STARMIND: a Fuzzy Logic Knowledge-based System for the Automated Classification of Stars in the MK System*. The Astronomical Journal, vol. 137, n. 2, pp. 3245-3253

[Martín del Brío 2006] Martín del Brío, B., Sanz, A. *Redes Neuronales y Sistemas Borrosos, 3ª Edición*. RA-MA, 2006.

[Matej 1996] Matej, S., Lewit, R. M. *Practical Considerations for 3-D Image Reconstruction using Spherically Symmetric Volume Elements*. IEEE Transactions on Medical Imaging, vol. 15, n. 1., pp. 68-78, 1996.

[Mathematica 2010] *Wolfram Research: Mathematica, Technical and Scientific Software*. Accesible online vía http://www.wolfram.com/, 2010.

[Matlab 2010] *The MathWorks: Matlab and Simulink for Technical Clomputing*. Accesible online vía http://www.mathworks.com/, 2010.

[Maury 1897] Maury, A. C., Pickering, E. C., *Spectra of bright stars photographed with the 11-inch Draper Telescope as part of the Henry Draper Memorial*. Annals of Harvard College Observatory, vol. 28, part 1, pp. 1-128, 1897.

[McCarthy 1960] McCarthy, J. *Recursive Functions of Symbolic Expressions and their Computation by Machine (Part I)*. Communications of the ACM, vol. 3, n. 4, pp. 184-195, 1960.

[McClelland 1986] McClelland J. L., Rumelhart D. E. *Parallel Distributed Processing,* vol. 1-2, The MIT Press, 1986-1987.

[McCulloch 1943] McCulloch, W. S., Pitts, W. H. *A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity*. Bulletin of Mathematical Biophysics, vol. 5, pp. 115-133, 1943.

[McDermott 1980] McDermott, J. *R1: an expert in the computer systems domain.* Proc. of the 1st Annual National Conference on Artificial Intelligence, pp. 269-271, 1980.

[McGovern 2003] McGovern, J. Tyagi, S., Stevens, M. E., Mathew, S. *Java Web Services Architecture*, Morgan Kaufmann, 2003.

[Medsker 1994] Medsker, L. R. *Hybrid Neural Network and Expert Systems*. Kluwer Academic Publishers, 1994.

[Mennessier 1990] Mennessier, M. O., Barthes, D., Mattei, J. *A new approach to the analysis of Mira light curves*. Confrontation between stellar pulsation and evolution; Proc. of the Conference, Bologna, Italy, May 28-31, 1990 (A91-28876 11-90). San Francisco, CA, Astronomical Society of the Pacific, pp. 379-382, 1990.

[Minsky 1969] Minsky, M. L., Papert, S. A. *Perceptrons.* The MIT Press, 1969.

[Mitchell 1997] Mitchell, T. M. *Machine Learning.* McGraw-Hill Publishing Company, 1997.

[MK 2010] Morgan, W.W., Keenan P.C., Kellman E. *An atlas of stellar spectra with outline of spectral classification.* Astrophysics Monographs, University of Chicago Press, 1943. Accesible online vía http://nedwww.ipac.caltech.edu/level5/ASS_Atlas/frames.html, 2010.

[Moody 1989] Moody, J., Darken, C. J., *Fast Learning in Networks of Locally-tuned Processing Units.* Neural Computation, vol. 1, n. 2, pp. 281-294, 1989.

[Morgan 1943] Morgan W.W, Keenan P.C., Kellman E. *An atlas of stellar spectra with outline of spectral classification.* University of Chicago Press, 1943.

[Morgan 1966] Morgan, W. W. *The Spiral Structure of the Galaxy.* The New Astronomy, New York, Simon and Schuster, p. 93, 1966.

[Morgan 1978] Morgan, W. W., Abt, H. A., Tapscott, J. W. *The Revised MK Spectral Atlas for Stars Earlier than the Sun.* Accesible online vía http://nedwww.ipac.caltech.edu/level5/March02/Morgan/frames.html, 1978.

[Morgan 1984] Morgan, W. W. *The MK System and the MK Process*. Proc. of the Workshop in honour of W.W. Morgan and P.C. Keenan, University of Toronto, David Dunlap Observatory, p. 18, 1984.

[Mosqueira 2000] Mosqueira, E., Moret, V. *Validation of Intelligent Systems: a Critical Study and a Tool.* Expert Systems with Applications, vol. 8, pp. 1-6, 2000.

[Naim 1995] Naim, A., Lahav, O., Sodre, L., Jr., Storrie-Lombardi, M. C. Automated morphological classification of APM galaxies by supervised artificial neural networks. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, vol. 275, n. 3, pp. 567-590, 1995.

[Neal 1993] Neal, R. M. *Probabilistic inference using markov chain Monte Carlo methods*. Technical Report CRG-TR-93-1, University of Toronto, 1993.

[Newell 1963] Newell, A., Simon, H. *GPS: A program that simulates human thought*. In Computers and Thought, McGraw-Hill, 1963.

[Newton 1687] Newton, I. *Philosophiae Naturalis Principia Mathematica*, Trinity College, 1687.

[Nikkilä 2002] Nikkila, J., Törönen, P., Kaski, S. Venna, J., Castrén, E. et ál. (1). *Analysis and visualization of gene expression data using Self-Organizing Maps*. Neural Networks, vol. 15, n. 8-9, pp. 953-966, 2002.

[Nikolopoulos 1997] Nikolopoulos, C. *Expert Systems - Introduction to First and Second Generation and Hybrid Knowledge Based Systems*. CRC Press, 1st Edition, 1997.

[Niranjan 1990] Niranjan, M., Fallside, F. *Neural Networks and Radial Basis Functions in Classifying Static Speech Patterns*. Computer Speech and Language, vol. 4., pp. 275-289, 1990.

[NIST 2010] *NIST: Atomic Spectra Database*. Accesible online vía http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/index.html, 2010.

[NOT 2010] *Nordic Optical Telescope*. Accesible online vía http://www.not.iac.es, 2010.

[Odewahn 1994] Odewahn, S. C., Nielsen, M. L.*Star-galaxy separation using neural networks*. Vistas in Astronomy, vol. 38, n. 3, pp. 281-286, 1994.

[Oja 1999] Oja, E., Kaski, S. *Kohonen Maps*. Elsevier Science B. V., 1999.

[O'Keefe 1993] O'Keefe, R. M., O'Leary, D. E. *Expert system verification and validation: a survey and tutorial*. Artificial Intelligence Review, vol. 7, n. 1, pp. 3-42, 1993.

[O'Leary 1988] O'Leary, D. E. *Methods of Validating Expert Systems*. Interfaces, vol. 18, n. 6, pp. 72-79, 1988.

[O'Leary 1996] O'Leary, D. E. *Verification of uncertain knowledge based systems: an empirical verification approach*. Management Science, vol. 42, n. 12, pp. 1663–1675, 1996.

[Olnon 1986] Olnon, F. M., Raimond, E., Neugebauer, G., van Duinen, R. J., Habing, H. J. et ál. (24). *IRAS catalogues and atlases - Atlas of low-resolution spectra*. Astronomy and Astrophysics Supplement Series, vol. 65, n. 4, pp. 607-1065, 1986.

[Ordoñez 2007] Ordoñez, D., Dafonte, C., Iglesias, A., Arcay, B. *A canonical integrator environment for the development of connectionist systems*. Dynamics of Continuous, Discrete and Impulsive Systems. Series A: Mathematical Analysis, vol. 14, pp. 580-585, 2007.

[Owens 2000] Owens, J., Hunter, A. *Application of the Self-Organizing Map to Trajectory Classification*. Third IEEE International Workshop on Visual Surveillance, p. 77, 2000.

