



INTRODUCCION A LAS REDES NEURONALES (II)

César Hervás-Martínez Grupo de Investigación AYRNA

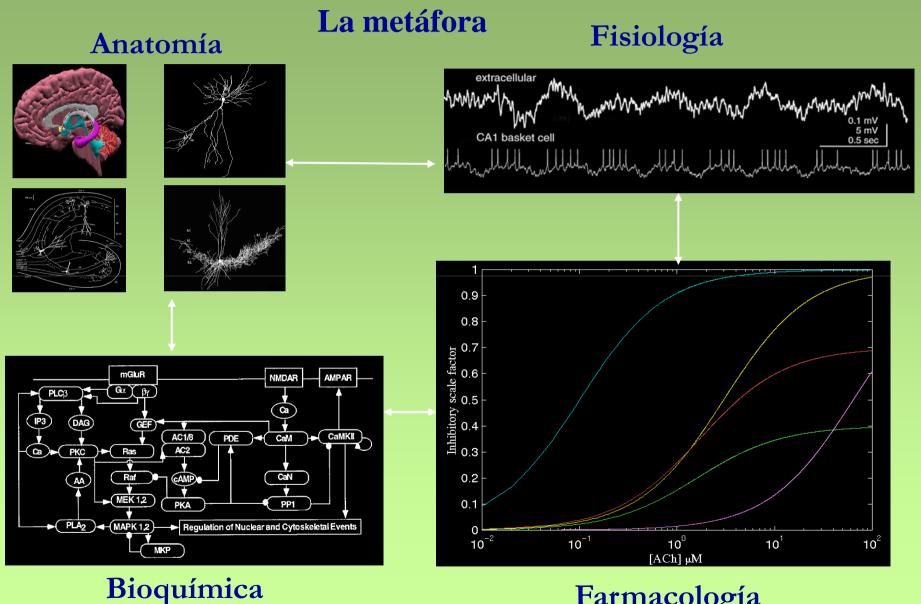
Departamento de Informática y Análisis Numérico Universidad de Córdoba Campus de Rabanales. Edificio Einstein. Email: chervas@uco.es

2019-2020



Modelado Biofísico y Neurociencia Computacional





Farmacología



COMPONENTES DE LA NEURONA

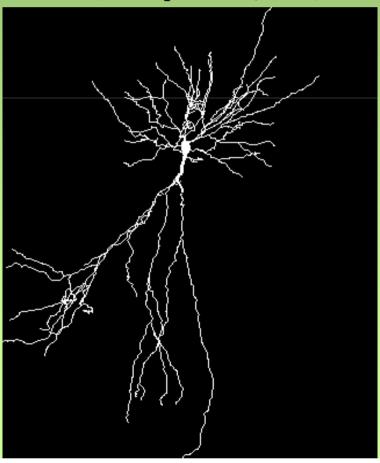


ESTRUCTURA ANATÓMICA

La metáfora

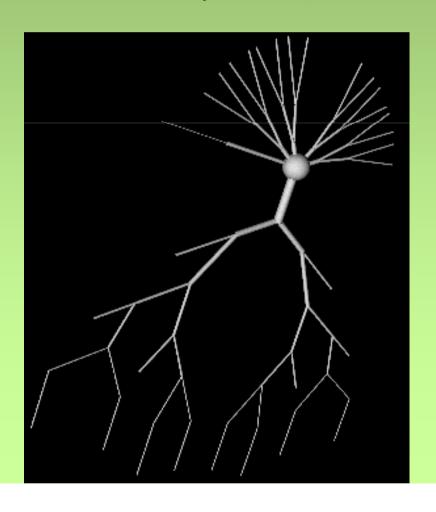
Morfología celular

celula piramidal biologica CA3 reconstruida por Turner *et al.* (*J Comp Neurol*, 1993)



Representación geométrica

Modelo CA3 de célula piramidal de Traub *et al.* (*J Physiol* 1994, 481:79-95)

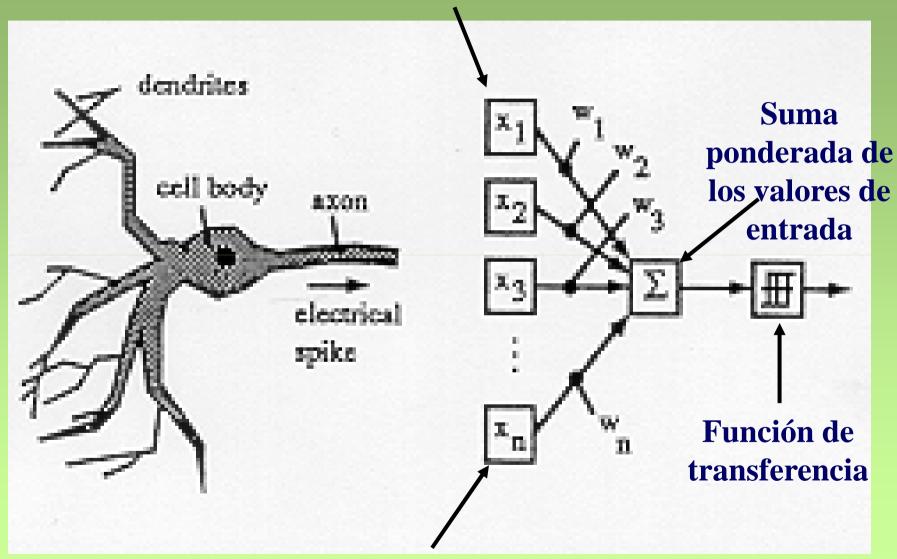




LA METÁFORA



Primer atributo de entrada



n-ésimo atributo de entrada



Que hace una red neuronal



• Las Redes Neuronales fijan hypersuperficies

mediante funciones de base

□Unidades Sigmoides

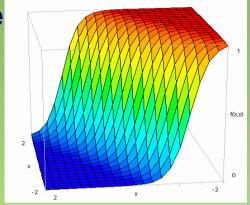
$$B_{i}(\mathbf{x}, \mathbf{W}) = \frac{1}{1 + e^{\left(\sum_{i=1}^{k} w_{ji} \cdot x_{i} + w_{j0}\right)}}$$

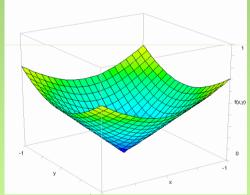
□Unidades de Base Radial

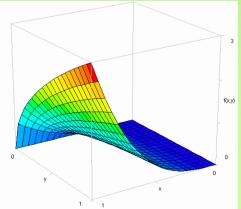
$$B_{j}(\mathbf{x}; (\mathbf{c}_{j} | r_{j})) = \exp\left(-\frac{\left\|\mathbf{x} - \mathbf{c}_{j}\right\|^{2}}{r_{j}^{2}}\right)$$

□Unidades Producto

$$B_i(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = \prod_{i=1}^k x_i^{w_{ji}}$$

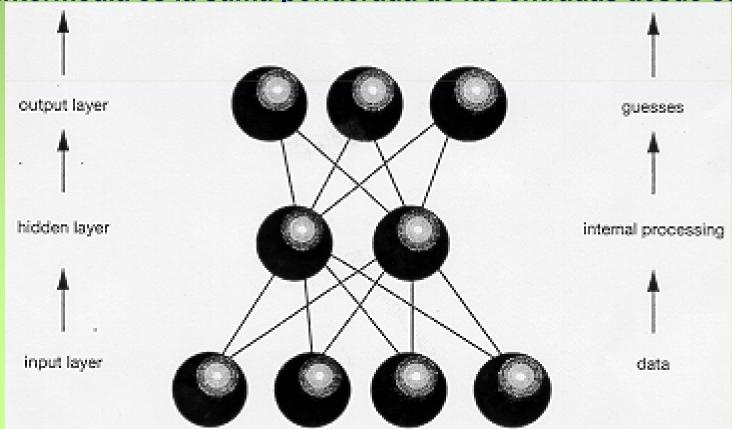








- Las Redes Neuronales están compuestas de
 - Nodos y Arcos
- En cada arco se especifica un peso.
- Cada nodo contiene una Función de Transferencia la cual transforma la entrada en una salida. La entrada al nodo de la capa intermedia es la suma ponderada de las entradas desde sus arcos.



