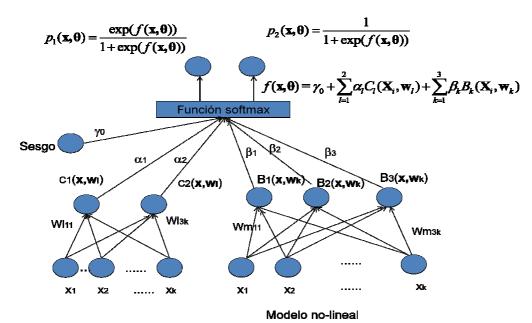
Ejercicio 1) Dado el siguiente modelo general de red neuronal, construir uno específico donde haya dos nodos en capa oculta de tipo sigmoidal y dos de tipo unidad producto. Considerar que k=2.

Con la arquitectura anterior, poner valores a las conexiones entre [-10 y 10] y justificar a que clase pertenecería un patrón cuyo vector de variables independientes es de la forma (-2,2)^T



La probabilidad de pertenencia a la clase positiva es

$$p_1(\mathbf{x}, \mathbf{\theta}) = \frac{\exp(f(\mathbf{x}, \mathbf{\theta}))}{1 + \exp(f(\mathbf{x}, \mathbf{\theta}))}$$

siendo

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{\theta}) = \gamma_0 + \sum_{l=1}^{2} \alpha_l C_l(\mathbf{X}_i, \mathbf{w}_l) + \sum_{k=1}^{3} \beta_k B_k(\mathbf{X}_i, \mathbf{w}_k)$$

Solución.- Si, por ejemplo, construimos la función
$$f(\mathbf{x}, \mathbf{\theta}) = 3 + 2 \frac{1}{1 + e^{-2 + 4x_1 - 2x_2}} - \frac{1}{1 + e^{-3 - 2x_1 - x_2}} + 4x_1^2 x_2^{-1} - 7x_1^3 x_2$$

esta tiene dos nodos ocultos con unidades sigmoides y dos nodos ocultos con unidades producto Si sustituimos los valores del patrón (-2,2) tenemos que

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{\theta}) = 3 + 2\frac{1}{1 + e^{-2 - 8 - 4}} - \frac{1}{1 + e^{-3 + 4 - 2}} + 4(-2)^2 \frac{1}{2} - 7(-2)^3 2 = 124,27$$

$$P(X=\text{Clase positiva}) = \frac{1}{1 + e^{-124,27}} = 1$$

Cuestión 2) Explique brevemente en qué consiste el algoritmo de retropropagación del error en modelos de redes neuronales. Analice el significado de la siguiente regla de actualización de pesos en modelos de redes neuronales.

$$w_k = w_k + \Delta w_k$$
, donde $\Delta w_k = -\eta \frac{\partial E}{\partial w_k}$

¿Cómo se obtienen los valores del parámetro η? ¿Qué significado tiene?

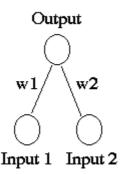
César Hervás Martínez Pedro A. Gutiérrez Peña

Ejercicio 3.- Considere una red neuronal simple compuesta de dos entradas conectadas a una unidad de salida única (Ver Figura). La salida de la red se determina mediante el cálculo de una suma ponderada de sus dos entradas, I₁ e I₂, y la comparación de este valor con un umbral. Si la entrada de red (net) es mayor que el umbral, la salida es 1, de lo contrario es 0. Matemáticamente, podemos resumir el cálculo realizado por la unidad de salida como sigue:

$$net = w_1I_1 + w_2I_2$$

si net > 8 entonces o = 1, en otro caso o = 0.

Input 1	Input 2	Output
1	1	1
1	0	0
0	1	0
0	0	0



Encuentre un umbral y unos valores para los coeficientes del modelo de forma tal que se pueda implementar la función AND.

Si ahora tenemos que el patrón (0.0) es de la clase 1 (implementar la función XOR. ¿Es suficiente con el esquema de la Figura 1 o hay que utilizar un modelo diferente? Encuentre un modelo de red neuronal que implemente dicha función.

