

Índice

Prefacio	XXXIII
1 Fundamentos de las redes neuronales	1
1.1 La aproximación de funciones y el modelado de datos	1
1.1.1 Comportamiento estadístico de los datos experimentales	2
1.1.2 Regresión y clasificación	2
1.1.2.1 Regresión	3
1.1.2.2 Clasificación	4
1.2 El aprendizaje predictivo	7
1.2.1 Estrategias de aprendizaje	9
1.2.2 Estudio de la interpretabilidad	10
1.2.3 Flexibilidad	11
1.3 La neurona biológica y la neurona artificial	12
1.3.1 La neurona biológica	12
1.3.2 La neurona artificial	13
1.3.2.1 Funciones de activación	15
1.3.2.1.1 La función escalón	15
1.3.2.1.2 La función lineal a trozos	15
1.3.2.1.3 La sigmoide	16
1.3.2.1.4 La función de activación gaussiana	17
1.4 Las redes neuronales	17
1.4.1 Beneficios de las redes neuronales	19
1.5 Tipos y topologías de redes neuronales	21
1.5.1 El perceptrón	21
1.5.2 El perceptrón multicapa	22
1.5.3 La red de base radial	24
1.5.4 Las máquinas de soporte vectorial	26
1.5.5 Los mapas auto-organizativos	29
1.6 El aprendizaje con redes neuronales	30
1.6.1 Entrenamiento, validación y test	31
1.6.2 Entrenamiento supervisado y no supervisado	34
1.6.2.1 Entrenamiento supervisado	34
1.6.2.2 Entrenamiento no supervisado	35
1.6.3 El algoritmo <i>backpropagation</i>	35
1.6.4 El entrenamiento en modo <i>on-line</i> y en modo <i>off-line</i>	37
1.6.5 Algunos algoritmos de entrenamiento avanzados	38

1.6.5.1	Levenberg-Marquardt	38
1.6.5.2	Resilient backpropagation	39
1.6.5.3	Regularización bayesiana	40
1.7	Reseña histórica de las redes neuronales y de sus aplicaciones	40

2 Variable selection in multidimensional regression problems using the Delta Test 43

2.1	Preprocessing and feature extraction	43
2.2	Preprocessing and postprocessing	44
2.3	The curse of dimensionality	44
2.4	Variable selection techniques	46
2.4.1	Wrapper, filter and embedded methods	46
2.4.2	Variable selection methods and input space transformations	47
2.4.2.1	Clustering	48
2.4.2.2	Principal Component Analysis	48
2.4.2.3	Kernel-based Principal Component Analysis	49
2.4.2.4	Partial Least Squares regression	49
2.4.2.5	Canonical Correlation Analysis	50
2.4.2.6	Kernel-based Canonical Correlation Analysis	51
2.4.2.7	Independent component analysis	52
2.4.2.8	Factor analysis	53
2.4.2.9	Multifactor dimensionality reduction	54
2.4.2.10	Principal curves	54
2.4.2.11	Gaussian process latent variable models	54
2.4.2.12	Locally Linear Embedding	55
2.4.2.13	Least absolute shrinkage and selection operator (Lasso)	55
2.4.2.14	Least Angle Regression	55
2.4.2.15	Validation methods	56
2.4.2.16	Singular Value Decomposition	57
2.4.2.17	Nested subset methods	58
2.4.2.18	Filters	58
2.4.2.19	Automatic Relevance Determination	58
2.5	Input selection criteria	59
2.5.1	k -Nearest neighbors	59
2.5.2	Mutual information	60
2.5.3	Nonparametric noise estimation	60
2.5.3.1	The Gamma Test	61
2.5.3.2	The Delta Test	62
2.6	Search procedures	63
2.6.1	Local search methods	63
2.6.1.1	Forward selection	63
2.6.1.2	Backward elimination	63
2.6.1.3	Forward-backward selection	64
2.6.2	Global search methods	64
2.6.2.1	Exhaustive search	64
2.6.2.2	Tabu search	64