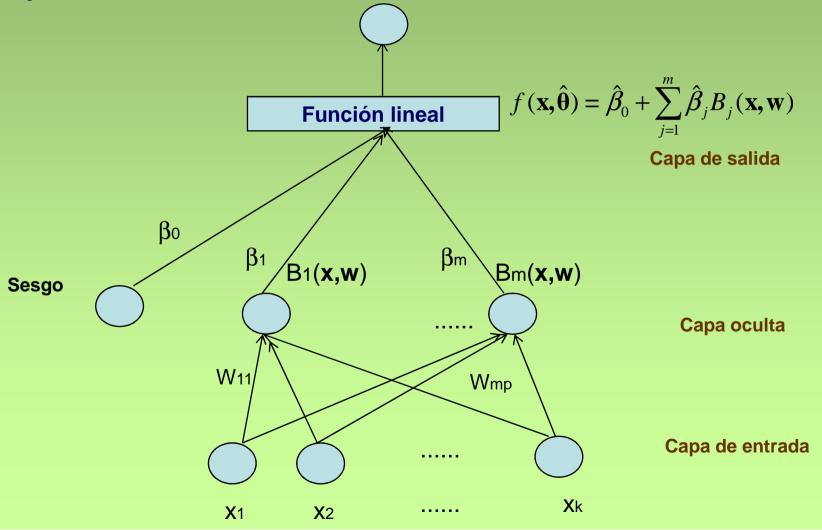


- Los nodos se agrupan en: una capa de entrada, una o más capas ocultas y una capa de salida.
- En la capa de entrada hay un nodo por cada atributo
- El número de nodos ocultos y de capas es configurable, es por ello un problema NP-completo.
- En la capa de salida hay un nodo por cada categoría o clase a predecir, a no ser que utilicemos salidas probabilísticas, esto es donde las salidas presentan la probabilidad de que un patrón pertenezca a esa clase, en este caso el número de salidas es el número de clases menos 1. Así, para un problema con dos clases con una salida es suficiente.





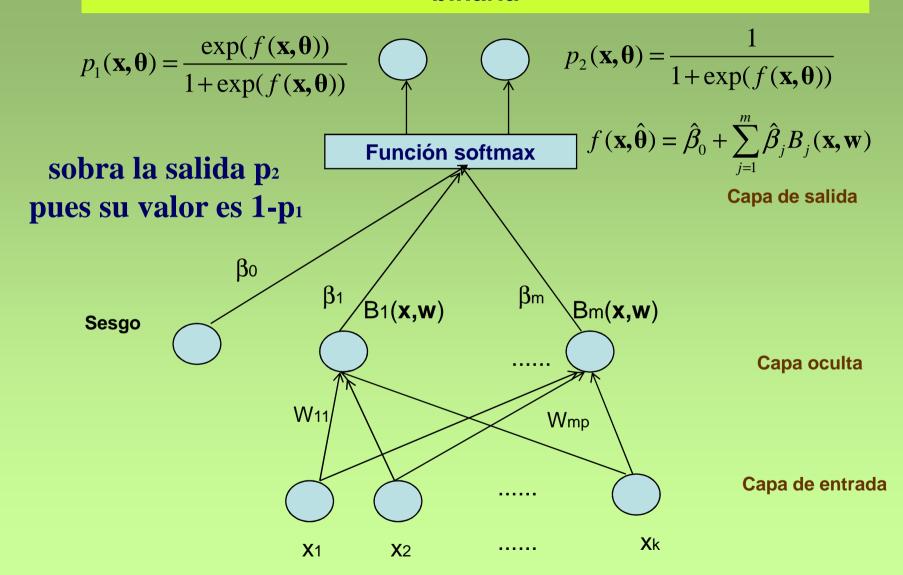
 Las redes neuronales pueden también predecir salidas numéricas continuas (regresión) en cuyo caso el número de nodos coincide con el número de variables dependientes a predecir, una, en el caso más sencillo.







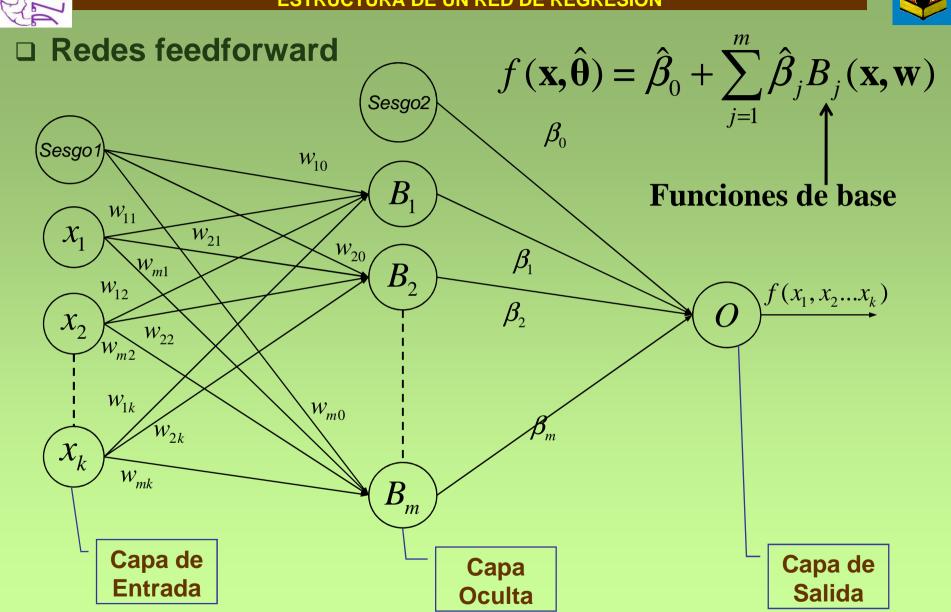
Representación de un modelo de red para clasificación binaria





ESTRUCTURA DE UNA RED NEURONAL ESTRUCTURA DE UN RED DE REGRESIÓN







MARGEN (PARA PREDICTORES CATEGÓRICOS, CLASIFICACIÓN)



- Para redes neuronales donde la salida (predicción) es categórica, hay un nodo de salida por cada categoría (clase) a ser predicha.
- La salida de cada nodo es por lo general la probabilidad de que un patrón de entrada pertenezca a dicha clase.
- El margen es la diferencia entre la probabilidad de pertenecer a la clase mas probable y la probabilidad de pertenecer a la segunda clase mas probable.



MARGEN (PARA PREDICTORES CATEGÓRICOS, CLASIFICACIÓN)



- Cuanto más grande sea el margen más grande será la confianza en la predicción.
- Por lo general si el margen es pequeño, se puede interpretar la red en el sentido de que "es incierto a que clase irá un nuevo patrón".
- El margen se puede utilizar también para determinar la fuerza de las predicciones categóricas realizadas mediante modelos de regresión logística, árboles de decisión, maquinas de vectores soporte, modelos Naive Bayes, u otras metodologías de clasificación.



FUNCIONES DENTRO DE UN NODO: FUNCIONES DE TRANSFERENCIA



 Cada nodo contiene una función de transferencia, en el caso de la sigmoide, convierte la suma ponderada de las entradas como la salida de la función mediante una sigmoide

$$B_{i}(\mathbf{x}, \mathbf{W}) = \frac{1}{1 + e^{\left(\sum_{i=1}^{k} w_{ji} \cdot x_{i} + w_{j0}\right)}}$$



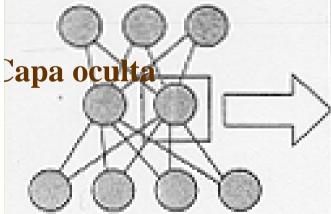
FUNCIONES DENTRO DE UN NODO: FUNCIONES DE TRANSFERENCIA



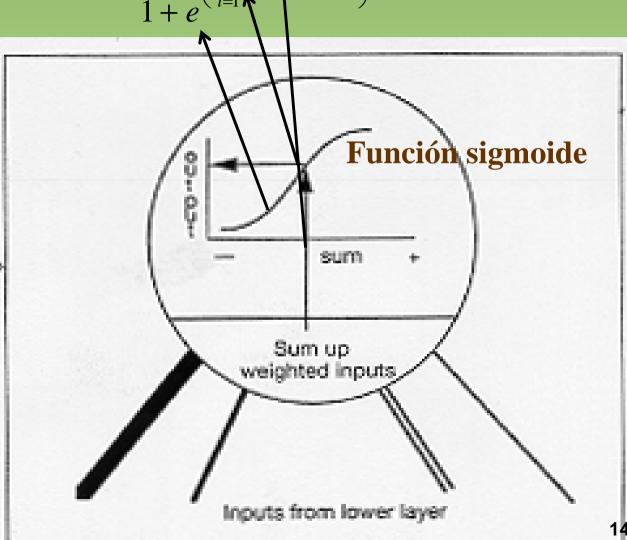
Función de transferencia sigmoide

$$B_{i}(\mathbf{x}, \mathbf{W}) = \frac{1}{1 + e^{\left(\sum_{i=1}^{k} w_{ji} \cdot x_{i} + w_{j0}\right)}}$$