[Park 1991] Park, J., Sandberg, J. W. *Universal Approximation using Radial Basis Functions Networks*. Neural Computation, vol. 3, n. 2, pp. 246-257, 1991.

[Partridge 1986] Partridge, D. *Artificial Intelligence: Applications in the Future of Software Engineering*. Ellis-Horwood, 1986.

[Pearl 1988] Pearl, J. *Probabilistic Reasoning in Intelligent Systems*. Morgan Kaufmann, 1988.

[Pedersen 1989] Pedersen, K. *Well-Structured Knowledge Bases*. AI Expert, vol. 4, n. 7, pp. 45-48, 1989.

[Peterson 1981] Peterson, J. L. *Petri Net Theory and the Modeling of Systems*. Prentice Hall, 1981.

[Pfleeger 2006] Pfleeger, S. L., Atlee, J. M. *Software Engineering. Theory and Practice. 3rd Edition*. Pearson Higher Education, 2006.

[Pickering 1890] Pickering, E. C. *The Draper Catalogue of stellar spectra photographed with the 8-inch Bache telescope as a part of the Henry Draper memorial***.** Annals of Harvard College Observatory**,** vol. 27, 1890.

[Pickles 1998] Pickles, A. J. *A Stellar Spectral Flux Library: 1150-25000 Å*. The Publications of the Astronomical Society of the Pacific, vol. 110, n. 749, pp. 863-878, 1998.

[Poggio 1990] Poggio, T., Girosi, F. *Networks for Approximation and Learning*. Proc. Of the IEEE, vol. 78, n. 9, pp. 1481-1497, 1990.

[Pomykalski 1996]. Pomykalski, J. J., Brown, D. E. *Knowledge-Based System Design Enhancement Through Reliability Measurement*. Expert Systems with Applications, vol. 11, n. 3, pp. 277-286, 1996.

[Pressman 2009] Pressman, R. *Software Engineering: A Practitioner's Approach*. McGraw-Hill Science/Engineering/Math, 2009.

[Proakis 2006] Proakis, J. G., Manolakis, D. K. *Digital Signal Processing. 4th Edition*. Prentice Hall, 2006.

[Prugniel 2001] Prugniel, P., Soubiran, C. *A database of high and medium-resolution stellar spectra*. Astronomic and Astrophisics, vol. 369, pp. 1048-1057, 2001.

[Ptolomeo 1515] Ptolomeo, C., *Almagestum Cl. Ptolomaei Pheludiensis Alexandrini Astronomorum principis: Opus ingens ac nobile omnes Celorum motus continens*. Ductu Petri Liechtenstein Coloniensis Germani, Venetii: P. Liechtenstein, 1515.

[Qu 2003] Qu, W., Shirai, K. *Belief learning in certainty factor model and its application to text categorization*. Proc. of the 2003 Joint Conference of the Fourth International Conference on Information, Communications and Signal Processing and Fourth Pacific-Rim Conference on Multimedia., vol. 12, pp. 1192-1196, 2003.

[Quinlan 1993] Quinlan, J. R. *C4.5: Programs for Machine Learning*. Morgan Kaufmann Publishers, 1993.

[Ramón y Cajal, 2002] Ramón y Cajal, S. *Textura del Sistema Nervioso del Hombre y de los Vertebrados*. Reeditado por el Gobierno de Aragón (original 1904), 2002.

[Rampazzo 1988] Rampazzo, R., Heck, A., Murtagh, F., Albrecht, R. *Rule based classification of IUE spectra*. ESA Journal, vol. 12, n. 3, pp. 385-394, 1988.

[Rappaport 1988] Rappaport, B., Anderson, K., *Astronomy from large databases: Scientific objectives and methodological approaches*; Proc. of the Conference, p. 233, 1998.

[Ratcliff 1990] Ratcliff, R. *Connectionist models of recognition memory: Constraints imposed by learning and forgetting functions*. Psychological Review, vol. 97, pp. 285-308, 1990.

[Richardson 2007] Richardson, L., Ruby, S. *RESTFul Web Services*, O'Reilly, 2007.

[Ripley 1994] Ripley, B.D. *Neural Networks and Related Methods for Classification (with discussion)*. Journal of the Royal Statistical Society B, vol. 56, n. 3, pp. 409-456, 1994.

[Rodríguez 2004] Rodríguez, A., Arcay, B., Dafonte, C., Manteiga, M., Carricajo, I. *Automated Knowledge-based Analysis and Classification of Stellar Spectra using Fuzzy Reasoning*. Expert Systems with Applications, vol. 27, pp. 237-244, 2004.

[Rodríguez 2008] Rodríguez, A., Carricajo, I., Manteiga, M., Dafonte, C., Arcay, B. *STARMIND: Automated Classification of Astronomical Data Based on an Hybrid Strategy*. Lecture Notes in Computer Science: Hybrid Artificial Intelligence Systems, vol. 5271, pp. 196-203, 2008.

[Rojas 2002] Rojas, I., Pomares, H., Bernier, J.L., Ortega, J., Pino, B. et ál. (2). *Time Series Analysis using Normalized PG-RBF Network with Regression Weights*. Neurocomputing, vol. 42, pp. 267-285, 2002.

[Rosenblatt 1958] Rosenblatt, F. *The Perceptron: A Probabilistic Model for Information Storage and Organization in the Brain*. Psychological Review, vol 65, pp. 386-408, 1958.

[Rumbaugh 1991] Rumbaugh, J. *Object-oriented Modeling and Design*. Prentice-Hall, 1991.

[Rumbaugh 2004] Rumbaugh, J., Blaha, M. R. *Object-Oriented Modeling and Design with UML, 2nd Edition*. Prentice Hall, 2004.

[Rumelhart 1986] Rumelhart, D. E., Hinton, J. E., Williams, R. J. *Learning representations by back-propagating errors*. Nature, vol. 323, pp. 533-536, 1986.

[Russel 1914] Russell, H. N. *On the probable order of stellar evolution*. The Observatory, vol. 37, pp. 165-175, 1914.

[Russel 2002] Russel, S., Norvig, P. *Artificial Intelligence: A Modern Approach, 2nd Edition*. Prentice-Hall, 2002.

[Salaris 2006] Salaris, M., Cassisi, S. *Evolution of Stars and Stellar Populations*. Wiley & Sons Inc., 2006.

[Sanner 1992] Sanner, R. M., Slotine, J. E., *Gaussian Networks for Direct Adaptive Control*. IEEE Transactions on Neural Networks, vol. 3, n. 6, pp. 837-863, 1992.

[Sarro 2006] Sarro, L. M., Sánchez-Fernández, C. *Automatic classification of eclipsing binaries light curves using neural networks*. Astronomy and Astrophysics, vol. 446, n. 1, pp. 395-402, 2006.

[Schneider 1996] Schneider, M., Langholz, G., Kandel, A., Chew, G. *Fuzzy Expert System Tools*. John Wiley & Sons, 1996.

[Secchi 1866] Secchi, A. *Analyse spectrale de la lumière de quelques étoiles, et nouvelles observations sur les taches solaires*, Comptes Rendus des Séances de l'Académie des Sciences, vol. 63, pp. 364-368, 1866.

[Setiono 2000] Setiono, R., Leow, W.K., Thong, J. Y-L. *Opening the neural network blackbox: An algorithm for extracting rules from function approximating neural*. Proc. of the 21th International Conference on Information Systems, pp. 176-186, 2000.

[Shafer 1976] Shafer, G. *A Mathematical Theory of Evidence*. Princeton University Press, 1976.

[Shalloway 2004] Shalloway, A., Trott, J. *Design Patterns Explained: A New Perspective on Object-Oriented Design, 2nd Edition*. Addison-Wesley Professional, 2004.