Cuestión 4) La siguiente ecuación que tipo de modelo representa? Explique lo que significan la función, variables y coeficientes que aparecen en el mismo. Construya el grafo del modelo ¿Cuál es su misión?

$$f(\mathbf{x}) = \gamma_0 + \sum_{j=1}^k \alpha_j x_j + \sum_{m=1}^3 \beta_m B_m(\mathbf{x_i}, \mathbf{w}_m),$$

siendo
$$B_m(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}_m) = \prod_{i=1}^p x_i^{w_{m,i}}$$

Ejercicio 5) Analice la siguiente ecuación propuesta como función objetivo, E, a minimizar en un modelo de red neuronal de regresión con multivariables dependientes indicando lo que significa cada sumando y cada variable. ¿Cómo se calcularía el valor \hat{y}_{lk} ?¿Para qué se pone el segundo sumando de la función objetivo?¿Qué ocurre si $w_{ij} << 1$, para todo i y j? ¿Y si $w_{ij} >> 1$, para todo i y j?

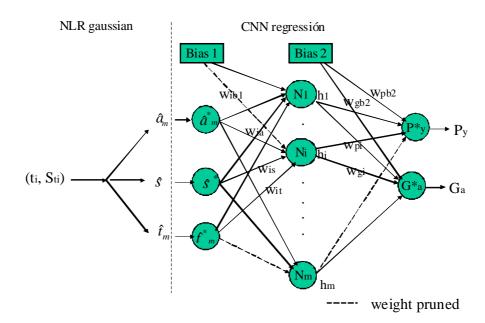
$$E = (1-\lambda) \frac{\sum_{l=1}^{n} \sum_{k=1}^{K} (y_{lk} - \hat{y}_{lk})^{2}}{nK} + \lambda \sum_{ij} \frac{w_{ij}^{2}}{1 + w_{ij}^{2}}$$

donde la suma sobre el subíndice l, implica suma sobre todos los patrones del conjunto de entrenamiento, y la suma sobre el subíndice k, implica suma sobre todos los nodos de salida, y donde λ es un parámetro determinado por el investigador.

Cuestión 6) ¿Que se entiende por sobre-entrenamiento de una red neuronal? ¿De qué manera se detecta? ¿Cómo se puede evitar? ¿Qué ventajas e inconvenientes tiene considerar un conjunto de validación? Poner un ejemplo en un problema de regresión.

Ejercicio 7) Dada la siguiente tabla sitúe los coeficientes del modelo en las conexiones del grafo del modelo de red. ¿Qué tipo de modelo de red es? ¿Qué estructura tiene? ¿Cuál es el valor asociado al patrón de entrada (2,5, 3,2, 0,7) sabiendo que los mínimos y máximos de las variables am, s y tm para los patrones de entrenamiento son [1-4] [2-4] [0-1] y de las variables [P] y [Q], [1-4] [2-5]?

 $\hat{a}_m^*, \hat{s}^* y \hat{t}_m^*$ son valores normalizados, entre 0,1 y 0,9, de las variables de entrada y [P]* y [GA]* valores normalizados, también entre 0,1 y 0,9, de las concentraciones de los ácidos Pyrogallol y Gálico que forman parte de los nodos de salida.



Procedimiento de estimación de los parámetros del modelo

Pedro A. Gutiérrez Peña

$$[P]^* = 1.25h_1 - 0.35h_2 + 0.09h_4 \qquad [GA]^* = -0.19 - 0.25h_1 + 1.74h_2 - 0.12h_3 - 0.34h_4$$

$$h_1 = \frac{1}{1 + \exp(2.45 - 2.18 \ \hat{a}_m^* - 1.82 \ \hat{s}^* - 0.93 \ \hat{t}_m^*)}$$

$$h_2 = \frac{1}{1 + \exp(0.59 - 3.6 \ \hat{a}_m^* + 2.07 \ \hat{s}^*)} \quad h_3 = \frac{1}{1 + \exp(0.79)}$$
César Hervás Martínez

Ejercicio 8.-

Se inscribieron los pacientes incluidos en la cohorte HERACLES. Esta cohorte prospectiva observacional incluyó pacientes infectados por el VIH con infección crónica activa por VHC en seguimiento en 19 centros de referencia en Andalucía. Se han utilizado diferentes modelos de redes neuronales de funciones de base para la clasificación automática de pacientes tratados o no tratados. Los pacientes que iniciaron la terapia se clasificaron como aquellos que i) cumplieron con los criterios, o ii) no cumplieron los criterios, según cumplieran o no los criterios para el tratamiento del VHC establecidos en el plan estratégico.