Capa de entrada

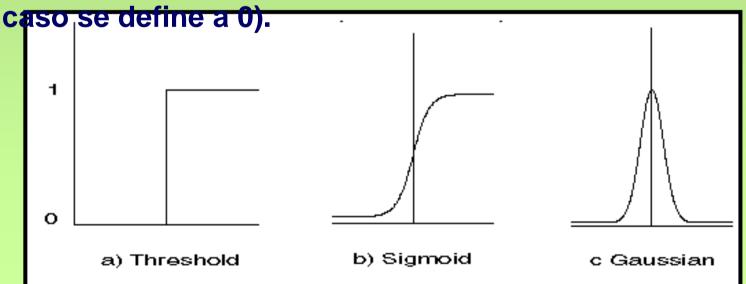




FUNCIONES DE TRANSFERENCIA



- Podemos utilizar una variedad de funciones de transferencia en los nodos de la capa oculta de la red.
 - Funciones de umbral (perceptron, figura a)
 - Funciones lineales y en rampa (para capa oculta en regresión, o en clasificación si luego se utiliza la función softmax)
 - Funciones sigmoides (e.g. Curvas logísticas, figura b)
 - Funciones de base radial (e.g. Gaussianas, figura c)
 - Estocásticas (el nodo de salida se define a 1 con probabilidad p dada por una función sigmoide, en otro





FUNCIONES DE TRANSFERENCIA



Lineal:
$$f_i(S) = cS$$
 siendo $S = \sum_{j=1}^k w_{ji} x_{ji}$

Umbral o salto:
$$f_i(S) = \begin{cases} 0 & \text{si } S \leq T_0 \\ 1 & \text{si } S > T_0 \end{cases}$$

Rampa:
$$f_i(S) = \begin{cases} 0 & \text{si } S < T_1 \\ \frac{S - T_1}{T_2 - T_1} & \text{si } T_1 \le S \le T_2 \\ 1 & \text{si } S > T_2 \end{cases}$$

Sigmoide:
$$f_i(S) = \frac{1}{1 + e^{-cS}}$$

Tangente Hiperbólica:
$$f_i(S) = \frac{1 - e^{-cS}}{1 + e^{-cS}}$$

Gaussiana:
$$f_i(S) = e^{-\frac{S^2}{v}}$$



FUNCIONES DE BASE



□ Distintas funciones de salida en capa oculta → □ Distintos modelos Redes Neuronales Unidad Sigmoide (US)

$$H_{j}(x_{1}, x_{2}...x_{k}) = \frac{1}{-\left(\sum_{i=1}^{k} w_{ji} \cdot x_{i} + w_{j0}\right)}$$

$$1 + e$$

$$Sesgo2$$

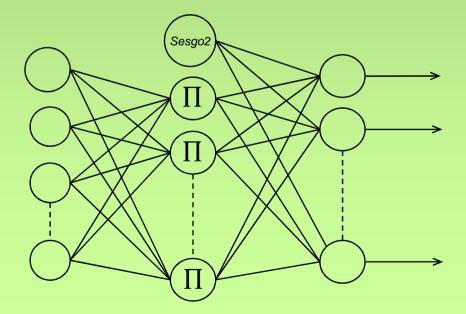


FUNCIONES DE BASE



□ Distintas funciones de salida en capa oculta → Distintos modelos de Redes Neuronales Unidades Producto (UP)

$$H_{j}(x_{1}, x_{2}...x_{k}) = \prod_{i=1}^{k} x_{i}^{w_{ji}}$$





Función de base Unidad Producto



$$\mathbb{F} = \left\{ f : A \subset \mathbb{R}^k \to \mathbb{R} : f(x_1, x_2, ..., x_k) \right\}$$

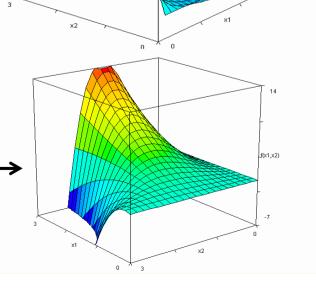
$$f(x_1, x_2, ..., x_k) = \left(\sum_{j=1}^{m} \beta_j \left(\prod_{i=1}^{k} x_i^{w_{ji}}\right)\right) + t$$

$$A = \{(x_1, x_2, ..., x_k) \in R^k : 0 < x_j\}$$

Ejemplos:

$$f_1(x_1, x_2) = x_1^{-1} x_2^{0,5} - 2x_1^{0,6} x_2^{0,3} + x_1 x_2$$

$$f_2(x_1, x_2) = x_1 x_2 - x_1^2 x_2^3 + 2x_1^2 x_2^2$$

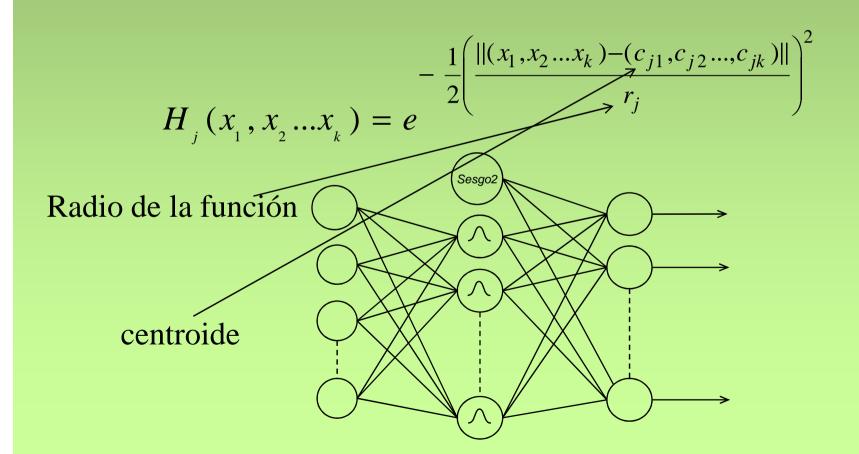




FUNCIONES DE BASE



□ Distintas funciones de salida en capa oculta → Distintos modelos de Redes Neuronales Funciones de Base Radial (RBF) Gaussiana





FUNCIONES DE BASE RADIAL



Funciones de Base Radial (RBF) Gaussiana

$$\Phi(\|\mathbf{x}_{i} - \mathbf{c}_{j}\|) = e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{\|(x_{1}, x_{2}...x_{k}) - (c_{j1}, c_{j2}..., c_{jk})\|}{r_{j}}\right)^{2}}, i=1,...,n, j=1,...,m$$

n, n° de patrones, m, n° de nodos en capa oculta, o n° de funciones de base radial

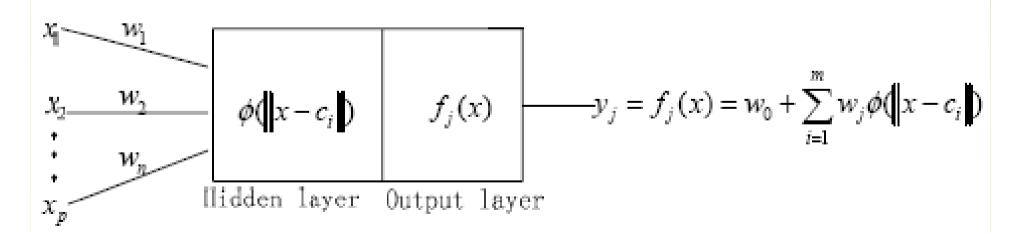
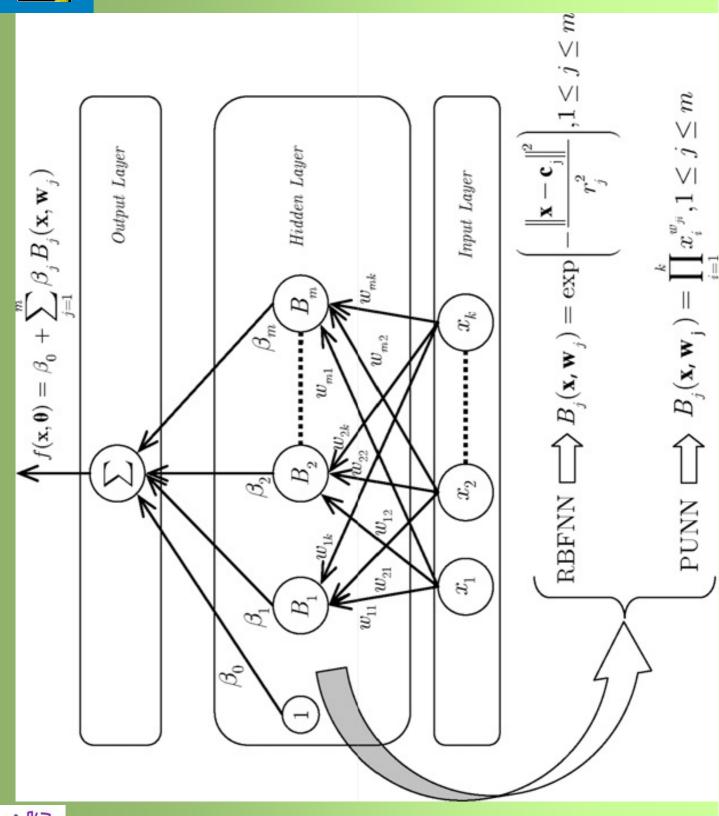