2.6.2.3	Genetic algorithms	65
2.7	Selection, scaling and projection	66
2.8	Experiments	66
2.8.1	Modeling with a reduced set of inputs: the OP-ELM method	66
2.8.1.1	Extreme Learning Machine	66
2.8.1.2	A global methodology based on Optimal-Pruned Extreme Learning Machine	68
2.8.1.3	Results	70
2.8.1.4	Conclusion	73
2.8.2	Parallelizing a global search	73
2.8.2.1	Motivation of a parallel search	73
2.8.2.2	Implementation of TS	74
2.8.2.2.1	TS for pure variable selection.	74
2.8.2.2.2	TS for the scaling problem.	74
2.8.2.3	Setting the tabu conditions	75
2.8.2.4	Hybrid parallel genetic algorithm	75
2.8.2.4.1	Encoding of the solutions.	75
2.8.2.4.2	Selection, crossover and mutation operators.	76
2.8.2.5	Parallelization	76
2.8.2.6	Hybridization	77
2.8.2.7	Experiments	78
2.8.2.8	Datasets used in the experiments	79
2.8.2.9	Parallelization of the GA	80
2.8.2.10	Hybridization of the pGA with the TS and using the BLX- α crossover	82
2.8.2.11	Comparison against the classical methodologies	83
2.8.2.12	Conclusions	84
2.8.3	Enhancing the Delta Test minimization by means of projection	84
2.8.3.1	Real-coded genetic algorithm with scaling: RCGA-S	87
2.8.3.2	Real-coded genetic algorithm with scaling + projection: RCGA-SP	87
2.8.3.3	Experiments	88
2.8.3.4	Datasets	89
2.8.3.5	Results	89
2.8.3.6	Conclusions	91
2.9	Approximate k -NN DT minimization using GA	91
2.9.1	Time series prediction and preprocessing	92
2.9.2	The approximate k -NN method	93
2.9.3	Using genetic algorithms for global search	93
2.9.3.1	Scaling (S)	94
2.9.3.2	Scaling + projection to k dimensions (SP- k)	94
2.9.3.3	Scaling with a fixed number of variables	95
2.9.4	Experiments	97
2.9.4.1	Datasets	98
2.9.4.2	Approximate k -nearest neighbor performance	98
2.9.4.3	DT performance	99

2.9.4.4	Computational time	100
2.9.4.5	Projection to $k > 1$ dimensions	101
2.9.5	Discussion	106
2.9.6	Conclusion	107
2.10	Conclusion	108

3 Aplicación de las ANNs a la predicción en sistemas biológicos: producción de micotoxinas en alimentos **111**

3.1	El problema de las micotoxinas en alimentos	111
3.2	Factores que influyen en la producción de micotoxinas	112
3.3	Aproximación a la predicción del nivel de micotoxinas	114
3.4	ANNs para predecir la OTA producida por <i>A. carbonarius</i>	115
3.4.1	Diseño experimental: Obtención de la matriz de datos	115
3.4.2	Distribución del conjunto de datos	119
3.4.3	Modelos de MLP ANN con una capa oculta	120
3.4.4	Modelos MLP con dos capas ocultas	121
3.4.5	Modelos con redes de función de base radial	121
3.4.6	Resultados	122
3.4.6.1	Perceptrones de una capa oculta	122
3.4.6.2	Perceptrones de dos capas ocultas	126
3.4.6.3	Redes RBF	127
3.4.7	Discusión	128
3.5	Predicción de DON en cebada por <i>F. culmorum</i>	130
3.5.1	Diseño experimental. Obtención de la matriz de datos	131
3.5.2	Modelos de MLP ANN con una capa oculta	136
3.5.3	Modelos de MLP ANN con dos capas ocultas	136
3.5.4	Redes de función de base radial	137
3.5.5	Resultados	137
3.5.5.1	Modelos MLP de una capa oculta	138
3.5.5.2	Modelos MLP de dos capas ocultas	140
3.5.5.3	Modelos de RBFN	143
3.5.5.4	Discusión	144
3.6	Conclusiones	146

4 Estimación de la posición de incidencia en sistemas de Tomografía por Emisión de Positrones por medio de redes neuronales **149**

4.1	Las técnicas de imagen para diagnóstico médico	149
4.1.1	Los rayos X	149
4.1.2	La tomografía computerizada	150
4.1.3	El diagnóstico por ultrasonidos	151
4.1.4	La imagen de resonancia magnética	151
4.1.5	La imagen médica nuclear basada en radioisótopos	152
4.1.6	La tomografía de impedancia eléctrica	153
4.2	Introducción a la tomografía por emisión de positrones	154
4.2.1	Evolución histórica	154
4.2.2	Radiofármacos más utilizados	156