Las 17 características de los pacientes se pueden ver en la tabla Anexo. La variable a predecir es si recibió el paciente, o no, la terapia para la infección por hepatitis C, VHC. Las variables de entrada están normalizadas entre 1 y 2, mientras que la salida está entre 0 y 1.

a) Analice la salida adjunta del mejor modelo de red RBF utilizando el software NNEP. Escriba la ecuación del modelo para la base de datos VIH-VHC, determinando el nº de nodos de la capa oculta, así como el nº de enlaces. ¿El software hace selección de características? ¿El mejor modelo clasifica de forma similar ambas clases? ¿Es un modelo linealizable? ¿Es un modelo interpretable? ¿Cuáles son las variables que más incidencia tienen en el modelo de clasificación binaria?

Generation 50 - Methodology EP

-4.25 * (x4^1.21 * x9^-0.45 * x11^-0.90) +4.32 * (1)

Train CCR: 75.60

Train Confussion Matrix

Pred.	0	1	CCR	
Target	į			
0	1276	171	0.88	
1	364	382	0.51	
Test (CCR: 77	.24		

Test Confussion Matrix

Predicted		0	1	CCR
Target	-			
0	444	61	0.88	
1	109	133	0.55	

Solución.-

a) La ecuación del modelo de red PUNN es

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{\theta}) = 4.32 - 4.25 \frac{(\mathbf{x}_{4}^{*})^{1.21}}{(\mathbf{x}_{9}^{*})^{0.45} (\mathbf{x}_{11}^{*})^{0.90}}$$

El nº de nodos en capa oculta es 1 y el nº de conexiones 5. El software hace selección de características dado que sólo aparecen 3 de las 17 características iniciales (x_4, x_9, y_{11})

X4=Reciente categoría PWID (Persons who inject drugs), X9= Experiencia con tratamiento previo con Peg-IFN/RBV (la combinación de interferón pegilado (P-IFN) y ribavirina (RIB)) y X11=grado de fibrosis del hígado.

El mejor modelo en test tiene una sensibilidad para la clase 1 de 0.88 y para la clase 2 de 0.55, luego clasifica mejor la clase codificada como 0, esto es la clase de pacientes Tratados; donde la clase positiva es la de No Tratados.

Si, es un modelo linealizable dado que si tomamos logaritmos tenemos que

$$\log(4.32 - f(\mathbf{x}, \mathbf{\theta})) = \log(4.25) + 1.21\log(x_4^*) - 0.45\log(x_9^*) - 0.90\log(x_{11}^*)$$

de esta forma linealizamos el modelo y lo hacemos interpretable. La variable que más incide en el modelo es la x_4^* , seguida de la x_{11}^* y por último de la x_9^* . Las variables se han transformado en la forma

$$x_i^* = \frac{x_i - x_{\min}}{x_{\max} - x_{\min}} + 1$$

b) Las siguientes tablas son algunas de las salidas de 50 ejecuciones. La primera, son los resultados del conjunto de test, mientras que la segunda, son los resultados para el conjunto de entrenamiento. ¿Estamos sobreentrenando? ¿Con que iteración nos quedaríamos? Si