Fig. 1. Estructura de una red RBF









FUNCIONES DE BASE



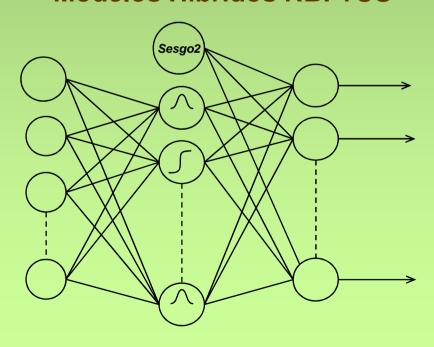
□ Distintas funciones de salida en capa oculta →
 □ Distintos modelos de Redes Neuronales

Modelos de híbridos de funciones de base

Modelos Híbridos RBF+UP

Sesgo2

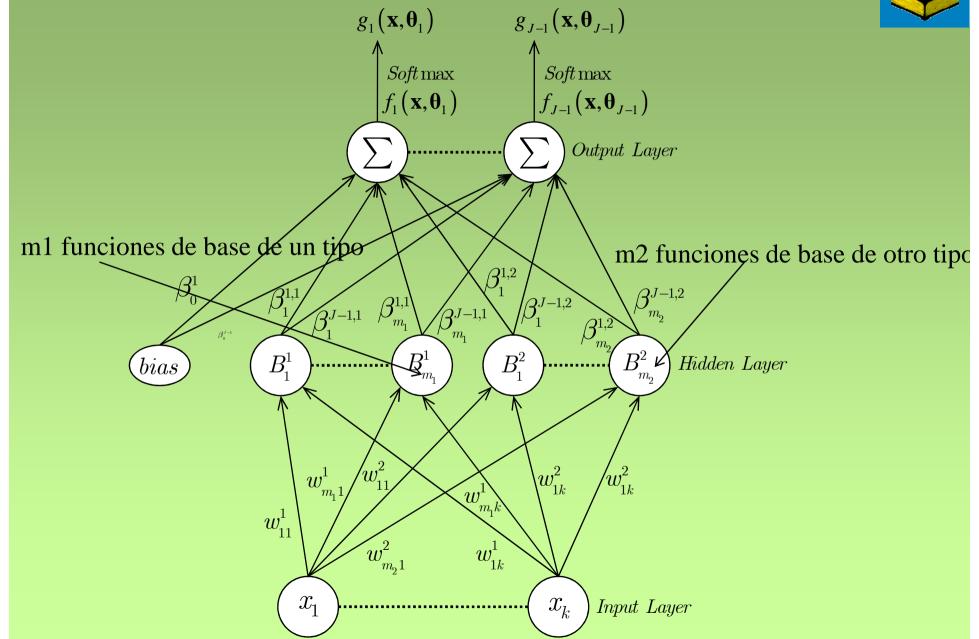
Modelos Híbridos RBF+US





ESTRUCTURA DE UNA RED NEURONAL HIBRIDA ESTRUCTURA DE UN RED DE CLASIFICACIÓN MULTICLASE







UTILIZANDO LA RED



- Se introduce un ejemplo (patrón) en la red: el valor de cada atributo del ejemplo se introduce en un nodo de entrada de la red.
- Los múltiples valores de entrada se transmiten a través de cada arco (x) mediante el peso (w) definido sobre cada arco.
- La suma de valores ponderados se transmiten en cada nodo.
- Se obtiene la salida (h) a partir de cada nodo aplicando la función de transferencia (f) a la suma ponderada de las entradas al nodo de la capa oculta. Continuandose hacia adelante a la salida a través de la red.
- Este proceso se conoce como activación hacia adelante "feedforward".

$$y_i = f_i(\sum_{j=1}^k w_{ji} \ x_{ji}) = f_i([w_{1i}...w_{ki}] \begin{bmatrix} x_{1i} \\ ... \\ x_{ki} \end{bmatrix})$$

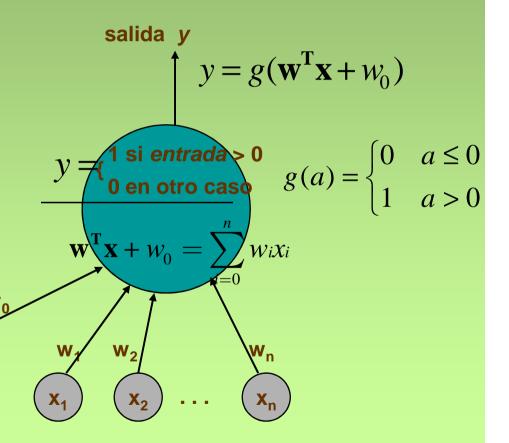


EL PERCEPTRON: BASADO EN UN SENCILLO UMBRAL



Un perceptron es una red neuronal sin capas ocultas, donde se define una función de transferencia basada en un umbral.

Observamos que además de tener un nodo en capa de entrada para cada atributo $(x_1, x_2, ..., x_n)$, podemos también definir una neurona de valor constante asociada a un nodo de entrada (x_0) , que se define como el sesgo del modelo o 'bias'.



vector de entrada x

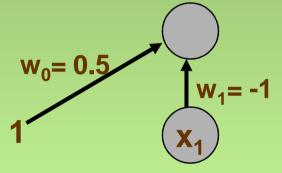


UN SIMPLE PERCEPTRON BASADO EN UMBRAL



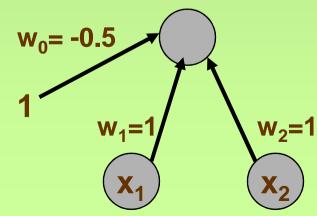
Si consideramos el perceptron definido en la transparencia anterior podemos producir pesos para modelar el bit de inversión y las funciones Booleanas OR y AND.

Bit de Inversion

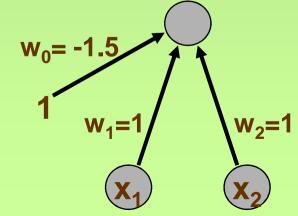


entrada x1	entrada x2	inversion x1	OR	AND
0	0	1	0	0
0	1	1	1	0
1	0	0	1	0
1	1	0	1	1

OR Booleano



AND Booleano

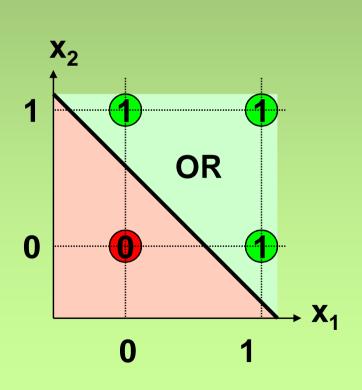


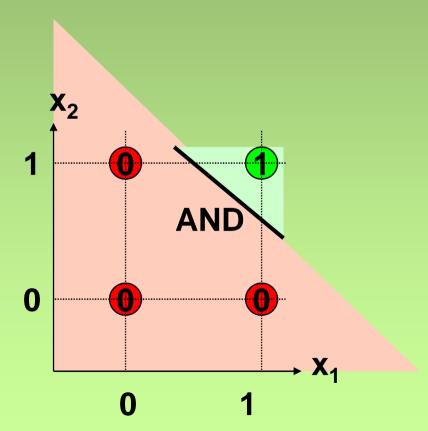


PERCEPTRON BASADO EN UMBRAL



Sin embargo si queremos discriminar la función Booleana XOR, esto no se puede obtener mediante un simple perceptron lineal, puesto que las funciones OR y AND son linealmente separables, pero la función lógica XOR no lo es.