[Shortliffe 1975] Shorliffe, E. H., Buchanan, B. G. *A model of inexact reasoning in medicine*. Mathematical Biosciences, vol. 23, pp. 351-379, 1975.

[Shortliffe 1984] Shorliffe, E. H., Buchanan, B. G. *Rule-Based Expert Systems: The MYCIN Experimentes of the Stanford Heuristic Programming Project*. Addison Wesley, 1984.

[Sibigroth 1992] Sibigroth, J. M. *Implementing Fuzzy Expert Rules in Hardware*. AI Expert Magazine, vol. 7, n. 4, pp. 25-31, 1992.

[Silva 1992] Silva D. R., Cornell, M. E. *A New Library of Stellar Optical Spectra*. The Astrophysical Journal Supplement Series, vol. 81, n. 2, pp. 865-881, 1992.

[Sima 1993] Sima, J., Neruda, R. *EXPSYS - a tool for neural expert system design*. Proc. of the NEURONET conference, 1993.

[SIMBAD 2010] *SIMBAD Astronomical Database*. Accesible online vía http://simbad.u-strasbg.fr/simbad/, 2010.

[Singh 1998] Singh, H. P., Gulati, R. K., Gupta, R. *Stellar Spectral Classification using Principal Component Analysis and Artificial Neural Networks*. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, vol. 295, n. 2, pp. 312-318, 1998.

[Smith 1993] Smith, S., Kandel, A. *Verification and Validation of Rule-based Systems*. CRC, 1st Edition, 1993.

[Snider 2001] Snider, S., Allende, C., von Hippel, T., Beers, T. C., Sneden, C. et ál. (2). *Three-Dimensional Spectral Classification of Low-Metallicity Stars using Artificial Neural Networks*. The Astrophysical Journal, vol. 562, pp. 528-548, 2001.

[SNNS 2010a] *SNNS. Stuttgart Neural Network Simulator*. Accesible online vía http://www.ra.cs.uni-tuebingen.de/SNNS/, 2010.

[SNNS 2010b] *Stuttgart Neural Network Simulator User Manual, v. 4.1*. Accesible online vía http://www.ra.cs.uni-tuebingen.de/SNNS/UserManual/UserManual.html, 2010.

[Sodré 1994] Sodré, L. Jr., Cuevas, H. *Spectral classification of galaxies*. Vistas in Astronomy, vol. 38, n. 3, pp. 287-291, 1994.

[Solano 2007] Solano, E. *VO Science. The Spanish Virtual Observatory*. Highlights of Spanish Astrophysics IV, Proc. of the seventh Scientific Meeting of the Spanish Astronomical Society (SEA). Universitat de Barcelona-IEEC. Springer, Dordrecht, p. 345, 2007.

[Souza 2002] de Souza, M. A., Ferreira, M. A. *Designing reusable rule-based architectures with design patterns*. Expert Systems with Applications, vol. 23, n. 4, pp. 395-403, 2002.

[Specht 1990] Specht, D. F. *Probabilistic Neural Networks*. Neural Networks, vol. 3, pp. 109-118, 1990.

[SPECTRUM 2010] *SPECTRUM, A Stellar Spectral Synthesis Program*. Accesible online vía http://www.physics.appstate.edu/spectrum/spectrum.html, 2010.

[STARMIND 2010] *STARMIND*: *Stellar Spectra Information System*. Accesible online vía http://stamind.tic.udc.es, 2010.

[Suárez 2001] Suárez, O., Manteiga, M., Rodrıguez, A., Dafonte, C., Arcay, B. et ál. (3). *Automatic classification of optical sources candidates to be in the post-AGB stage*. Highlights of Spanish Astrophysics II, Proc. of the 4th Scientific Meeting of the Spanish Astronomical Society (SEA), Kluwer Academic Publishers, 2001.

[Suárez 2006] Suárez, O., García-Lario, P., Manchado, A., Manteiga, M., Ulla, A., et ál. (1). *A spectroscopic atlas of post-AGB stars and planetary nebulae selected from the IRAS point source catalogue*. Astronomy and Astrophysics, vol. 458, n. 1, pp.173-180, 2006.

[Sugeno 1977] Sugeno M. *Fuzzy measures and fuzzy integrals: a survey*. Fuzzy Automata and Decision Processes, pp. 89-102, 1977.

[Sun 1991] Sun, R**.** *Integrating Rules and Connectionism for Robust Reasoning. A connectinist Architecture with Dual Representation. (Ph.D. thesis*). Brandeis University, 1991.

[Sutton 1998] Sutton, R. S., Barto, A. G. *Reinforcement Learning: An Introduction*. The MIT Press, 1998.

[Takagi 1985] Takagi, T., Sugeno, M. *Fuzzy identification of systems and its applications of modeling and control*. IEEE Transactions of Systems Man and Cybernetics, vol. 15, pp. 116–132, 1985.

[Tarassenko 1998] Tarassenko, L. *A guide to neural computing and applications*. Hodder Arnold Publication, 1998.

[Taylor 2007] Taylor, M., Diaz, A. I. *On the Deduction of Galactic Abundances with Evolutionary Neural* Networks. From Stars to Galaxies: Building the Pieces to Build Up the Universe. ASP Conference Series, vol. 374, proc. of the conference, p. 105, 2007.

[Tou 1974] Tou, J. T., González, R. C. *Pattern Recognition*. Addison-Wesley, 1974.

[Touretzki 1990] Touretzki, D. S. *BoltzCONS: Dynamic Symbol Structures in a Connectionist Network*. Artificial Intelligence, vol. 46, n. 1-2, pp. 5-16, 1990.

[Towell 1993] Towell, G., Shavlik, J. *Extracting Refined Rules from Knowledge-Based Neural Nets*. Machine Learning, vol. 13, n. 1, pp. 71-101, 1993.

[Tryon 1939] Tryon, R. C. *Cluster analysis*. McGraw-Hill, 1939.

[Valdes 1984] Valdes, F. *The Interactive Data Reduction and Analysis Facility (IRAF)*. Bulletin of the American Astronomical Society, vol. 16, p. 497, 1984.

[Valdes 2004] Valdes, F., Gupta, R., Rose, J. A., Singh, H. P., Bell, D. J. *The Indo-US Library of Coudé Feed Stellar Spectra*. The Astrophysical Journal Supplement Series, vol. 152, n. 2, pp. 251-259, 2004.

[Vazdekis 2008] Vazdekis, A. *Resolving the Age–Metallicity Degeneracy*. Proc. of ASP Conf. Ser. 390 Pathways Through an Eclectic Universe, pp. 255, 2008.

[Vesanto 1999] Vesanto, J. *SOM-based Data Visualization Methods*. Intelligent Data Analysis, vol. 3, pp. 111-126, 1999.

[Vieira 1998] Vieira, E. F., Ponz, J. D. *Automated Spectral Classification using Neural Networks*. Astronomical Data Analysis Software and Systems VII. ASP Conference Series, vol. 145, 1998.

[Villareal 1989] Villarreal, J., Baffes, P. *Sunspot prediction using neural networks*. 3th Annual Workshop on Space Operations Automation and Robotics (SOAR 1989), pp. 525-535, 1989.

[VIZIER 2010] *VizieR Catalogue Service*. Accesible online vía ftp://cdsarc.u-strasbg.fr/pub/cats/III/166, 2010.

[Wachs 2002] Wachs, J., Kartoun, U., Edan, Y., Stern, H. *Real-Time Hand Gesture Telerobotic System Using the Fuzzy C-Means Clustering Algorithm*. Proc. of the 5th Biannual World Automation Congress, vol. 13, pp. 403-409, 2002.

