

La Inteligencia Artificial como soporte a decisiones.

Miguel Cárdenas-Montes

CIEMAT
miguel.cardenas@ciemat.es

25 de Febrero 2021

Table of Contents

Modelos

DEAP-3600

Random Forests

Sesgo

Incertidumbre

GP

BDL

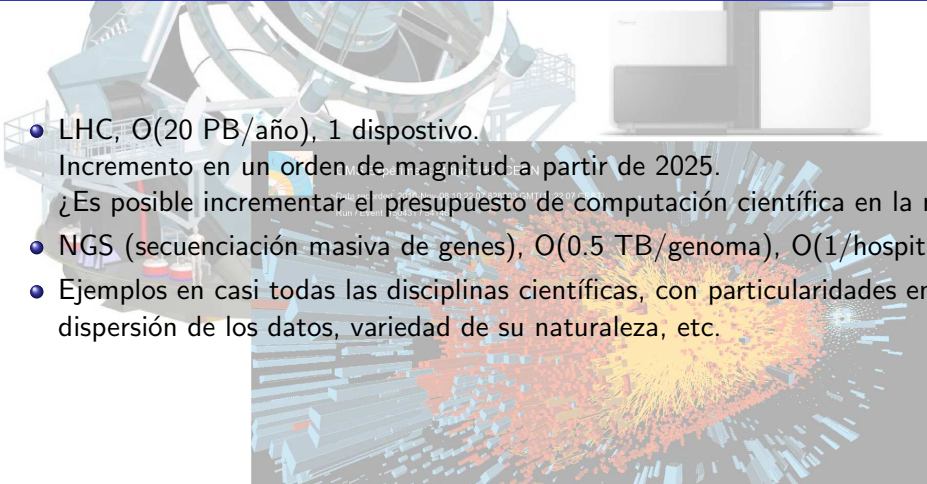
Resumen



CIEMAT-FP

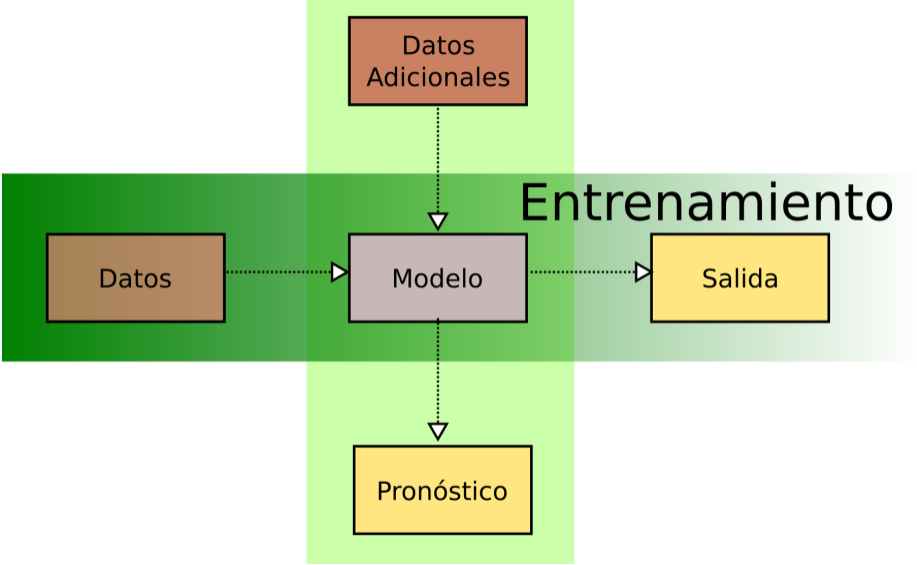
- Los objetivos científicos son:
 - La Física más allá del Modelo Estándar.
 - ¿Son los neutrinos una ventana a nueva física?
 - La naturaleza de la Materia Oscura.
 - La naturaleza de la Energía Oscura.
- Gran actividad tecnológica: ingeniería mecánica, electrónica e **computación**:
computación grid – preservación de datos e **IA**.