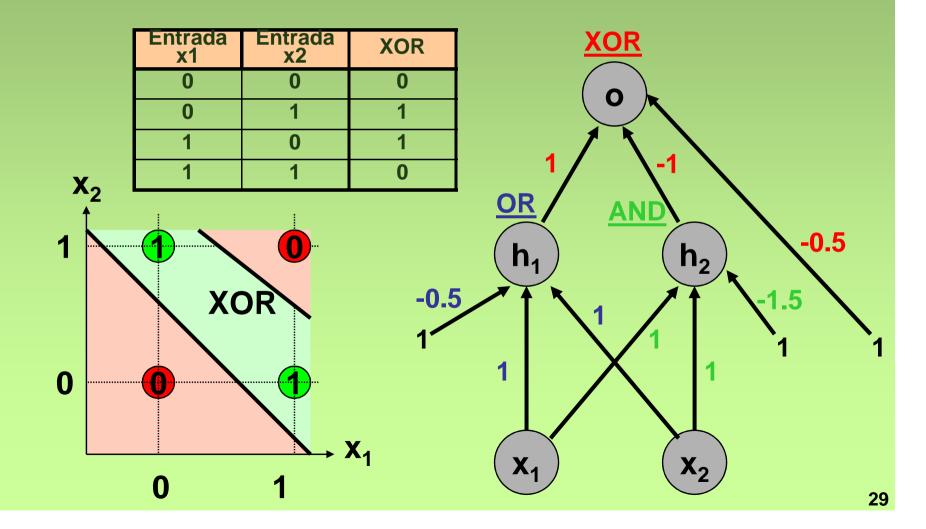




PERCEPTRON BASADO EN UMBRAL



XOR se modela mediante una red neuronal más compleja. Cada nodo de la capa oculta y cada nodo de la capa de salida, utilizarán la función de umbral definida anteriormente.

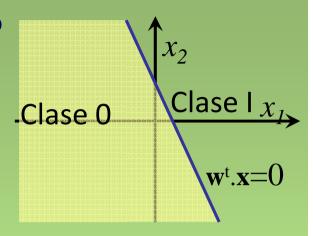




PERCEPTRON BASADO EN UMBRAL: RESUMEN



- Separa el espacio con un hiperplano
- $y = f (w_1 x_1 + w_2 x_2 + ... + w_n x_n),$
- $f(s) = { 1 si s≥0, 0 si s<0 }$
- Puede incluir sesgo o "bias" w₀.

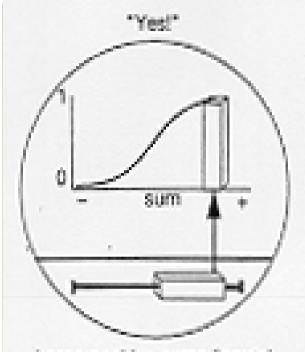


- Importante históricamente
 - Estudiado muy detalladamente (Minsky y Papert '69)
- Es un clasificador lineal en 2 clases.
 - Resuelve problemas con patrones linealmente separables
 - No resuelve el problema XOR.
- Análogo a un clasificador de Bayes Gaussiano.
 - minimiza la probabilidad de error
 - clasificador denominado paramétrico

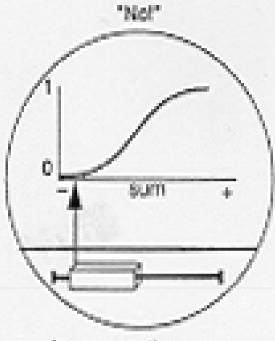


INHIBIDORES Y EXCITADORES

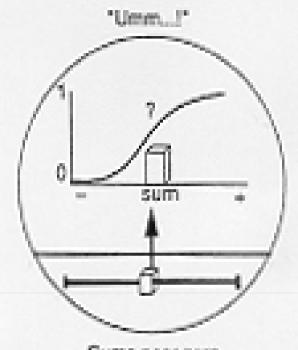




Large positive sums (inputs) result in high output from nodes



Large negative sums result in low output from nodes.



Sums near zero result in medicare output from nodes

Valores de la suma grandes y negativos de entrada a la neurona (o nodo) de la capa oculta producen

esa neurona

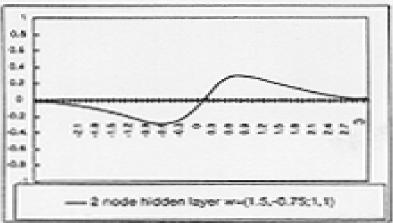
Valores de la suma cercanos a cero valores de salida bajos dede entrada a la neurona (o nodo) de la capa oculta producen valores de salida mediocres (cercanos a 0.5) de esa neurona1

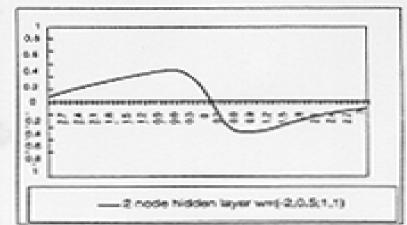
Valores de la suma grandes y positivos de entrada a la neurona (o nodo)

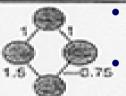
de la capa oculta producen valores de salida altos de esa neurona

Ejemplo de una red sencilla con conexiones hacia adelante



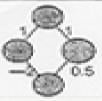


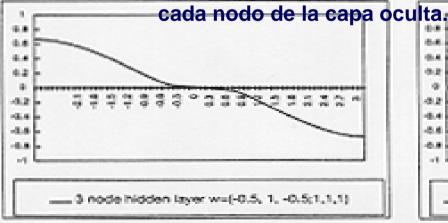


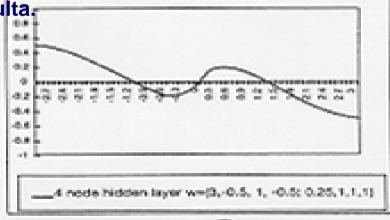


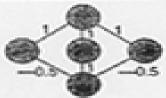
Las redes neuronales pueden aproximar funciones complejas.

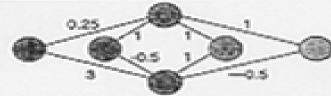
Este ejemplo muestra diferentes funciones que se pueden obtener mediante diferentes pesos y numero de nodos con funciones sigmoidales en













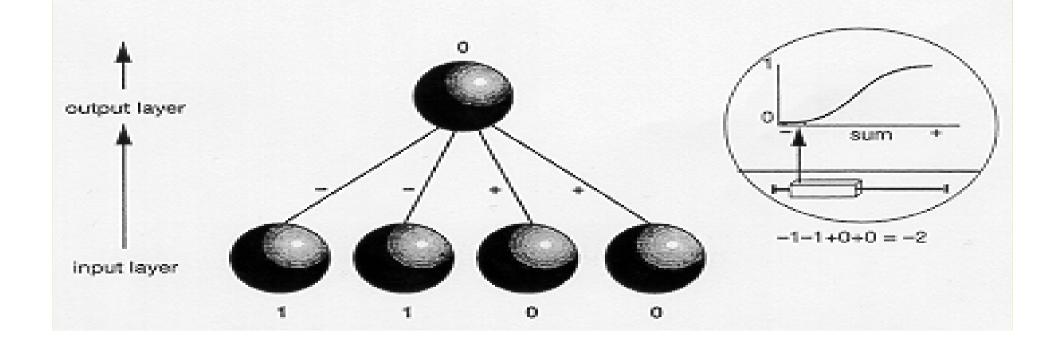
input layer

0

Ejemplo de Redes sencillas Feed-Forward









Ejemplo de Redes sencillas Feed-Forward



- Si suponemos que estamos trabajando con redes sin capa oculta (sólo las capas de entrada y de salida)
- Suponemos dos patrones de entrenamiento:
 - '0011' está en la clase 1
 - '1100' está en la clase 0

(Observemos que nuestros ejemplos tienen cuatro atributos binarios, con valor 0 o 1. De esta forma la red tiene cuatro nodos de entrada. La salida especifica si el ejemplo esta o no en una determinada clase. Así, la red tiene un sólo nodo de salida.)

• Los pesos correctos sobre cada uno de los arcos pasan a ser -1, -1, +1, y +1. Esto nos da la clase correcta para cada ejemplo, como se muestra en la gráfica.



Entrenamiento de una Red Neuronal Artificial



- Algoritmo de retropropagación del error "backpropagation" para el entrenamiento de una red neuronal.
- □ 1: Se selecciona un patrón del conjunto de entrenamiento y se introduce en la red neuronal.
- □ 2: Los valores de las entradas se propagan a lo largo de la red hacia la capa de salida.
- □ 3: Se calcula el error cuadrático de la salida (la salida deseada menos la salida del modelo de red, elevado al cuadrado).
- □ 4: El error se propaga hacia atrás a través de la red de forma tal que se puedan cambiar los pesos.
- □ 5: Ir a la etapa 1



Entrenamiento de una Red Neuronal Artificial



- Algoritmo de retropropagación del error "backpropagation" para el entrenamiento de una red neuronal.
- 6.- Se repite el proceso hasta que haya sido procesado cada patron del conjunto de entrenamiento. A continuación la red resultante se chequea con el conjunto de validación (si esta red es mejor que una red previa mejor, entonces se salva)
- 7.- Estas etapas se repiten hasta que se descubra una ANN que no mejore en CCR a la mejor red obtenida hasta entonces.