[Wachs 2008] Wachs, J., Stern, H., Edan, Y., Gillam, M., Feied, M. et ál. (2). *A Real-Time Hand Gesture Interface for a Medical Image Guided System*. International Journal of Intelligent Computing in Medical Sciences and Image Processing, vol. 1, n. 3, pp. 175-185, 2008.

[Walborn 1972] Walborn, N. R. *Two-dimensional spectral classification of O stars*. Journal of the Royal Astronomy Society of Canada, vol. 66, p. 71, 1972.

[Walborn 2002] Walborn, N. R., Howarth, I. D., Lennon, D. J., Massey, P., Oey, M. S. et ál. (5). *A New Spectral Classification System for the Earliest O Stars: Definition of Type O2*. The Astronomical Journal, vol. 123, n. 5, pp. 2754-2771, 2002.

[Waterman 1986] Waterman, D. A. *A Guide to Expert Systems*, Addison-Wesley, 1986.

[Weaver 1995] Weaver, W. B., Torres-Dodgen, A. V. *Neural Network Classification of the Near Infrared Spectra of A-type Stars*. The Astrophysical Journal, vol. 446, pp. 300-317, 1995.

[Weaver 1997] Weaver, W. B., Torres-Dodgen, A. V. *Accurated two-dimensional Classification of Stellar Spectra with Artificial Neural Networks*. The Astrophysical Journal, vol. 487, pp. 847-857, 1997.

[Weaver 2000] Weaver, W. B. *Spectral Classification of Unresolved Binary Stars with Artificial Neural Networks*. The Astrophysical Journal, vol. 541, pp. 298-305, 2000.

[Wellin 2005] Wellin, P. R., Gaylord, R. J., Kamin, S. N. *An Introduction to Programming with Mathematica, 3r Edition.* Cambridge University Press, 2005.

[Werbos 1994] Werbos, P. J. *The Roots of Backpropagation: From Ordered Derivatives to Neural Networks and Political Forecasting.* Wiley-Interscience, 1994.

[Wermter 2000] Wermter, S., Sun, R. (Eds.) *Hybrid Neural Systems.* Springer, 2000.

[Widrow 1960] Widrow, B., Hoff, M. *Adaptive Switching Circuits.* Institute of Radio Engineers, Western Electronic Show and Convention Record, vol. 4, pp. 96-104, 1960.

[Willemsen 2005] Willemsen, P. G., Hilker, M., Kayser, A., Bailer-Jones, C. A. L. *Analysis of Medium Resolution Spectra by Automated Methods – Application to M 55 and ω Centauri.* Astronony & Astrophysics, vol. 436, n. 1, pp. 379-390, 2005.

[Willshaw 1976] Willshaw, D. J., von der Malsburg, C. *How patterned neural connections can be set up by self-organisation.* Proceedings of the Royal Society of London. Series B, Biological Sciences, vol. 194, n. 1117, pp. 431-445, 1976.

[Winston 1992] Winston, P. H. *Artificial Intelligence.* Addison Wesley, 1992.

[Worthey 1994] Worthey, G., Faber, S. M., González, J. J., Burstein, D. *Old stellar populations. 5: Absorption feature indices for the complete LICK/IDS sample of stars.* The Astrophysical Journal Supplement Series, vol. 94, n. 2, pp. 687-722, 1994.

[Worthey 1997] Worthey, G., Ottaviani, D., L. *H gamma and H delta Absorption Features in Stars and Stellar Populations***.** Astrophysical Journal Supplement, vol. 111, p. 377, 1997.

[Yager 1994] Yager, R., Filev, D. *Generation of Fuzzy Rules by Mountain Clustering.* Journal of Intelligent & Fuzzy Systems, vol. 2, n. 3, pp. 209-219, 1994.

[Yang 1999] Yang, Y. An *evaluation of statistical approaches to text categorization.* Information Retrieval, vol. 1, n. 1-2, pp. 69-90, 1999.

[York 2000] York, D. G., Adelman, J., Anderson, J. E. Anderson, S. F., Annis, J. et ál. (139). *The Sloan Digital Sky Survey: Technical Summary.* The Astrophysical Journal, vol. 120, n. 3, pp. 1579-1587, 2000.

[Yu 1984] Yu V. L., Fagan, L. M, Bennett, S. W., Clancey, W. J., Scott, A. C., et ál. (4). *An Evaluation of MYCIN's Advice, In Rule Based Expert Systems.* Addison Wesley, 1984.

[Zadeh 1965] Zadeh, L. A. *Fuzzy Sets.* Information and Control, vol. 8, pp. 338-353, 1965.

[Zadeh 1975] Zadeh, L. A. *The concept of a Linguistic Variable and its Application to Approximate Reasoning I.* Information Sciences, vol. 8, n. 3, pp. 199-249, 1975.

[Zadeh 1983] Zadeh, L. A. *The role of fuzzy logic in the management of uncertainty in expert systems.* Fuzzy sets and systems, vol. 11, n. 3, pp. 199-227, 1983.

[Zadeh 1996] Zadeh**,** L. A. Fuzzy *Sets, Fuzzy Logic, and Fuzzy Systems: Advances in Fuzzy Systems - Applications and Theory*, vol. 6, World Scientific Publishing Company, 1996.

[Zeeman 1897] Zeeman, P. *The Effect of Magnetisation on the Nature of Light Emitted by a Substance*. Nature, vol. 55, pp. 347, 1897.

[Zeilik 1993] Zeilik, M. *Conceptual Astronomy*. Wiley & Sons Inc., 1993.

[Zhang&Benveniste 1992] Zhang, Q., Benveniste, A. *Wavelet Neural Networks*. IEEE

Transactions on Neural Networks, vol. 3, n. 6, pp. 889-898, 1992.

[Zhang&Gerbrands 1992] Zhang, Y. J., Gerbrands, J. J. *Segmentation Evaluation using Ultimate Measurement Accuracy*. Proc. SPIE, vol. 1657, pp. 449-460, 1992.

[Zimmermann 2001] Zimmermann H. J. *Fuzzy Set Theory and Its Applications, 4th Edition*. Springer, 2001.

[Zombeck 2007] Zombeck, M. V. *Handbook of Space Astronomy and Astrophysics, 3rd Edition*. Cambridge University Press, 2007.

ANEXOS

ANEXO I: Modelos conceptuales

Diagramas de clases, esquemas E/R, casos de uso, etc., disponibles en formato electrónico (anexoI.pdf).

ANEXO II: Catálogos de espectros estelares

Tablas de espectros de los catálogos de referencia utilizados tanto en el diseño como en la evaluación de los desarrollos expuestos, disponibles en formato electrónico (anexoII.pdf).

ANEXO III: Análisis de sensibilidad

Esquemas gráficos completos del análisis de sensibilidad de los criterios e índices de clasificación espectral, disponibles en formato electrónico (anexoIII.pdf).

ANEXO IV: Detalles de implementación

Pseudocódigo de las reglas de los sistemas basados en conocimiento, módulos específicos desarrollados para la implementación de las redes neuronales, etc., disponibles en formato electrónico (anexoIV.pdf).