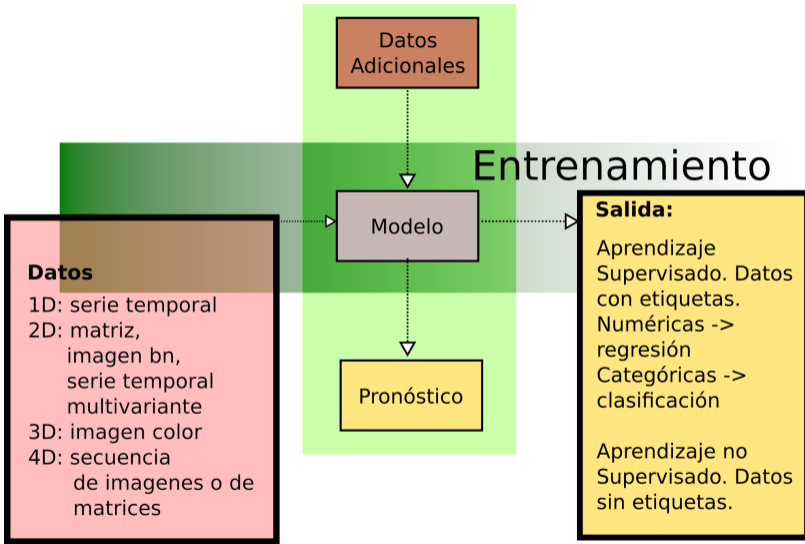
Big Data en Ciencia

- 
- LHC, $O(20 \text{ PB/año})$, 1 dispositivo.
Incremento en un orden de magnitud a partir de 2025.
¿Es posible incrementar el presupuesto de computación científica en la misma proporción?
 - NGS (secuenciación masiva de genes), $O(0.5 \text{ TB/genoma})$, $O(1/\text{hospital})$ dispositivos
 - Ejemplos en casi todas las disciplinas científicas, con particularidades en: volumen, dispersión de los datos, variedad de su naturaleza, etc.

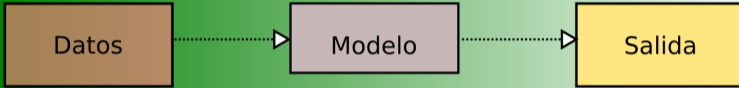
Problemas-Oportunidades del Big Data

- Gestión y manejo de los datos.
- Tiempo de procesamiento creciente.
- Pérdida de precisión de los cálculos debido a la representación numérica.
- Extracción de información de los datos.
 - Aprendizaje supervisado (clasificación y regresión).
 - Aprendizaje no supervisado: similaridad entre grupos (métricas de distancia), segmentación automática (imágenes, series temporales), identificación de datos anómalos.
 - Análisis de series temporales: pronóstico.





Entrenamiento



número de
parámetros
(inteligencia)
frente a su
interpretabilidad

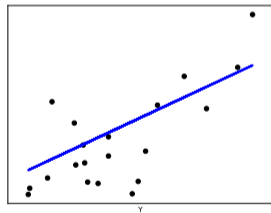
Regresión Lineal

- La forma más simple de regresión lineal implica la combinación lineal de las variables de entrada x_i y de pesos w_i (ecuación 1).

$$\hat{y}(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = w_0 + w_1x_1 + \dots + w_Dx_D \quad (1)$$

donde $\mathbf{x} = (x_1, \dots, w_D)^T$.

- La propiedad clave es que es una función lineal de los parámetros w_0, \dots, w_D .
- El modelo lineal impone **limitaciones** al modelo.
- Modelo **interpretable**: $x_1 := x_1 + 1 \implies \hat{y} := \hat{y} + w_1$.



Funciones Básicas

- La ecuación 1 puede ser escrita de forma más general si se define $\phi_0(\mathbf{x}) = 1$, (funciones básicas, $\phi(\cdot)$).

$$\hat{y}(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = \sum_{j=0}^{M-1} w_j \phi_j(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T \phi(\mathbf{x}) \quad (2)$$

donde $w = (w_0, \dots, w_{M-1})^T$ y $\phi = (\phi_0, \dots, \phi_{M-1})^T$.

