

Proyecto Fin de Carrera
Ingeniero de Telecomunicación

REDES NEURONALES

PARA LA

OPTIMIZACIÓN DE FÁRMACOS

Autor: Cristina Thompson Recuero

Tutor: Pedro Luis González Rodríguez

Departamento de Organización Industrial y Gestión de Empresas

Escuela Superior de Ingenieros

Universidad de Sevilla

Tabla de contenido

1. JUSTIFICACIÓN Y OBJETIVOS.....	5
1.1. JUSTIFICACIÓN DEL PROYECTO	5
1.2. OBJETIVOS	7
1.3. CONTENIDO DEL PROYECTO.....	8
2. INTRODUCCIÓN A LAS REDES NEURONALES.....	10
2.1. MODELO DE UNA NEURONA ARTIFICIAL.....	11
2.1.1. Tipos de funciones de activación.....	13
2.2. ARQUITECTURAS DE UNA RED NEURONAL.....	17
2.2.1. Redes monocapa.....	18
2.2.2. Redes multicapa.....	19
2.3. MÉTODOS DE APRENDIZAJE DE UNA RED NEURONAL.....	20
2.3.1. Aprendizaje supervisado.....	21
2.3.1.1. Aprendizaje por corrección de error	21
2.3.1.2. Aprendizaje por refuerzo	22
2.3.1.3. Aprendizaje estocástico	23
2.3.2. Aprendizaje no supervisado	23
2.3.2.1. Aprendizaje Hebbiano	23
2.3.2.2. Aprendizaje competitivo y cooperativo	24
2.4. REPRESENTACIÓN DE LA INFORMACIÓN.....	25
3. EL PERCEPTRÓN	26
3.1. INTRODUCCIÓN.....	26
3.2. APRENDIZAJE DEL PERCEPTRÓN	27
4. EL PERCEPTRÓN MULTICAPA	29
4.1. INTRODUCCIÓN.....	29

4.2.	DISEÑO DE LA RED NEURONAL.....	30
4.3.	ENTRENANDO LA RED.....	33
4.3.1.	<i>Introducción</i>	33
4.3.2.	<i>El algoritmo Backpropagation</i>	35
4.3.3.	<i>Mínimos locales</i>	38
4.4.	VALIDANDO LA RED	39
5.	MÉTODOS DE REMUESTREO	42
5.1.	ESTIMACIÓN DE LA DISTRIBUCIÓN DE MUESTREO	43
5.1.1.	<i>Estimación de la distribución de población</i>	46
5.1.1.1.	<i>Estimación no paramétrica</i>	47
5.1.1.2.	<i>Estimación paramétrica</i>	48
5.1.1.3.	<i>Estimación suavizada</i>	49
5.1.1.4.	<i>Estimación basada en modelos</i>	49
5.2.	DISTRIBUCIÓN DE MUESTREO BOOTSTRAP	50
5.2.1.	<i>Distribución de muestreo bootstrap de Monte Carlo.</i> 52	
5.2.1.1.	<i>Muestras aleatorias sin reposición</i>	53
5.2.1.2.	<i>Muestras aleatorias con reposición</i>	53
5.2.2.	<i>Estimación bootstrap del error estándar</i>	54
5.2.3.	<i>Estimación bootstrap del bias</i>	54
6.	OPTIMIZACIÓN DE FÁRMACOS	56
6.1.	INTRODUCCIÓN.....	56
6.2.	DATOS	56
6.3.	PROBLEMAS POR LA INSUFICIENCIA DE DATOS	60
6.4.	EVALUACIÓN DEL USO DE LAS REDES NEURONALES	62
6.4.1.	<i>Determinación de la arquitectura y el aprendizaje</i>	62
6.4.1.1.	<i>Determinación del número de neuronas ocultas</i>	64
6.4.2.	<i>Validación de las redes neuronales.</i>	76
6.4.3.	<i>Optimización</i>	81
7.	SOFTWARE DE APLICACIÓN	86

7.1.	INTRODUCCIÓN.....	86
7.2.	CREACIÓN DE ARCHIVOS	88
7.2.1.	<i>Archivo de configuración</i>	88
7.2.2.	<i>Archivo de datos</i>	91
7.3.	ENTRENAR LA RED NEURONAL	94
7.4.	VALIDACIÓN DE LA RED NEURONAL.....	96
7.5.	OPTIMIZACIÓN.....	98
8.	CONCLUSIONES	100
8.1.	CONSECUCCIÓN DE LOS OBJETIVOS	100
8.2.	NUEVAS LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN.....	101
9.	BIBLIOGRAFÍA.....	103