Índice de figuras

Figura 1. Grabados de 1660 de los esquemas del mundo ptolomaico (geocéntrico) y copernicano (heliocéntrico) 2

Figura. 2. Telescopio de Galileo, conservado en el museo de Historia de la Ciencia de Florencia 3

Figura. 3. Astronomía Nova, trabajo más importante de Kepler en Astronomía -- Portada de Sidereus Nuncius de Galileo -- Tablas Alfonsíes -- Primera edición de los Principia de Newton que se conserva en la Wren Libray del Trinity College en Cambridge..... 4

Figura 4. Instrumento utilizado por Kirchhoff y Bunsen para la observación de los espectros 6

Figura 5. Espectro de una estrella de tipo B, en el que se aprecian líneas de absorción y de emisión 7

Figura 6. Diagrama H-R que muestra la relación entre la magnitud absoluta, la luminosidad y la temperatura efectiva de las estrellas..... 8

Figura 7. Esfera armilar, instrumento cuya invención se atribuye a Eratóstenes alrededor del 255 a. C. 20

Figura 8. Espectrógrafo Echelle, que utiliza redes con menos surcos por milímetro que las de los espectrógrafos de rejilla habituales 21

Figura 9. Esquema de funcionamiento de un espectrógrafo de rendija [Kaler 1989] 22

Figura 10. Espectroscopio del laboratorio de Bunsen, según el Queen Catalogue de Instrumentos para la Óptica Física de 1888..... 23

Figura 11. Espectro solar creado en el Observatorio McMath-Pierce. Las zonas oscuras muestran la absorción en la superficie de determinados gases y son conocidas como líneas espectrales 25

Figura 12. Espectro de un cuerpo negro 28

Figura 13. Tipos espectrales MK para estrellas en la secuencia principal 32

Figura 14. Tipos espectrales O4-A5 [Gray 2010] 33

Figura 15. Diagrama H-R, traducido al español [Zeilik 1993]..... 40

Figura 16. Espectro de tipo F79 comparado con el espectro patrón correspondiente al mismo tipo espectral del catálogo utilizado como referencia 46

Figura 17. Espectro IRAS 17476-4446 (en negro) comparado con el patrón correspondiente a una estrella de tipo espectral B35I (azul)..... 47

Figura 18. Espectro IRAS 13203-5917, comparado con el patrón correspondiente al tipo espectral A79I, antes y después del desenrojecimiento..... 48

Figura 19. Esquema general del sistema híbrido de análisis y clasificación automática de espectros estelares 59

Figura 20. Esquema de las diferentes funcionalidades del módulo de análisis espectral 62

Figura 21. Resumen del formato estándar de los datos de entrada del sistema 63

Figura 22. Comparación entre un espectro problema de tipo A y su correspondiente espectro estándar antes y después de las operaciones de escalado 65

Figura 23. Interpolación de zonas sin datos de flujo para un espectro de tipo G 67

Figura 24. Ejemplo de caracterización matemática y estadística de un espectro A2 69

Figura 25. Estimación de la energía espectral de la banda alrededor de 5940 Å para un espectro de tipo M mediante el algoritmo implementado en el sistema 72

Figura 26. Representación de las tres medidas diferentes consideradas (I, EW y FWHM) para líneas de absorción/emisión en espectros de tipos espectrales A0 y B1, respectivamente¡ 74

Figura 27. Ajuste del continuo local para tres líneas de absorción de un espectro de tipo G8 utilizando el método basado en el signo de la derivada primera 76

Figura 28. Ajuste del continuo local para un espectro de tipo G8 utilizando el método moving average de 5 puntos 77

Figura 29. Procedimiento para estimar el continuo local basado en intervalos para un espectro de tipo A4 79

Figura 30. Ajuste del continuo local para un espectro de tipo G8 utilizando el método final propuesto 79

Figura 31. Técnicas y funcionalidades incluidas en el módulo de clasificación/parametrización automática 85

Figura 32. Distribución de tipos espectrales y clases de luminosidad del conjunto de espectros seleccionados. Los colores muestran los distintos catálogos de referencia 91

Figura 33a-d. Índices para la clasificación MK. Flujo energético en función del tipo y la luminosidad a) CaII, H 3933 Å; b) CaII, K 3968 Å; c) HeI 4026 Å; d) HIγ 4340 Å 98

Figura 34a-d. Índices para la clasificación MK. Flujo energético en función del tipo espectral y la luminosidad a) HIβ 4861 Å; b) HIδ 4102 Å/HeI 4471 Å; c) Banda G 4300 Å; d) TiO 5840 Å 100

Figura 35a-d. Índices para la clasificación MK. Flujo energético en función del tipo espectral y la luminosidad a) TiO 4950 Å; b) TiO 6225 Å; c) TiO 4950 Å+TiO 6225 Å; d) Energía espectral 102

Figura 36a-f. Índices descartados por su baja resolución en tipos espectrales y/o niveles de luminosidad a) FeI 4045Å/FeII 4173Å; b) TiO 4435Å; c) TiO 5805Å; d) MgII 4481Å/FeI 4385Å; e) TiO 5622Å; f) HIγ 4340Å 104

Figura 37. Modelos estructurales de los sistemas expertos de 1ª y 2ª generación 111

Figura 38. Tipos espectrales que discrimina el índice de clasificación TiO 6225 116

Figura 39. Representación formal del conocimiento descriptivo de la clasificación espectral por medio de frames 119

Figura 40. Funciones de pertenencia para los conjuntos difusos relacionados con la variable altura de una persona 133

Figura 41. Arquitectura básica de un sistema experto difuso 134

Figura 42. Ejemplo de los dos tipos principales de mecanismos de inferencia difusos (Mamdani-Assilian y Takagi-Sugeno), suponiendo que en las premisas de las reglas se emplea el operador AND 137

Figura 43. Ejemplo del proceso de inferencia difusa sobre tres reglas del sistema experto diseñado para la clasificación automática de espectros estelares en el sistema MK 139

Figura 44. Funciones asociadas a la variable de salida tipo espectral y al conjunto difuso intenso definido sobre la variable de entrada índiceCaIIK 140

Figura 45. Componentes principales del sistema basado en el conocimiento diseñado para obtener clasificaciones MK de las estrellas 145

Figura 46. Pseudocódigo de una de las reglas implementadas para obtener el tipo espectral en estrellas tardías 153

Figura 47. Esquema en forma de árbol del proceso de razonamiento del sistema experto de clasificación 156

Figura 48a-b. Razonamiento del sistema experto para las estrellas HD 33278 y HD 20023 del catálogo de Jacoby 1984, indicando la clasificación y el grado de confianza 157

Figura 49. Comparación de las fases de la técnica manual de clasificación con el sistema experto diseñado 159

Figura 50. Interfaz del sistema de clasificación con la opción de explicación y justificación de resultados 160

Figura 51. Comparación de la clasificación en subtipo entre los catálogos de referencia y el sistema experto, incluyendo la gráfica de discrepancias (error) entre ambos 170

Figura 52. Cuadro comparativo entre dos versiones del sistema experto, simple y difuso, y dos expertos humanos para los cuatro niveles de clasificación considerados 172

Figura 53. Cuadro comparativo del rendimiento del sistema experto original y la versión mejorada basada en redes de neuronas artificiales 176

Figura 54. Esquema general de una neurona artificial 181

Figura 55. Funciones de normalización sigmoidal para los patrones de entrada de las redes neuronales de clasificación diseñadas 190

Figura 56. Esquema del algoritmo de aprendizaje backpropagation para las redes MLP 194

Figura 57. Rendimiento de los algoritmos backpropagation para las diferentes topologías consideradas 198

Figura 58. Estructura y entrenamiento de la red backpropagation óptima para la clasificación en tipo espectral 201

Figura 59. Rendimiento comparado de las redes backpropagation diseñadas para aceptar distintos conjuntos de patrones en la capa de entrada 205

Figura 60. Rendimiento comparado de las redes de subtipo entrenadas únicamente con el catálogo principal y añadiendo los espectros del catálogo secundario de referencia 207

Figura 61. Rendimiento comparado de las distintas redes backpropagation diseñadas para obtener la luminosidad MK de las estrellas 209

Figura 62. Arquitectura clásica de las redes neuronales basadas en funciones de base radial 213