- Para $\phi_j(x) = x_j$, es la regresión lineal ordinaria.
- Se asume frecuentemente que las funciones básicas son fijas y ortogonales entre ellas.
- Serie de Fourier: $\frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cdot \cos \frac{2n\pi}{T} t + b_n \cdot \sin \frac{2n\pi}{T} t)$

Regresión Logística

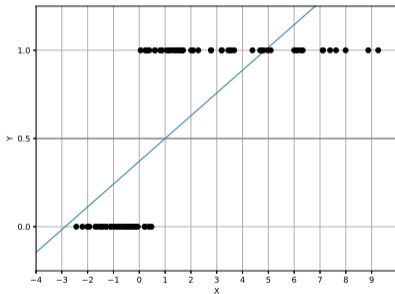


Figura: Ejemplo de regresión lineal.

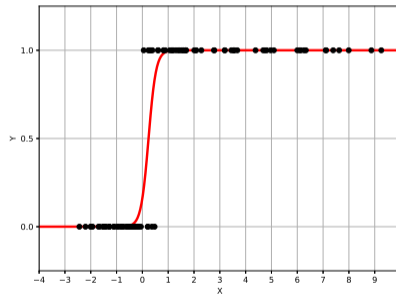


Figura: Ejemplo de regresión logística.

Regresión Logística

- La escritura de la Regresión Logística:

$$h_{\theta}(x) = g(\theta^T \mathbf{x})$$
$$g(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}}$$

- muestra similitudes con las funciones básicas:

$$\hat{y}(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = f \left(\sum_{j=0}^{M-1} w_j \phi_j(\mathbf{x}) \right)$$

donde $f(\cdot)$ es una función de activación no lineal y ϕ es la función identidad.

Regresión Logística

$$\frac{P(y=1)}{P(y=0)} = \frac{P(y=1)}{1 - P(y=1)} = e^z$$

$$\frac{\left(\frac{P(y=1)}{P(y=0)}\right)_{x_1+1}}{\left(\frac{P(y=1)}{P(y=0)}\right)_{x_1}} = \frac{e^{w_0 + w_1 \cdot (x_1+1) + \dots + w_n \cdot x_n}}{e^{w_0 + w_1 \cdot x_1 + \dots + w_n \cdot x_n}} = e^{w_1}$$

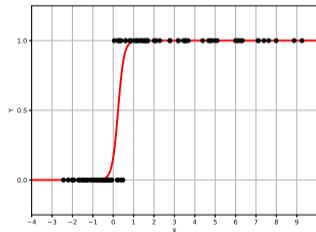


Figura: Ejemplo de regresión logística.

Regresión Logística

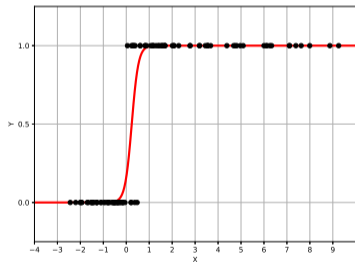


Figura: Ejemplo de regresión logística.

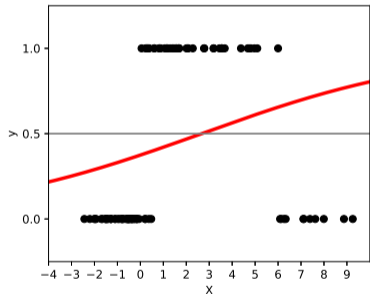
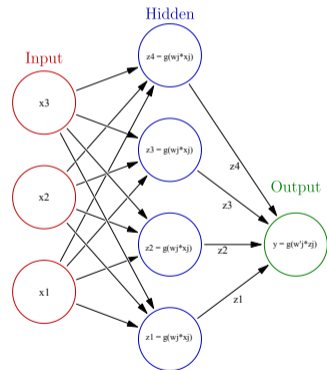


Figura: Modelo insuficiente de regresión logística.

