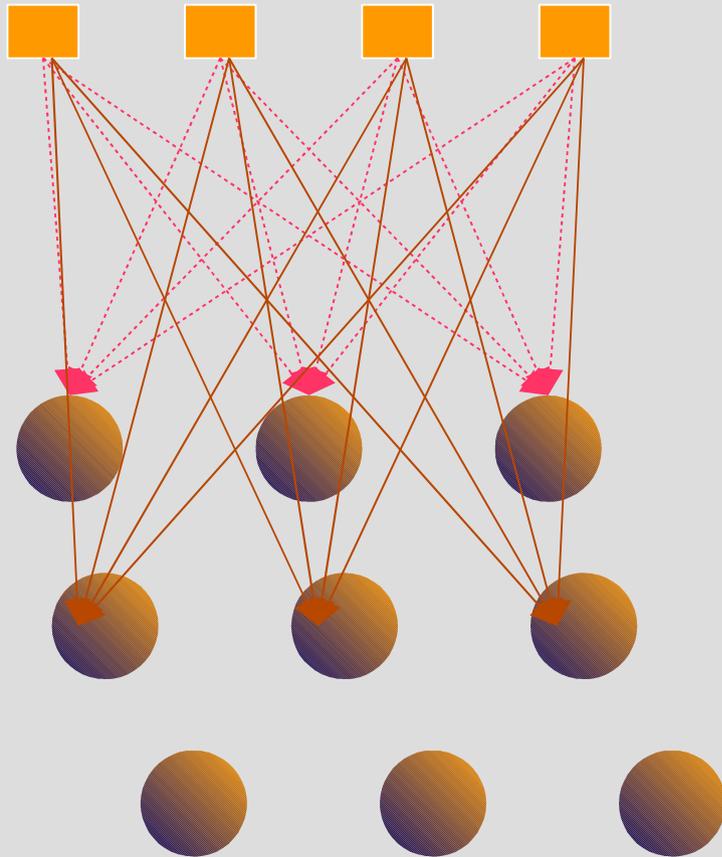


Redes de Kohonen y su aplicación a las ciencias de la vida

JJ Merelo
jj@merelo.net
GeNeura team

Mapa autoorganizativo de Kohonen

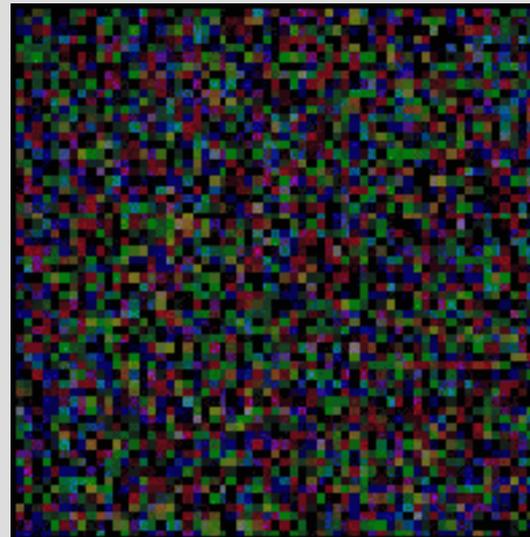
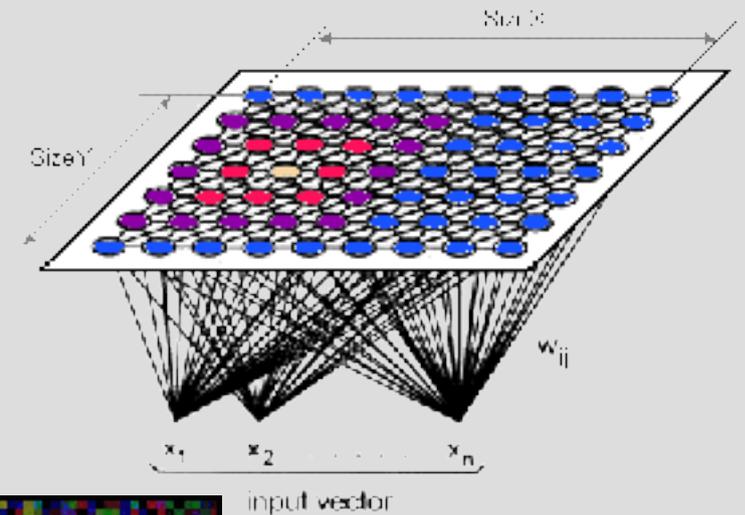