Aprendizaje con backpropagation



Dinámica del aprendizaje:

- Calcula en primer lugar, los cambios de los pesos sinápticos de la neurona de salida;
- Calcula los cambios hacia atrás empezando por la capa p-1, y propaga hacia atrás los términos del error local.
- •El método es relativamente complicado pero menos que el problema original de optimización



ALGORITMO DE RETROPROPAGACIÓN DEL ERROR

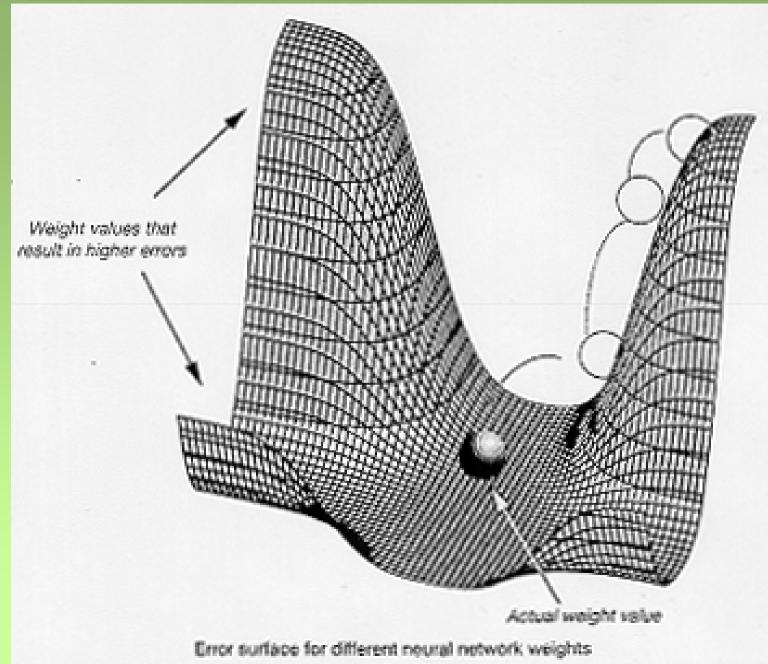


- Back-propagation es un procedimiento para ajustar los pesos de la red con el fin de minimizar el error de salida. La técnica empleada es un algoritmo de búsqueda local de gradiente descendente: se calcula la derivada de las funciones de transferencia y, para cada peso, se decide si añadir o restar una pequeña cantidad con el objetivo de reducir el error total.
- Supongamos que podemos ajustar dos pesos (w₁ y w₂). La superficie siguiente es un ejemplo de como puede variar el error como resultado de la combinación de esos pesos diferentes.
- Observamos que la dirección (positiva o negativa) y las etapas de las pendientes se pueden obtener utilizando derivadas parciales del error con respecto a and w₁ y w₂.



ALGORITMO DE RETROPROPAGACIÓN DEL ERROR



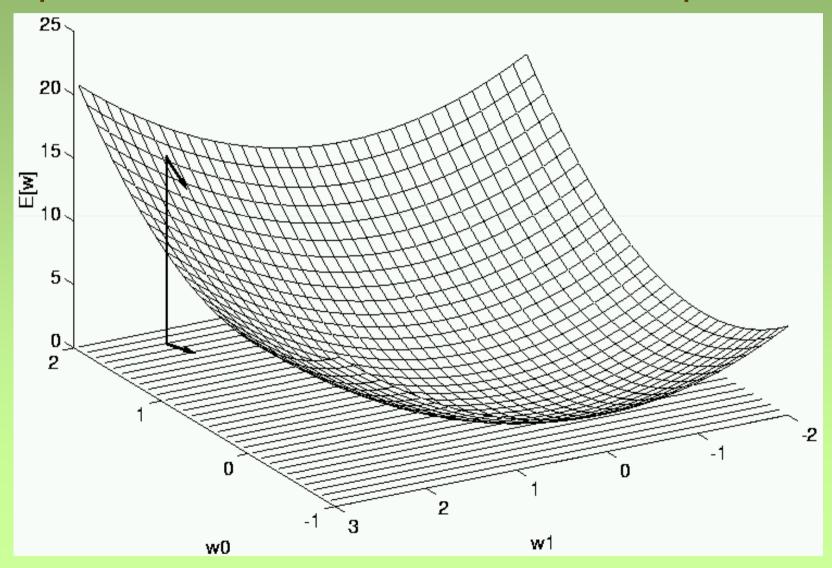




GRADIENTE DESCENDENTE



Aqui mostramos otra gráfica para ver como el error de predicción puede cambiar cuando cambian los valores de los pesos:







Experimentos



Primer Experimento: Datos Simulados



- Datos simulados del conjunto de entrenamiento.
- □ Se introduce un 1% o un 2% de ruidoGaussiano a los patrones
- Datos igualmente simulados para el conjunto de generalización

Nº de patrones: 100

Rango de los Exponentes: [-5,5]

Rango de los Coeficientes: [-10,10]

N° de redes en la población: 1000



Resultados. Una Variable

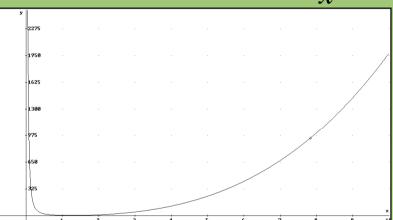


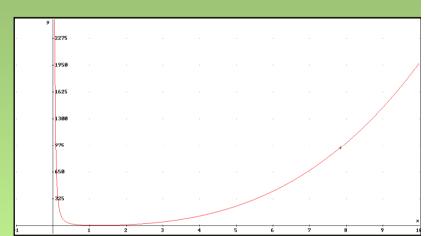
Función estimada

Función objetivo

$$f_p(x) = 2,0433x^{2,9933} - \frac{4,0219}{x^{2.2494}} - 3.8345x^{0,9159} + \frac{9,7519}{x^{2.1309}}$$

$$f(x) = 2x^3 + x\sqrt{x} - 5x + \frac{6}{x^2}$$





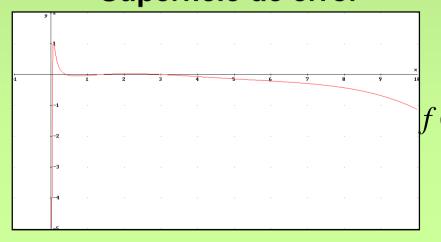
Superficie de error

de Generaciones: 2181

R2=0,9998

rror de los datos= 1%

uma de Residuos=679



 $f(x) - f_p(x)$



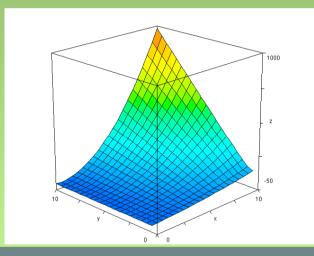
Resultados. Dos Variables

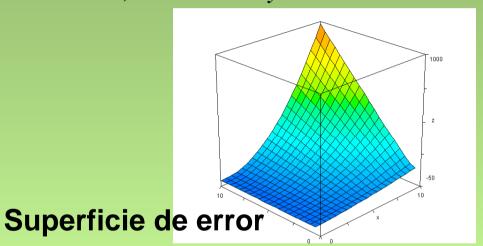


Función objetivo

Función estimada

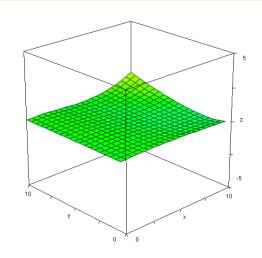
$$f(x,y) = -2\sqrt{xy} + x^2y + \frac{x}{y^2} f_p(x,y) = -2,0011x^{0,521}y^{0,5099} + 1,0161x^{1,9954}y^{0,9977} + 10,9852x^{1,0048}y^{-2,0033}$$





Nº de Generaciones: 2000 R2=0,9995

Error de los datos= 1% Suma de Residuos=50,09





Resultados. Tres Variables



Función estimada

$$f_p(x, y, z) = \frac{1,3313x^{1,9385}y^{0,9782}}{z^{2.0195}} - \frac{0,3884x^{1,6294}y^{0,8114}}{z^{2,1265}}$$

Función objetivo

$$-\frac{2,9462 y^{3,0123} z^{0,9954}}{x^{2,0037}} + 1,9054 x^{0,5513} y^{0,4816} z^{0,4765}$$