Redes Neuronales

- Apilando y conectando estos elementos se puede formar un tipo de red neuronal llamada perceptrón multicapa (MLP).

$$\hat{y}(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = f \left(\sum_{j=0}^M w_{kj}^{(2)} h \left(\sum_{i=0}^D w_{ji}^{(1)} x_i \right) \right)$$

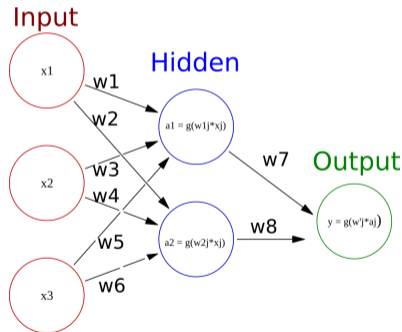


Algoritmo de Garson

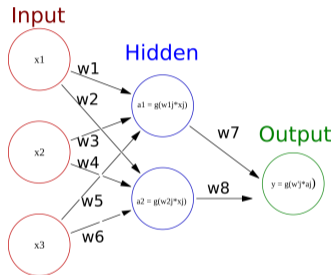
- La importancia relativa (RI) de la variable x_i se obtiene a través de la ecuación:

$$RI(x_i) = \sum_{y=1}^n \frac{|w_{xy} \cdot w_{yz}|}{\sum_{x=1}^m |w_{xy} \cdot w_{yz}|}$$

siendo n el número de neuronas de la capa oculta, m el número de variables de entrada, w_{xy} los pesos de las neuronas de la capa oculta, y w_{yz} los pesos de las neuronas de la capa de salida.



Algoritmo de Garson

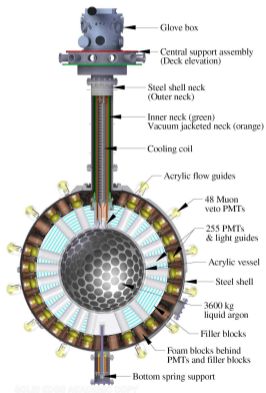


- Así para la primera variable x_1 el resultado sería:

$$RI(x_1) = \frac{|w_1 \cdot w_7|}{|w_1 \cdot w_7| + |w_3 \cdot w_7| + |w_5 \cdot w_7|} + \frac{|w_2 \cdot w_8|}{|w_2 \cdot w_8| + |w_4 \cdot w_8| + |w_6 \cdot w_8|}$$

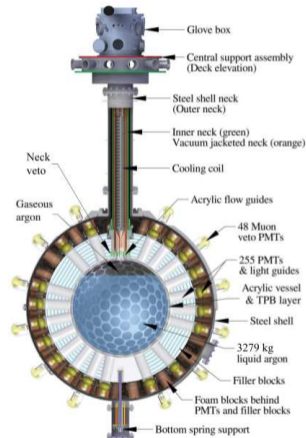
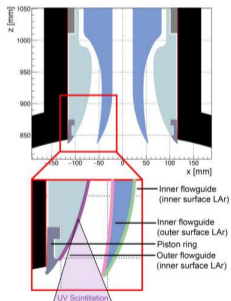
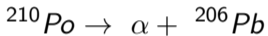
Rechazo de eventos de fondo en DEAP-3600 y IA explicable

DEAP 3600



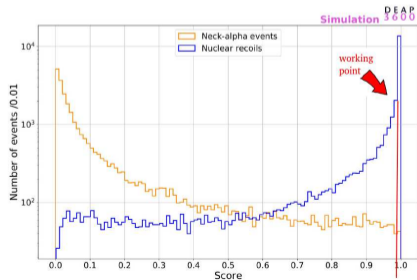
Rechazo de fondo

Eventos indeseados (fondo) provenientes de decaimientos α en las superficies internas del cuello.



Rechazo de fondo

- $D(\text{relu}, 256n) + D(\text{relu}, 32n) + D(\text{sigmoid}, 1n)$, 10 epochs, entropía cruzada binaria como función de pérdida (loss function).
- Búsqueda avariciosa para la optimización de los hiperparámetros.
- 190k eventos etiquetados generados por MonteCarlo.