Figura 63. Rendimiento de las redes RBF diseñadas para aceptar distintos tipos de patrones de entrada 219

Figura 64. Rendimiento de las redes RBF de grupos espectrales entrenadas con el catálogo principal y añadiendo los espectros del catálogo secundario 221

Figura 65. Rendimiento comparado de las dos redes RBF diseñadas para obtener la luminosidad MK de las estrellas 221

Figura 66. Arquitectura clásica de las redes de Kohonen 223

Figura 67. Rendimiento comparado de las dos redes SOM diseñadas para obtener la luminosidad MK de las estrellas 229

Figura 68. Esquema conceptual de la red de redes diseñada para realizar la clasificación MK completa 231

Figura 69. Esquema conceptual de la red global diseñada para la clasificación MK completa 232

Figura 70. Implementación en C++ de los modelos neuronales para la clasificación en subtipo y luminosidad 234

Figura 71. Análisis del rendimiento de las redes neuronales de clasificación 236

Figura 72. Análisis del rendimiento de los modelos neuronales para la clasificación final del subtipo en los dos rangos espectrales 237

Figura 73. Comparación de la clasificación en subtipo espectral entre los catálogos de referencia y el modelo neuronal óptimo, incluyendo la gráfica de discrepancias (error) entre ambos 239

Figura 74. Análisis del rendimiento de los modelos neuronales para la clasificación final de la luminosidad en los dos rangos espectrales 240

Figura 75. Cuadro comparativo de los resultados del modelo neuronal final óptimo y de los dos expertos humanos para los cuatro niveles de clasificación considerados 242

Figura 76. Esquema general del funcionamiento de los algoritmos de agrupamiento 247

Figura 77. Organigrama de funcionamiento del algoritmo de agrupamiento K-means 253

Figura 78. Organigrama de funcionamiento del algoritmo de clustering ISODATA 257

Figura 79. Organigrama de funcionamiento del algoritmo de clustering Max-Min 258

Figura 80. Organigrama de funcionamiento del algoritmo de clustering FKNN 261

Figura 81. Ejemplo de resultados del agrupamiento en clases para el tipo espectral (en negro) y de la clasificación de nuevos espectros (en azul) mediante el algoritmo de clustering K-means en su versión estándar (sin selección previa de centroides), utilizando patrones de entrada formados por índices espectrales y considerando 6 clases iniciales 262

Figura 82. Implementación en C++ de los algoritmos de clustering para la clasificación en tipo y luminosidad 265

Figura 83. Análisis del rendimiento de los algoritmos de clustering para la clasificación en tipo espectral (3 y 6 clases iniciales), subtipo espectral (30 y 60 clases iniciales) y luminosidad (3 y 5 clases iniciales) utilizando espectros completos como patrones de entrada 268

Figura 84. Análisis del rendimiento de los algoritmos de clustering para la clasificación en tipo espectral (3 y 6 clases iniciales) y subtipo espectral (30 y 60 clases iniciales) utilizando zonas espectrales relevantes como patrones de entrada 269

Figura 85. Análisis del rendimiento de los algoritmos de clustering para la clasificación en tipo espectral (3 y 6 clases iniciales), subtipo espectral (30 y 60 clases iniciales) y nivel de luminosidad (3 y 5 clase iniciales) utilizando un conjunto de 25 índices espectrales como patrones de entrada.....271

Figura 86. Comparación de la clasificación en subtipo espectral entre los catálogos de referencia y el algoritmo de clustering óptimo donde se incluye la gráfica de discrepancias (error) entre ambos ..274

Figura 87. Cuadro comparativo de los resultados del algoritmo de clustering óptimo y de los dos expertos humanos para los niveles de clasificación considerados 275

Figura 88. Estudio de la influencia de la elección de las funciones de pertenencia en el agrupamiento de los espectros estelares en tipos espectrales y niveles de luminosidad con los algoritmos de clustering FCM y FKNN 281

Figura 89. Estudio de la influencia de algunos índices espectrales en los distintos niveles de clasificación (global, tipo, subtipo y luminosidad) con las versiones optimizadas de los algoritmos de agrupamiento.....284

Figura 90. Cuadro comparativo del rendimiento de los algoritmos de clustering originales y de las versiones perfeccionadas de los mismos 286

Figura 91. Arquitectura básica de una red de neuronas convencional y su equivalente funcional...289

Figura 92. Arquitecturas original y simplificada de una red funcional separable 299

Figura 93. Arquitectura básica de la red funcional asociativa.....301

Figura 94. Análisis del rendimiento del modelo funcional separable en la clasificación del tipo espectral utilizando para el ajuste familias funcionales de tipo polinómico 306

Figura 95. Arquitectura de la red funcional separable para la clasificación espectral 308

Figura 96. Arquitectura de la red funcional asociativa para la clasificación espectral.....309

Figura 97. Implementación en C++ de las redes funcionales de clasificación en tipo espectral y luminosidad 310

Figura 98. Análisis del rendimiento de las redes funcionales para los distintos niveles de clasificación espectral (global, tipo, subtipo y luminosidad) utilizando 25 índices espectrales como patrones de entrada.....313

Figura 99. Comparativa de la clasificación en subtipo espectral entre los catálogos de referencia y la red funcional separable óptima en la que se incluye la gráfica de discrepancias entre ambos 315

Figura 100. Análisis del rendimiento de la red funcional óptima y de los dos expertos humanos para los cuatro niveles de clasificación considerados 317

Figura 101. Análisis de rendimiento de las redes funcionales entrenadas con los catálogos espectrales principal y secundario 319

Figura 102. Análisis de rendimiento de las dos redes funcionales implementadas para la clasificación en subtipo espectral.....321

Figura 103 Análisis de sensibilidad parcial de algunos índices (ratios y energía espectral) para el subtipo espectral 323

Figura 104. Estudio de la influencia de algunos índices espectrales en los distintos niveles de clasificación (global, tipo, subtipo y luminosidad) con las redes funcionales del modelo separable.....324

Figura 105. Cuadro comparativo del rendimiento de las redes originales del modelo separable y de las versiones perfeccionadas de las mismas.....327

Figura 106. Análisis final del rendimiento de los métodos computacionales que se han trasladado a la implementación desglosado por nivel de clasificación (global, tipo, subtipo y luminosidad) 332

Figura 107. Interfaz del sistema híbrido desarrollado mostrando la opción de clasificación completa con todas las técnicas disponibles.....336

Figura 108. Interfaz del sistema híbrido desarrollado mostrando la opción de clasificación combinada con las técnicas de clasificación óptimas.....337

Figura 109. Análisis final del rendimiento del primer enfoque híbrido propuesto y contraste con los métodos óptimos de las técnicas consideradas, desglosado por nivel de clasificación estelar.....338

Figura 110. Fotografía del telescopio NOT en el crepúsculo, en su localización cercana a la Caldera de Taburiente (La Palma) 348

Figura 111. Fotografías del telescopio NOT (izquierda, autor M. Gålfalk) y del espectrógrafo ALFOSC en su base (derecha, autor R. Rekola) 349

Figura 112. Curva de eficiencia de 4 redes de difracción (grismas) utilizadas en el telescopio óptico nórdico (NOT).....350

Figura 113. Ejemplo de un arco de calibración en longitud de onda mostrando las líneas de emisión bien distribuidas en la dirección espectral 352

Figura 114. Imagen espectral esquemática mostrando la dispersión de la luz de una estrella en la dirección espectral (eje OY), y la contribución de tres líneas de cielo (la dirección espacial es la del eje OX) 353

Figura 115. Composición del catálogo de estrellas estándares y de la base de datos de evaluación del sistema híbrido II.....354

Figura 116a-b. Índices para la clasificación MK a partir de estrellas estándares. Flujo energético como función del tipo y la luminosidad. a) HI 4102 Å; b) TiO 6208 Å 360