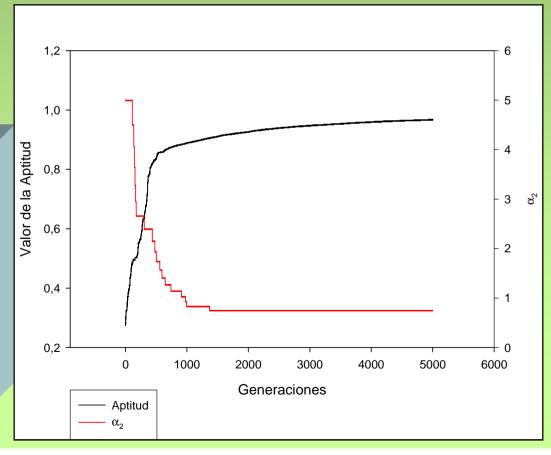
$$f(x, y, z) = \frac{x^2 y}{z^2} - 3\frac{zy^3}{x^2} + 2\sqrt{xyz}$$

Nº de Generaciones: 5000

$$R^2=0,999$$

Error de los datos= 1%

Suma de Residuos=138699







Aplicaciones. Modelos de

Crecimiento Microbiano



Regresión en Microbiología Predictiva



Conocimiento detallado de la respuesta de crecimiento de los microorganismos en los alimentos frente a los factores ambientales que les afectan y a partir de los datos resultantes, predecir lo que sucederá durante el almacenamiento, distribución, etc.



Estimar la vida comercial y la seguridad microbiológica



Implantar medidas

para limitar el

desarrollo microbiano

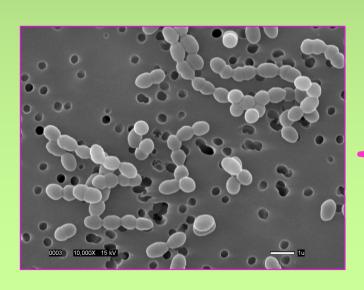


Regresión en Microbiología Predictiva



Leuconostoc mesenteroides

- Microorganismo responsable de alteración de diferentes alimentos
 - Ampliamente distribuido: plantas, lácteos y productos alimenticios
 - Incluido en Bacterias ácido lácticas (BAL)

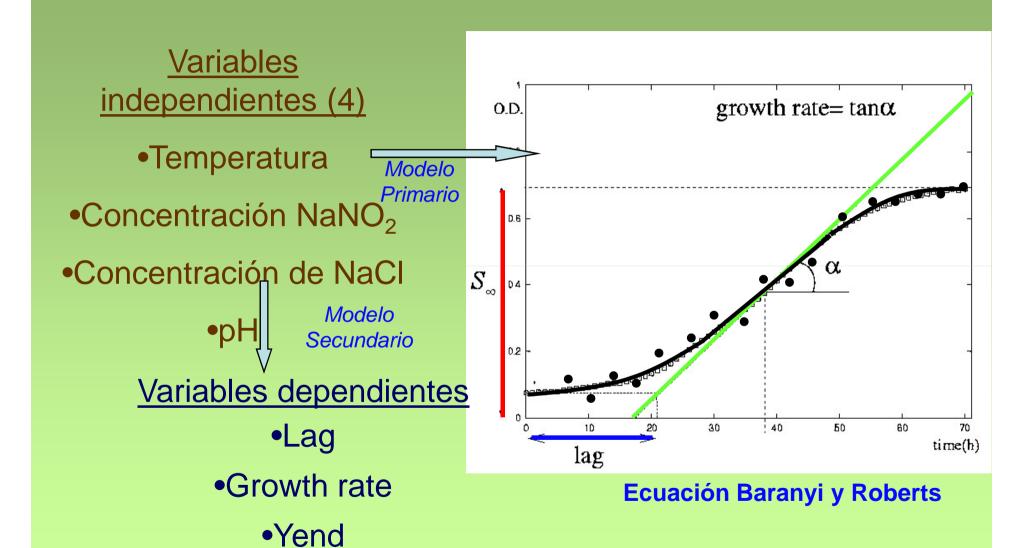


- Gram +
- Cocoide (agar)/ Bacilar (caldo)
 - Anaerobio facultativo
 - No móvil
 - No esporas
- Rango de Ta: 10-37°C



Crecimiento Microbiano







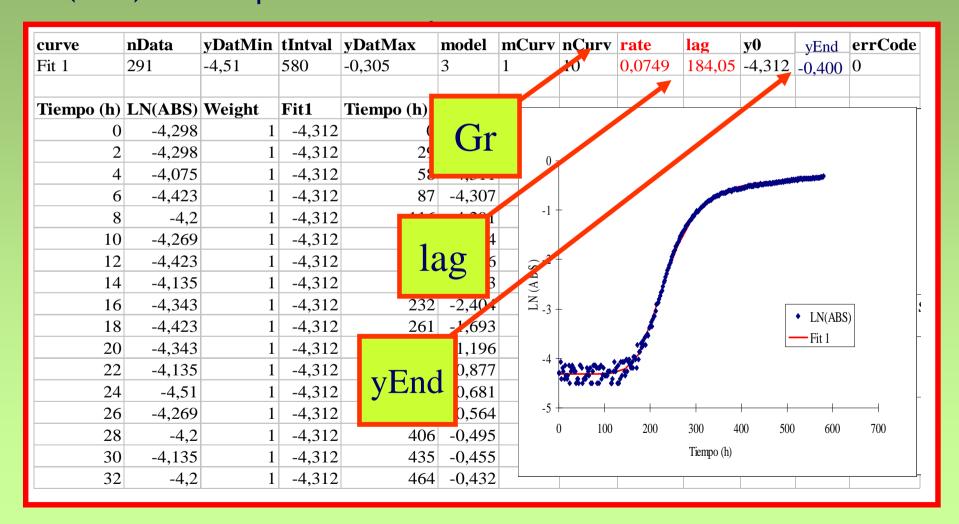
Crecimiento Microbiano

biano

DMFit

LN (ABS) vs tiempo ——

Baranyi y Roberts, 1994 MODELO PRIMARIO





Metodología



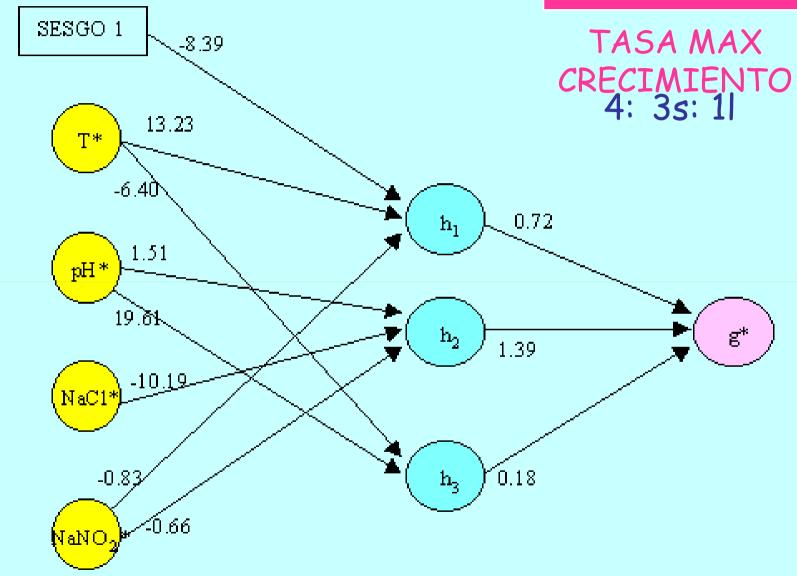
- □ Se utilizaron 150 curvas para entrenar y 60 para generalizar
- □ Las variables independientes se normalizan en el intervalo [0,1,1,1]
- □ Las variables dependientes se normalizan en el intervalo [1,2]
- □ Comparación con algoritmo genético con redes de unidades sigmoides
- □ Misma topología en redes de unidades productoUP y sigmoides US 4:4:1
- □ Se ejecutó el algoritmo 30 veces consecutivas
- □ Medida de comparación. SEP

$$SEP = \frac{100}{|\overline{y}|} \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2}{n}}$$