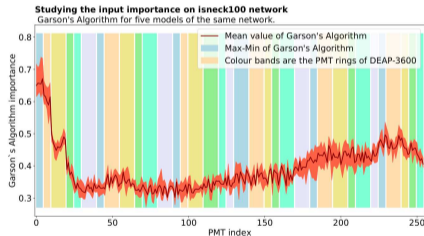
- Basado en cortes para un poder de rechazo de 99.0 %, la aceptación era **18.5 %**.
- Con MLP, 99.9 % - **42.2 %**. Luego fue mejorado a **58 %**.

XAI en DEAP

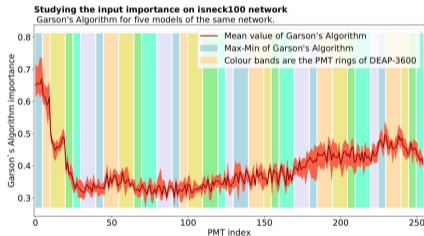
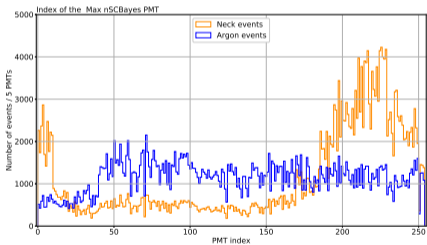
- Evaluar la importancia de las variables de entrada en la salida de la red neuronal.
- Limitada a MLP de una sola capa oculta, aunque se ha demostrado éstas son aproximadores universales a cualquier función continua.

Publications

Garson, G.D., *Interpreting neural-network connection weights* (1991)
Olden, J.D., Jackson, D.A., *Illuminating the black box: understanding variable contributions in artificial neural networks* (2002)

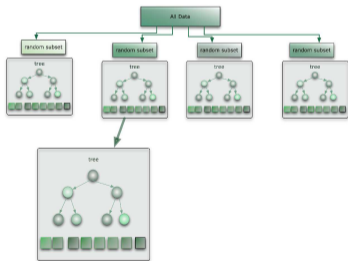


XAI en DEAP

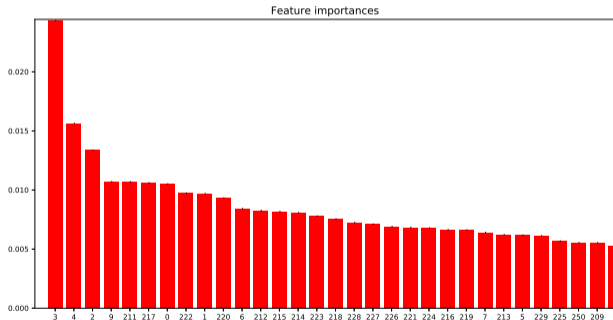
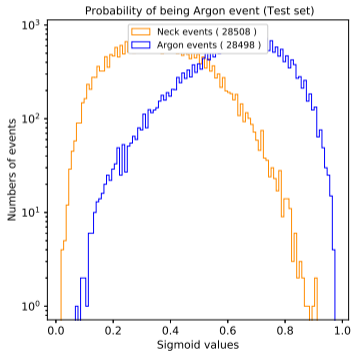


Random Forests

- Todos los modelos basados en árboles de decisión son interpretables.
 - Random Forests (RF) es un bosque de decisión compuesto de árboles independientes.
 - Cada árbol es entrenado sobre un subconjunto aleatorio de datos.
 - En cada división solo se utilizan un conjunto aleatorio de variables.
 - Paralelizable y robusto frente a datos ruidosos.

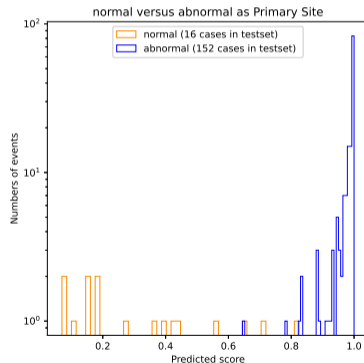


Random Forests

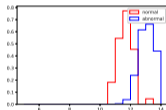
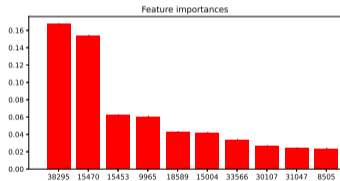


The Cancer Genome Atlas

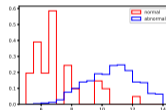
- 9 Gb en un solo fichero con 20k muestras de cáncer de diferentes órganos y tejidos, incluyendo muestras normales. Solo 518 de cáncer de cabeza-cuello y 44 normal. La expresión de 60k genes por muestra.
- ¿Cuáles son los genes que se activan en un determinado tipo de cáncer y que nos se expresan en el tejido normal?