Figura 117. Esquema básico de un sistema híbrido neuro simbólico 367

Figura 118. Esquema conceptual del modelo híbrido neuro-simbólico para la clasificación estelar en el sistema MK.....370

Figura 119. Esquema en forma de árbol del proceso de razonamiento del sistema experto inicial de la arquitectura híbrida del segundo enfoque automático propuesto para la clasificación estelar 376

Figura 120a-b. Ejemplos de razonamiento del sistema experto para las estrellas HD 3817 y HD 10307 del catálogo NOAO-INDO-US indicando la clasificación y el grado de confianza de la misma....378

Figura 121. Interfaz de la herramienta de diseño y evaluación de redes neuronales artificiales XOANE [Ordoñez 2007]....382

Figura 122. Distribución de metalicidades en la base de datos de referencia MK y en el conjunto de evaluación procedente del catálogo NOAO....384

Figura 123. Resultados del sistema híbrido II en subtipo espectral y luminosidad....387

Figura 124. Análisis final del rendimiento del segundo enfoque híbrido en contraste con los métodos óptimos de las técnicas consideradas, desglosado por nivel de clasificación....388

Figura 125. Interfaz del sistema híbrido desarrollado mostrando la opción de clasificación basada en un sistema neuro-simbólico....390

Figura 126. Estructura interna de una estrella similar al Sol (créditos: NASA)....394

Figura 127. Representación gráfica del concepto de longitud de la mezcla en una atmósfera convectiva....396

Figura 128. Modelo de atmósfera del Sol creado a partir de los modelos de R. Kurucz....398

Figura 129. Proceso básico de generación de un espectro sintético....399

Figura 130. Redistribución del flujo del azul al rojo en el espectro solar debida a la absorción de metales....402

Figura 131. Comparación entre un espectro real y el sintético generado correspondiente al mismo tipo....402

Figura 132. Rendimiento de la red óptima de estimación de la temperatura efectiva....412

Figura 133. Rendimiento de la red óptima de estimación de la gravedad efectiva....412

Figura 134. Resultados de la parametrización de temperatura y gráfica de errores del conjunto de espectros de evaluación....413

Figura 135. Implementación en C++ de los modelos neuronales para la parametrización espectral en temperatura y gravedad efectivas....414

Figura 136. Correspondencia entre tipos espectrales y Teff obtenida clasificando 289 espectros de la librería NOAO con el sistema híbrido y estimando la temperatura mediante la red neuronal propuesta....415

Figura 137. Diagrama E/R parcial de la base de datos astronómica diseñada....420

Figura 138. Componentes del patrón de diseño Model-View-Controller (MVC) [Gamma 1996]....422

Figura 139. Interfaz de gestión de usuarios de STARMIND....423

Figura 140. Funcionalidad de comparación entre espectros incluida en el módulo de visualización de la aplicación STARMIND....424

Figura 141. Funcionalidad de búsqueda por catálogo espectral incluida en el módulo de visualización de STARMIND 425

Figura 142. Resultados en forma de estadística de una consulta por catálogo espectral realizada a través de STARMIND 426

Figura 143. Información descriptiva obtenida como resultado de una consulta realizada sobre una estrella particular con STARMIND 427

Figura 144. Espectros disponibles en la base de datos de una estrella particular obtenidos como resultado de una consulta realizada con STARMIND 427

Índice de tablas

Tabla 1. Resumen de las características de los tipos espectrales del sistema MK 35

Tabla 2. Relación de algunos índices espectrales utilizados en la clasificación MK 81

Tabla 3. Distribución de tipos espectrales y luminosidades en el archivo digital de espectros para el desarrollo del sistema híbrido I 90

Tabla 4. Índices espectrales seleccionados para la clasificación con el primer sistema automático ... 95

Tabla 5. Análisis de sensibilidad de los índices de clasificación en el enfoque híbrido I 105

Tabla 6. Resultados del sistema experto para la clasificación global en temperatura 167

Tabla 7. Matriz de confusión inicial para el tipo espectral MK 168

Tabla 8. Matriz de confusión final para el tipo espectral MK 168

Tabla 9. Resultados del sistema experto para la clasificación en tipo espectral MK 169

Tabla 10. Resultados del sistema experto para la clasificación en subtipo espectral MK 169

Tabla 11. Resultados del sistema experto para la clasificación en luminosidad 171

Tabla 12. Resultados del estudio realizado para determinar el porcentaje de acuerdo entre los expertos y el sistema experto [Mosqueira 2000] 171

Tabla 13. Resultados del sistema experto para el tipo espectral desglosados por la fuente de procedencia 173

Tabla 14. Resultados del sistema experto para la luminosidad desglosados por la fuente de procedencia 173

Tabla 15. Composición de los conjuntos espectrales para las redes de tipo espectral 188

Tabla 16. Composición de los conjuntos de espectros para las redes de luminosidad 188

Tabla 17. Evolución del entrenamiento de las redes backpropagation de tipo espectral variando los parámetros η y μ 200

Tabla 18. Resultados de la red backpropagation óptima de clasificación en tipo espectral MK 202

Tabla 19. Evolución del entrenamiento de las redes backpropagation de clasificación global 202

Tabla 20. Índices espectrales con mayor influencia en la discriminación de tipos espectrales según el análisis de sensibilidad realizado sobre los pesos de las redes backpropagation momentum 203

Tabla 21. Rendimiento de las redes diseñadas con los distintos conjuntos de índices espectrales .. 204

Tabla 22. Resultados de las redes backpropagation momentum óptimas para la clasificación en subtipo espectral 206

Tabla 23. Resultados de las redes backpropagation momentum óptimas para la clasificación en subtipo espectral añadiendo al conjunto de entrenamiento los espectros procedentes del catálogo secundario [Prugniel 2001] 208

Tabla 24. Resultados de la red global para la clasificación en luminosidad, sin conocer previamente el tipo espectral 210

Tabla 25. Resultados de las redes para la clasificación en luminosidad, conociendo previamente el tipo espectral 210

Tabla 26. Rendimiento y evolución del entrenamiento para las redes RBF de tipo espectral diseñadas con las diferentes topologías consideradas 215

Tabla 27. Resultados de la red RBF óptima de clasificación en tipo espectral MK para los espectros de los catálogos principales de referencia 217

Tabla 28. Evolución del entrenamiento de las distintas topologías de redes RBF consideradas para la clasificación global en temperatura 218

Tabla 29. Características del entrenamiento y resultados de las redes RBF óptimas de subtipo espectral 220

Tabla 30. Evolución del entrenamiento y rendimiento para las redes de Kohonen de tipo espectral con diferentes tamaños del mapa 225

Tabla 31. Evolución del entrenamiento para las redes de Kohonen de clasificación de parejas de tipos espectrales para distintos tamaños del mapa y diferentes valores de los parámetros 227

Tabla 32. Características del entrenamiento y resultados de las redes SOM óptimas de clasificación del subtipo espectral 228

Tabla 33. Arquitecturas neuronales implementadas para efectuar la clasificación completa en el sistema MK 233

Tabla 34. Matriz de confusión inicial para tipo espectral en el modelo neuronal óptimo 238

Tabla 35. Matriz de confusión final para tipo espectral en el modelo neuronal óptimo 238

Tabla 36. Resultados del estudio realizado para determinar el porcentaje de acuerdo entre los expertos y el modelo neuronal final 243

Tabla 37. Resultados del modelo neuronal óptimo para el subtipo espectral desglosados por la fuente de procedencia 244

Tabla 38. Resultados del modelo neuronal óptimo para la luminosidad desglosados por la fuente de procedencia 244