Test

Test				
	Iteración	Generación	CCR	Nº de enlaces
	29	50	76,57	8
	30	50	77,11	8
	31	50	76,44	10
	32	50	77,11	7
	33	50	77,24	6
		Media	76,78	10,58
	Des	sviación típica	0,63	3,52
T7 4	• 4			
Entr	enamiento			
Entr	Iteración	Generación	CCR	Nº de enlaces
Entr		Generación 50	CCR 75,15	Nº de enlaces
<u>Entr</u>	Iteración			
Entr	Iteración 29	50	75,15	8
Entr	Iteración 29 30	50 50	75,15 75,74	8 8
Entr	29 30 31	50 50 50	75,15 75,74 75,51	8 8
Entr	29 30 31 32	50 50 50 50	75,15 75,74 75,51 75,74	8 8 10 7
	29 30 31 32 33	50 50 50 50 50	75,15 75,74 75,51 75,74 75,60	8 8 10 7 6

Solución.- No estamos sobreentrenando dado que los resultados de CCR medio en test son superiores a los resultados medios de CCR en entrenamiento. Nos quedaríamos con la iteración 33 dado que tiene el CCR mayor y menor nº de conexiones

c) Dados los resultados obtenidos con modelos de unidades producto (PUNN), sigmoides (SUNN) y RBF (RBFNN). ¿Con que modelo se quedaría? Justifique la respuesta

	Media ± Desviación típica				Mejor modelo				
Modelo	CCR	MS	AUC	#con	CCR MS AUC #con Varial				
Arquitectura									Independientes
(17-1,2,4-1)									-
PUNN	$0.767 \pm$	0.559	0 .794	9 .46 ±	0.771	0.579	0.801	11	X2,X4,X5,X9,
	0.004	±0.012	±0 .003	1 .57					X11,X13,X14,X17
SUNN	$0.762 \pm$	0.563 ±	0.793 ±	14.10 ±	0.771	0.545	0.799	19	X2,X3,X4,X6,X7,

César Hervás Martínez Pedro A. Gutiérrez Peña

	0.006	0.014	0.002	1.63					X9,X10,X11,X13
RBFNN	0.768	$0.550 \pm$	$0.795 \pm$	7.36 ±	0.776	0.550	0.802	8	X3,X4,X8,
	± 0.004	0.008	0.005	1.83					X11,X13,X16

Solución.-

El mejor modelo en CCR, en AUC y en nº de conexiones es el obtenido con la tipología RBF; en cambio el mejor modelo en MS es el obtenido con la tipología PUNN, por tanto este modelo es el que mejor clasifica la clase minoritaria, esto es, la clase 1, los No Tratados.

APÉNDICE

Table 1. Characteristics of the Spanish HERACLES cohort (NCT02511496).

Description	Variable	Values	Occurrences	Percentag
		No	1287	43.77%
Met the Spanish criteria plan	X_1	Yes	1653	56.22%
	X_2	Lifetime PWID	2169	73.78%
PWID Category	X_3	OST PWID	339	11.53%
r with Caugory	X_4	Recent PWID	47	1.60%
	X_0	Never PWID	385	13.10%
n	v	No	2886	98.16%
Presented major psychiatric disorders	X_6	Yes	54	1.84%
Been in juil	X_7	No	2823	96.02%
веен ш јан	-0.7	Yes	117	3.98%
	X_8	Naïve to therapy	2053	69.83%
Previous treatment experience	X_0	With Peg-IFN/RBV	725	24.66%
	X_{10}	With DAAs/Peg-IFN/RBV	162	5.51%
		Stage F0-F1	898	30.54%
Liver fibrosis	X_{11}	Stage F2	475	16.16%
Liver morous	A11	Stage F3	787	26.77%
		Stage F4	780	26.53%
Gender	· V	Female	491	16.70%
Genger	X_{12}	Male	2449	83.30%
			min	18
Age	X_{13}	Continuous variable	max	76
			mean	48.95
	X_{14}	Genotype 1	1741	59.22%
HCV genotype	Xib	Genotype 2	27	0.92%
are v genotype	X_{16}	Genotype 3	484	16.46%
	$X_{1\tau}$	Genotype 4	Activar V	23.40%
40.004.004.0000000000000000000000000000	(40.000)	No	ACLIVAL V	33.60%
Received therapy for HCV infection	Output	Yes	Ir a Ct952 igu	