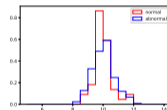
The Cancer Genome Atlas



(a) V38295



(b) V15470

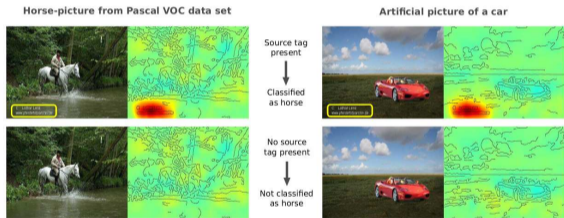


(c) V3

Elefantes, caballos y radiografías



(b) Class Activation Mapping



Publication

Lapuschkin et al., *Unmasking Clever Hans Predictors and Assessing What Machines Really Learn* (2019)

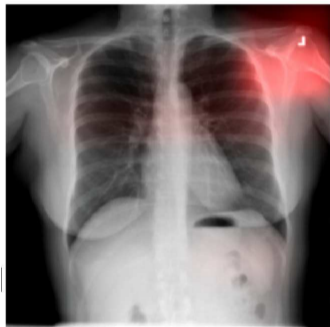
Publication

Zhou et al., *Learning Deep Features for Discriminative Localization* (2015)

Elefantes, caballos y radiografías

ENIA

La Estrategia Nacional de Inteligencia Artificial menciona que las decisiones basadas en IA deben ser transparente y explicables, y sin sesgos.



Publication

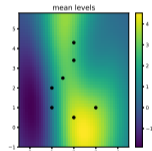
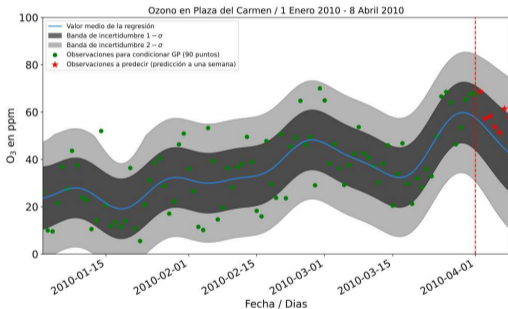
Zech et al., *Confounding variables can degrade generalization performance of radiological deep learning models* (2018)

Pronósticos con incertidumbre

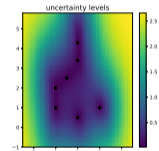
Procesos Gaussianos

- No es habitual que los algoritmos de aprendizaje automático tenga capacidad de emitir pronósticos con incertidumbre.
- Procesos Gaussianos (GP) sí, aunque es poco conocido.
- GP es una generalización de la distribución de probabilidad gaussiana.
- El elemento básico de GP es el kernel, donde el comportamiento de la correlación entre puntos experimentales es establecida.
- El número de kernels, su naturaleza (por ejemplo estableciendo correlaciones estacionarias o no), indican la cantidad de inteligencia del modelo.
- Los parámetros de los kernels del modelo optimizado pueden ser interpretado proporcionando información sobre los datos.