Tabla 39. Distribución de tipos espectrales en los conjuntos espectrales de los algoritmos estadísticos de agrupamiento 248

Tabla 40. Distribución de clases de luminosidad en los conjuntos espectrales de los algoritmos de agrupamiento 248

Tabla 41. Matriz de confusión inicial para la clasificación en tipo espectral con el algoritmo de clustering estadístico óptimo 272

Tabla 42. Matriz de confusión final para la clasificación en tipo espectral con el algoritmo de clustering estadístico óptimo 272

Tabla 43. Resultados del estudio realizado para determinar el porcentaje de acuerdo entre los expertos y el algoritmo de clustering óptimo....276

Tabla 44. Resultados del algoritmo de clustering óptimo para el tipo espectral desglosados por la fuente de procedencia....277

Tabla 45. Resultados del algoritmo de clustering óptimo para la luminosidad desglosados por la fuente de procedencia....277

Tabla 46. Estudio de la influencia de la selección inicial de centroides en el agrupamiento de los espectros estelares en tipos espectrales y niveles de luminosidad con los diferentes algoritmos de clustering....279

Tabla 47. Estudio de la influencia de los parámetros configurables de cada algoritmo en el agrupamiento de los espectros estelares en tipos espectrales y niveles de luminosidad 280

Tabla 48. Distribución de tipos espectrales en los conjuntos espectrales de las redes funcionales de clasificación....294

Tabla 49. Distribución de clases de luminosidad en los conjuntos espectrales de las redes funcionales de clasificación 294

Tabla 50. MSE de entrenamiento y de validación para las familias funcionales no polinómicas en el modelo separable....304

Tabla 51. MSE de entrenamiento y de validación para las familias funcionales polinómicas en el modelo separable....307

Tabla 52. Matriz de confusión inicial para el tipo espectral con la red funcional óptima del modelo separable....314

Tabla 53. Matriz de confusión final para el tipo espectral con la red funcional óptima del modelo separable....314

Tabla 54. Resultados del estudio realizado para determinar el porcentaje de acuerdo entre los expertos y la red separable óptima....316

Tabla 55. Resultados de la red funcional separable óptima para el tipo espectral desglosados por la fuente de procedencia 317

Tabla 56. Resultados la red funcional separable óptima para la luminosidad desglosados por la fuente de procedencia 318

Tabla 57. Composición de los conjuntos de espectros para las redes funcionales de subtipo espectral ampliadas....320

Tabla 58. Composición de los conjuntos de espectros para las redes funcionales de luminosidad ampliadas....320

Tabla 59. Rendimiento de las redes funcionales diseñadas con los distintos conjuntos de índices espectrales....326

Tabla 60. Análisis de resultados del estudio ciego para evaluar el porcentaje de acuerdo entre los expertos humanos, el primer sistema híbrido propuesto y las diferentes técnicas óptimas de clasificación....339

Tabla 61. Rendimiento y resultados del primer modelo de sistema híbrido y de las técnicas óptimas que lo componen para la estimación del tipo espectral desglosados por la fuente de procedencia de los espectros....340

Tabla 62. Resultados del primer modelo de sistema híbrido y de las técnicas óptimas que lo componen para la estimación del nivel de luminosidad desglosados por la fuente de procedencia de los espectros....340

Tabla 63. Distribución de tipos espectrales y clases de luminosidad del catálogo final de estrellas estándares (negro) y de la base de datos espectrales de evaluación (azul)....355

Tabla 64. Índices espectrales seleccionados para la clasificación MK en el enfoque híbrido II....361

Tabla 65. Reglas de decisión jerárquicas y porcentajes de conformidad para la clasificación MK en tipos espectrales....375

Tabla 66. Topología e índices espectrales empleados en las redes de clasificación en subtipo espectral y luminosidad del sistema híbrido II....380

Tabla 67. Conjuntos de entrenamiento y validación empleados en las redes de clasificación en subtipo espectral del sistema híbrido II....381

Tabla 68. Matriz de confusión inicial del sistema híbrido final para el tipo espectral MK....385

Tabla 69. Matriz de confusión final del sistema híbrido final para el tipo espectral MK....385

Tabla 70. Análisis de resultados del estudio ciego efectuado para evaluar el porcentaje de acuerdo entre los expertos humanos, el segundo sistema híbrido propuesto y las diferentes técnicas óptimas de clasificación....389

Tabla 71. Combinación de parámetros atmosféricos empleada para la generación de la batería de espectros sintéticos con el programa de síntesis espectral SPECTRUM....405

Tabla 72. Diferentes topologías de las redes backpropagation momentum consideradas para la parametrización de la temperatura efectiva (Teff) y de la gravedad (log g)....407

Tabla 73. Composición de los conjuntos espectrales para las redes de parametrización automática desglosados por rango de temperaturas efectivas....408

Tabla 74. Resultados obtenidos con las redes neuronales de parametrización estelar automática sobre los diferentes conjuntos de evaluación [Silva 1992] [Pickles 1998] [Valdes 2004], desglosados por rango de temperaturas efectivas....411

Tabla 75. Calibración propia entre tipo espectral MK y temperatura efectiva....415

Glosario

ADC	Astronomical Data Center
ALFOSC	Andalucia Faint Object Spectrograph and Camara
API	Aplication Programming Interface
ASCII	American Standard Code for Information Interchange
BP	BackPropagation
CCD	Charge-Copy Device
CDS	Centre de Données astronomiques de Strasbourg
DLL	Dynamic Link Library
EEM	Espectro ElectroMagnético
EMYCIN	Empty MYCIN
ESA	European Space Agency
EW	Equivalent Wavelength
FCM	Fuzzy C-Means
FITS	Flexible Image Transport System
FKNN	Fuzzy K-Nearest Neighbour
FWHM	Full Width at Half Maximum
GAIA	Global Astrometric Interferometer for Astrophysics
HD	Henry Draper Catalogue
HNSS	Hybrid-Neuro Symbolic Systems
IA	Inteligencia Artificial
IAC	Instituto de Astrofísica de Canarias
IFA	Institute for Astronomy
IRAF	Interactive data Reduction and Analysis Facility
IRAS	Infrared Astronomical Satellite
ISODATA	Iterative Self-Organizing Data Analysis Tecnique
J2EE	Java 2 Enterprise Edition
LHS	Left Hand Side
LISP	LISt Processor
LTE	Local thermodynamic equilibrium:
Matlab	Matrix Laboratory
MF	Membership Function
MK	Sistema Morgan-Keenan
MLP	Multi-Layer Perceptron
MSE	Match-Select-Execute
MSE	Mean Square Error

MVC	Model-View-Controller
NIR	Near-Infrared
NLTE	No-Local thermodynamic equilibrium:
NOAO	National Optical Astronomy Observatories
NOT	Nordic Optical Telescope
OMT	Object Modeling Technique
OPS/R2	Official Production System Release 2
PCA	Principal Component Analysis
PNN	Probabilistic Neural Networks
PROLOG	PROGrammation en LOGique
RBF	Radial Basis Function
RF	Redes Funcionales
RHS	Righ Hand Side
RNA	Redes de Neuronas Artificiales
SBC	Sistemas Basados en el Conocimiento
SDSS	Sloan Digital Sky Survey
SE	Sistema Experto
SNNS	Stutgart Neural Netwrok Simulator
SNR	Signal to Noise Ratio
SOAP	Simple Object Access Protocol
SOM	Self-Organizing Maps
SQL	Standard Query Language
SSE	Sum Square Error
SVG	Scalable Vector Graphics
SVO	Spanish Virtual Observatory
UML	Unified Modeling Language
WSDL	Web Service Description Language
XOANE	eXtensive Object-oriented Artificial Neural Networks Engine