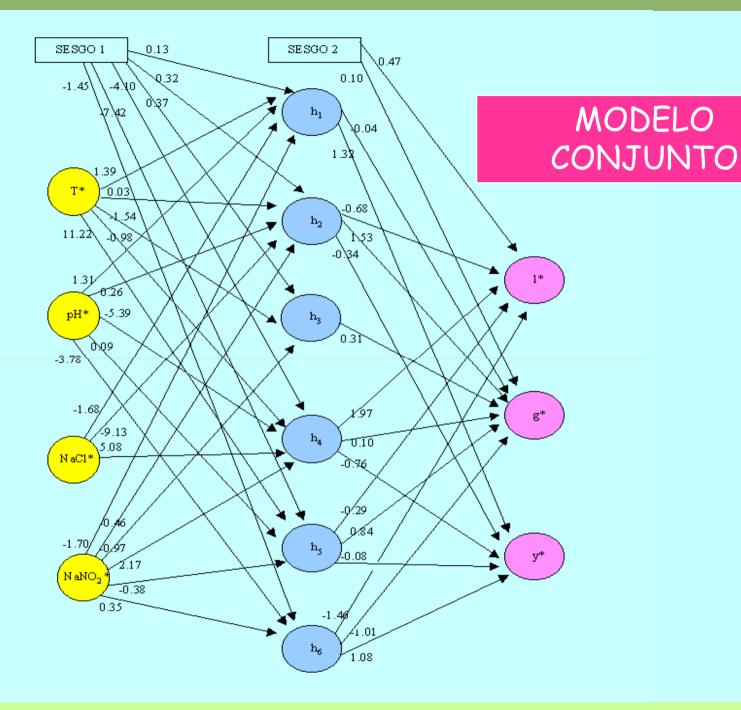








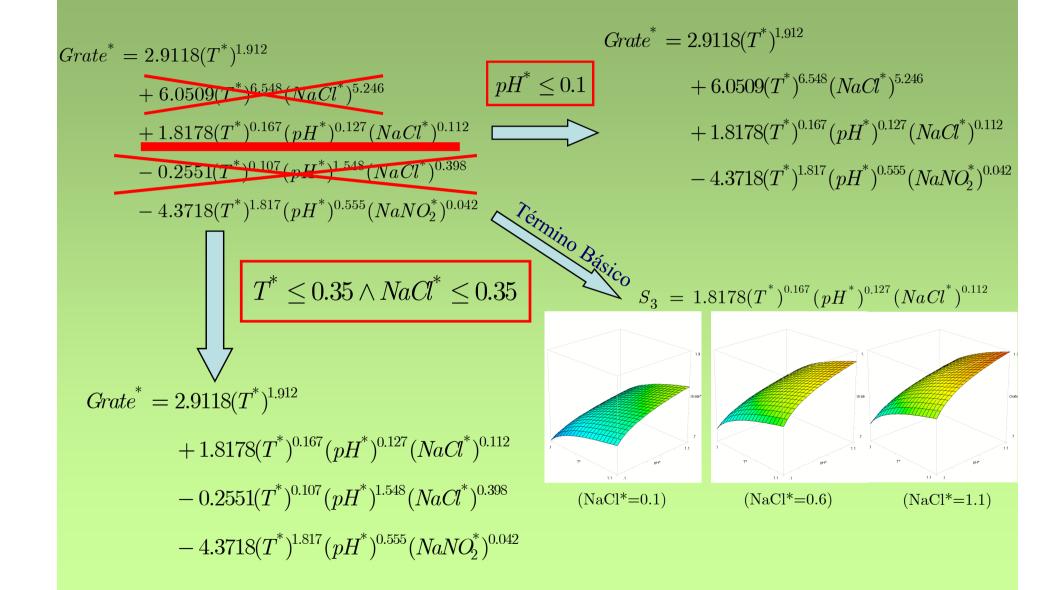






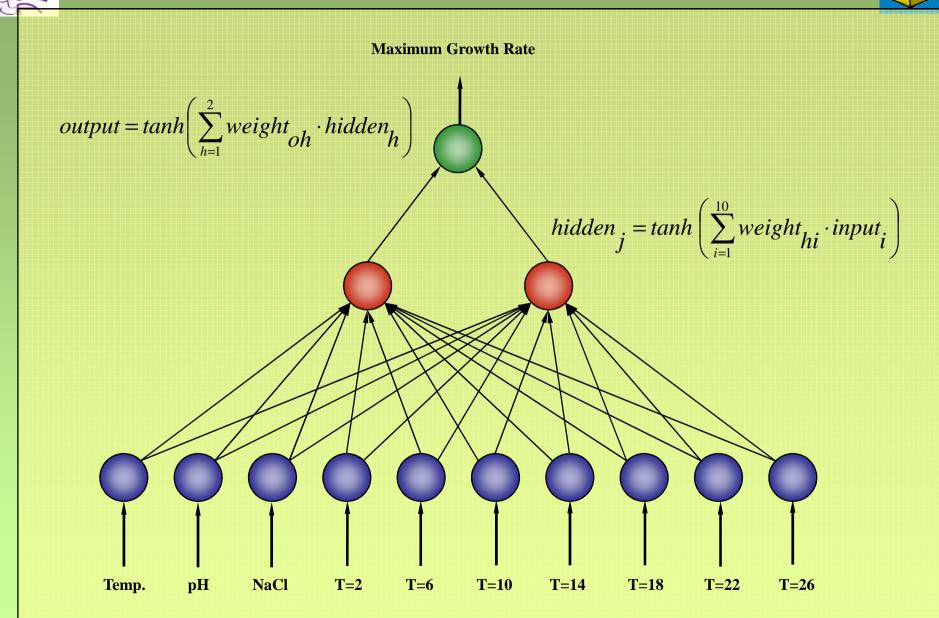
Crecimiento Microbiano. Ejemplo de interpretación de modelos





Ejemplo modelo de red neuronal





gura: Red Neuronal predictiva para modelos de crecimiento microbiano



Resultados Base de datos indias Pima



```
Mejor modelo BBDD PIMA con unidades producto PU con 2, 4, 5 nodos en capa oculta
Iteration 2 - Generation 30 - Methodology EP
-3.900512587963034 * ( x1^-0.13684235372038445 * x2^0.8947057849519509 * x3^-
0.16177688100613585 * x4^-0.22211012576697753 * x6^0.4913432471220496 *
x7<sup>0</sup>.23623427912780293)
+4.879092963310238 * ( x1^0.11285972138120698 * x2^-1.3619173861726994 *
x3^0.9628706545339946 * x5^0.05405779792187547 * x6^-1.5084101778277188 )
+6.132961230744894 * ( x1^-1.409023891889148 * x2^-0.7106040581439343 * x3^-
0.5403167304727159 * x4^-0.28968502343526836 * x5^0.555395799909222 * x7^-
0.4734870655117997)
-0.11286664464330956 * ( x1^0.8983631146643081 * x2^-1.7527372637244092 *
x6^0.8171140881579099 * x7^0.2618757435172636 * x8^-1.956517944452171 )
+2.5127160041976815 * (1)
Fitness: 0.010812206809437544
```

Number of hidden neurons: 4 Number of effective links: 27



Resultados base de datos indias Pima



Train CCR: 76.5625					75.8680556	17
Train CCR: 76.5625 Train Confussion Matrix					76.5625000	27
Pred. 0 1 CCR					75.8680556	13
Target	U		CCK		76.7361111	21
0 1	325 95	40 116	0.8904 0.5497		76.9097222	21
					76.3888889	19.8000000
					0.4910464	5.2153619
Test CCR: 82.2916					78.1250000	17
Test Confussion Matrix					82.2916667	27
Predicted 0		` 1	CCR	79.1666667	13	
Target					79.1666667	21
0	123	12	0.9111		79.1666667	21
1	22	35	0.6140		101100001	
Train Log: 0.4912						
TrainChisq: 91.488					79.5833333	19.8000000
					1.5797657	5.2153619

Resultados Base de datos Grate

Mejor modelo con PU para Grate 1, 2, 5 numero de nodos. 1000 individuos Iteration 4 - Generation 400 - Methodology EP

```
1.3892874334462106 * ( x1^1.1585166569836731 * x4^-
0.1051251125212078)
+1.7863616190220453 * ( x1^-4.087978726705221 * x3^-4.69547483185112
* x4^0.18663881866740797 )
+0.1956211641178407 * ( x1^-3.7369045659863787 *
x3^2.4068525108311905 * x4^0.18625837668354234 )
-0.17422043783551888 * ( x1^0.12967881626147726 * x2^-
3.1639588170762014 * x4^0.3236642700125189 )
+0.3228931353820062 * ( x1^0.8356221719188421 * x3^-
4.572180685852902)
-1.0603249747825179 * (1)
Fitness: 0.9961592282738658
Number of hidden neurons: 5 Number of effective links: 19
Train MSE: 3.948114052385393E-4
```

Train SEP: 9.28527137842698

Test MSE: 3.771368707920658E-4

Test SEP: 9.109535824243359





INTRODUCCION A LAS REDES NEURONALES (II)

César Hervás-Martínez Grupo de Investigación AYRNA

Departamento de Informática y Análisis Numérico Universidad de Córdoba Campus de Rabanales. Edificio Einstein. Email: chervas@uco.es

2019-2020