4.2.3	Principio físico del PET	157
4.2.4	La detección en coincidencia	157
4.2.5	Elementos de un sistema PET	159
4.2.5.1	Colimación en PET	160
4.2.5.2	El cristal de centelleo	161
4.2.5.3	El tubo fotomultiplicador	164
4.2.5.4	La electrónica de detección	166
4.3	Interacciones de la radiación gamma con la materia	167
4.3.1	Absorción fotoeléctrica	167
4.3.2	Dispersión o <i>scattering</i> Compton	168
4.3.3	Atenuación	169
4.3.4	Las pérdidas por tiempo muerto	170
4.3.5	La profundidad de interacción	171
4.4	Posicionamiento en PET	172
4.4.1	Redes de posicionamiento discretizado	172
4.4.2	Algoritmos clásicos	174
4.4.2.1	La lógica de Anger	174
4.4.2.2	Mínimos cuadrados	176
4.4.2.3	Mínimos cuadrados con <i>splines</i>	177
4.4.2.4	Maximum likelihood	177
4.4.2.5	Regresión lineal localizada	177
4.4.2.6	Método χ -cuadrado	177
4.4.2.7	Método χ -cuadrado generalizado	178
4.4.2.8	Método del coeficiente de correlación lineal	178
4.4.2.9	<i>Statistics Based Positioning</i>	178
4.4.2.10	Red neuronal	179
4.5	Experimentos	179
4.5.1	Banco de pruebas sintético	179
4.5.2	Diseño de una red neuronal para posicionamiento	183
4.5.2.1	Estudio previo del banco de simulación	185
4.5.2.2	Diseño de redes neuronales para estimación 2D	186
4.5.2.3	Análisis del estimador 2D	188
4.5.3	Banco de pruebas real	189
4.5.3.1	Posicionamiento por ANNs	192
4.5.3.2	La necesidad del filtrado	192
4.5.3.3	Resultados de entrenamiento con muestras filtradas	194
4.5.3.3.1	Efecto de la DOI	197
4.5.3.4	Uso de distintos mallados para entrenamiento y test	197
4.6	Conclusión	199
5	Aplicación de preprocesado de variables al posicionamiento PET	203
5.1	Los momentos de una distribución	203
5.2	El momento de Hausdorff y Hamburger	204
5.3	Topología del circuito	205
5.4	Experimentos	207
5.4.1	Obtención de datos	207

5.4.2	Selección de momentos	207
5.4.3	Elección de parámetros	208
5.4.4	Resultados	208
5.5	Conclusión	211
Conclusions		221
A La reconstrucción de imágenes en PET		225
A.1	La adquisición de datos en PET	225
A.1.0.1	El almacenamiento de datos	225
A.1.0.2	El muestreo de datos	229
A.1.1	La reconstrucción de imágenes 2D	230
A.1.1.1	El teorema de la sección central	231
A.1.1.2	El algoritmo <i>filtered-backprojection</i>	232
A.1.1.3	Métodos iterativos	234
A.1.2	La reconstrucción de imágenes 3D	237
A.1.2.1	El algoritmo 3D- <i>filtered-backprojection</i>	238
A.1.2.2	El algoritmo 3D- <i>Reprojection</i>	240
A.1.2.3	Métodos de <i>rebinning</i>	242
B Redes neuronales en MATLAB		245
B.1	Planteamiento del problema	245
B.2	Creación de una red neuronal	246
B.3	Entrenamiento de una red neuronal	246
B.4	Simulación de una red neuronal y estimación del error	248
B.5	Construcción y simulación de una red de base radial	249
C Algoritmos genéticos		251
C.1	Definición formal	251
C.2	Codificación de las soluciones	253
C.3	Creación de la población inicial	253
C.4	La función de evaluación	255
C.5	El proceso de reproducción	255
C.5.1	Operadores genéticos	256
C.5.1.1	El operador de cruce	256
C.5.1.2	El operador de mutación	256
C.5.2	El proceso de selección	257
C.5.3	El criterio de parada	258
Bibliografía		259