- Algoritmo de clustering.
- Como k-medias, pero con vecindad.
- Basado en un algoritmo de organización del cortex visual de von der Malsburg.
- Algoritmo simple.
- Análisis posterior
 - Planos
 - Umatrix (Clustering)



Mapa autoorganizativo de Kohonen (SOM)

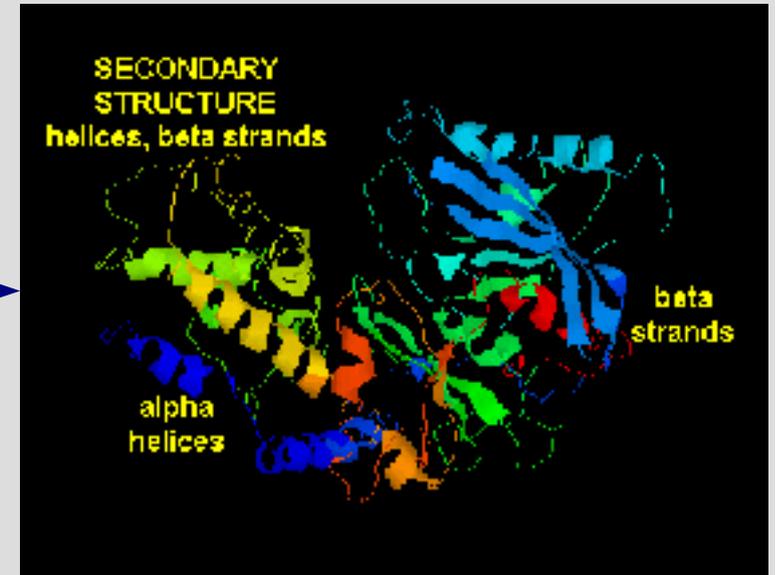
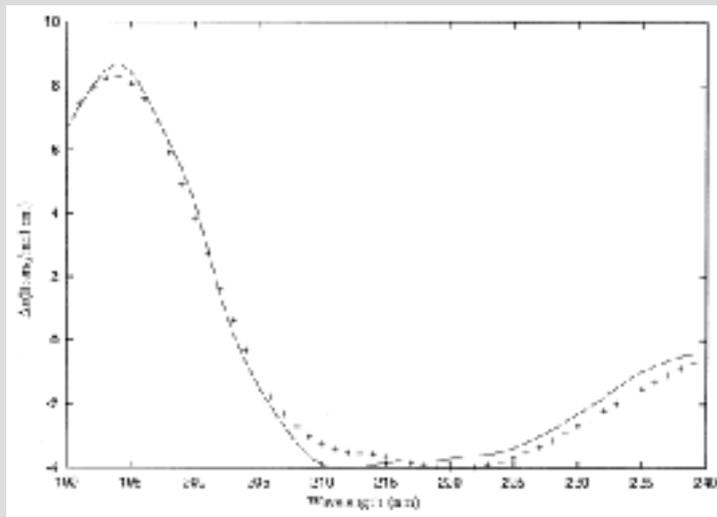
- Aprendizaje competitivo.
- No supervisado.
- Aplicaciones:
 - Agrupamiento (*clustering*).
 - Proyección.
 - Interpolación.
 - Visualización.
 - Recuperación de información





SOM: bioquímica

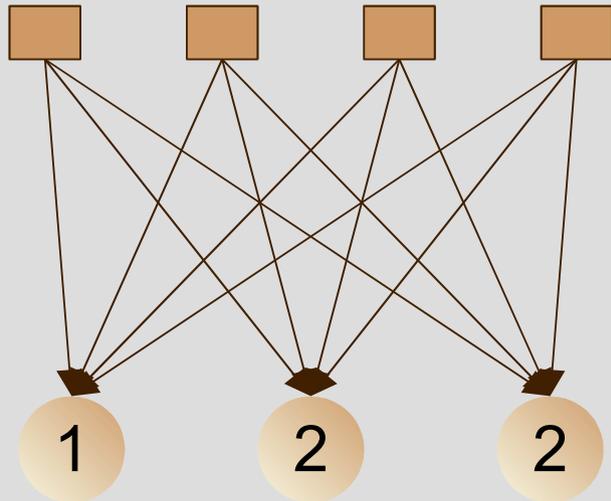
- Predicción de estructura secundaria de proteínas a partir del espectro CD



SOM y Alcohol

- Visualización de características organolépticas de rones envejecidos artificial y *naturalmente*.
 - Búsqueda del método de envejecimiento más *natural*.
- Visualización y análisis de características diferenciadoras de licores *legales* e *ilegales*.

Evolución de RNs **LVQ**: G-LVQ



- LVQ es un método de entrenamiento de vectores código con etiqueta. Cada neurona es un vector de pesos +etiqueta de clase.
- Representación binaria.
- Fitness: vectorial, con error de clasificación, tamaño y MSE, usando prioridades.

LVQ de Kohonen

Algoritmo LVQ1 (learning vector quantization)

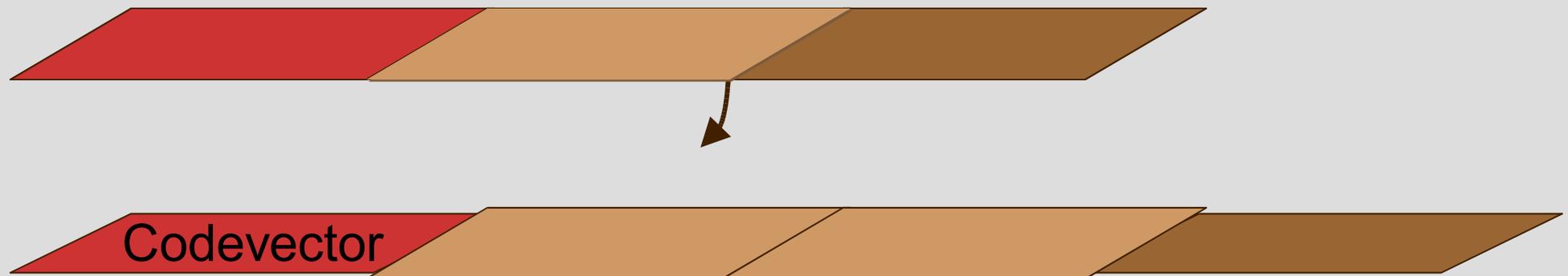
- 1 Elegir el número de neuronas == vectores peso
- 2 Inicializar los pesos
- 3 Para cada vector de entrada:
 - Calcular el más cercano (llamada neurona ganadora)
 - Si el de entrada y la ganadora están en la misma clase, acercarlos. Si no, alejarlos.
- 4 Repetir 3 hasta convergencia, o un número prefijado de iteraciones.

G-LVQ

- 1) Generar la población inicial con cromosomas de longitud variable.
- 2) Para cada *cromosoma*
 - 1) Decodificar en una red neuronal, y entrenar usando LVQ.
 - 2) Validar y evaluar el error.
 - 3) Aplicar los operadores genéticos a los mejores.
- 3) Vuelta al 2

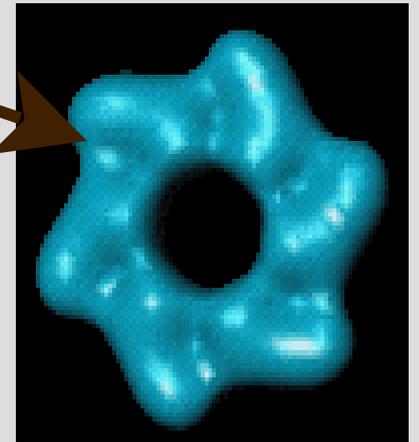
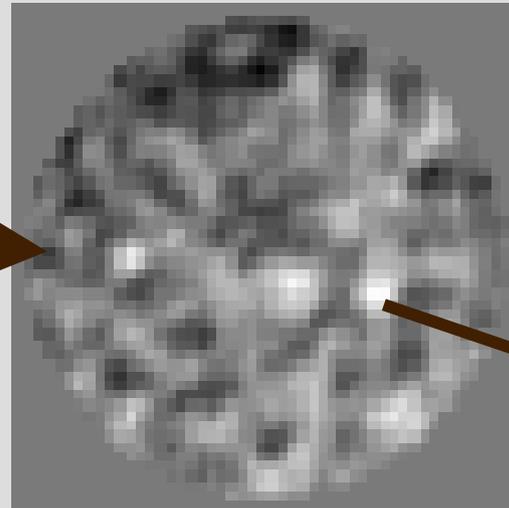
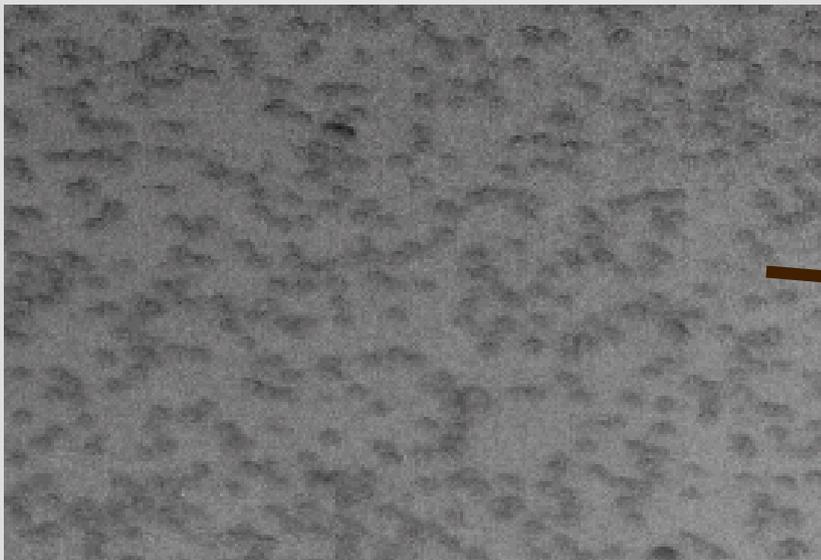
Operadores G-LVQ

- Operadores de duplicación y eliminación.
 - Vectores 'ganadores' son duplicados, los menos ganadores eliminados.



G-LVQ aplicado a clasificación de helicadas

- Paso previo a reconstrucción de imágenes 3D



G-LVQ Helicinasas

- Se usan en muchos aspectos del metabolismo.
- Estructura mal conocida.
- Las imágenes se obtienen a partir de un microscopio electrónico; se intenta la reconstrucción tras la clasificación.
- Se examina la simetría rotacional de las imágenes, y se calcula su espectro.

G-LVQ Helicasas

Algorithm	Error+ StdDev	Best	Network size (parameters)
LVQ 8-levels	16 ± 11	0	8 (128)
LVQ 16-levels	4 ± 5	0	16 (256)
QuickProp	7 ± 3	3.2	16 (272)
G-Prop	1.0 ± 0.6	0.32	16 ± 2 (272 ± 85)
G-LVQ Pop = 200	10 ± 4	7.37	8 ± 2 (128 ± 32)
G-LVQ Gen = 50	14.7 ± 0.6	13.46	9.4 ± 1.1 (150.4 ± 17.6)
G-LVQ Gen = 100	7.9 ± 0.8	7.37	9 ± 2 (144 ± 32)

Yastá

MUCHAS GRACIAS