Propagación de la incertidumbre: [O₃] en Plaza del Carmen



(a) pronóstico



(b) incertidumbre

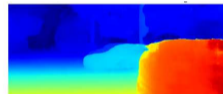
Publications

Rasmussen and Williams, *Gaussian Processes for Machine Learning* (2005)
 Neal, *Bayesian Learning for Neural Networks* (1995)

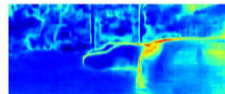
Pronósticos con incertidumbre



(a) Sensor input



(b) Depth prediction



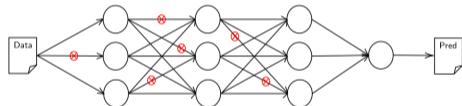
(c) Uncertainty

Publication

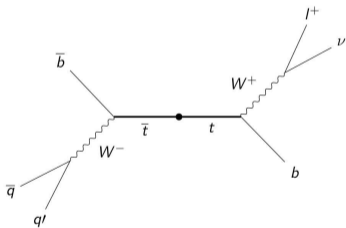
McAllister et al., *Concrete Problems for Autonomous Vehicle Safety: Advantages of Bayesian Deep Learning* (2017)

Pronósticos con incertidumbre

- Las redes neuronales bayesianas (BNN) presenta dificultades para tratar grandes volúmenes de datos.
- En el propuesta de Y. Gal (BDL) se equipara la regularización estocástica sobre algoritmos de aprendizaje profundo con BNN.
- El primer y el segundo momento de la BNN se pueden estimar con su aproximación ya que la optimización de los pesos son proporcionales.



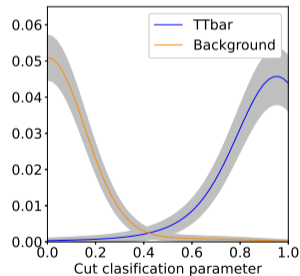
Pronósticos con incertidumbre



- $t\bar{t}$ (señal)
- W plus jets (fondo)
- Drell-Yan (fondo)
- WW (fondo)
- WZ (fondo)
- ZZ (fondo)
- Single top (fondo)

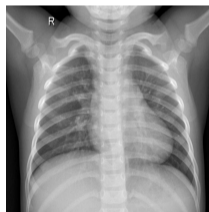
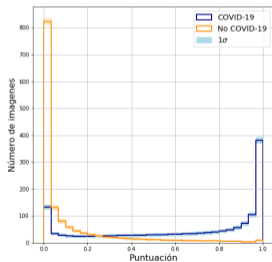
Incertidumbre

- Actualmente evaluando varios métodos más (en el problema de clasificación $t\bar{t}$), con resultados consistentes entre ellos.
- Aplicado a la propagación de incertidumbre en el pronóstico de series temporales.
- Incertidumbre epistémica (modelo) y estadística.



Incertidumbre

- Clasificación de radiografías sanas, neumonía, covid con una red convolucional tipo Inception.



(a) sana



(b) covid

Resumen

Queremos

mantener una producción científica de alta calidad.



Necesitamos

- resolver los desafíos provocados por el volumen y riqueza de datos científicos generados en la actualidad y en futuro próximo,
- más fertilización cruzada entre disciplinas y grupos de trabajo (café),
- utilizar XAI como vector de nuevo conocimiento.

Publicaciones I

Rn en LSC

- Modelling and Forecasting of the ^{222}Rn Radiation Level Time Series at the Canfranc Underground Laboratory. *HAIS* (2018)
- Ensemble Deep Learning for Forecasting ^{222}Rn Radiation Level at Canfranc Underground Laboratory. *SOCO* (2019)
- PBIL for optimizing hyperparameters of Convolutional Neural Networks and STL Decomposition. *HAIS* (2020)
- Nowcasting for improving radon forecasting at Canfranc Underground Laboratory.

Contaminación

- Forecast Daily Air-Pollution Time Series with Deep Learning. *HAIS* (2019)
- Time Series Decomposition for Improving the Forecasting Performance of Convolutional Neural Networks. *CAEPIA* (2018)
- Evaluation of the Impact of Low-Emission Zone: Madrid Central as a Case Study. *arxiv* (2020)
- Dynamic Price of Parking Service based on Deep Learning.

Publicaciones II

Física de Partículas

- Neural Networks for Background Rejection in DEAP-3600. *HAIS* (2020)

Búsqueda de datos anómalos

- Search of Extreme Episodes in Urban Ozone Maps. *SOCO* (2019)
- Detection of Anomalous Episodes in Urban Ozone Maps. *Expert Systems, Wiley* (2021)

XAI

- Understanding the input-output relationship of neural networks in the time series forecasting radon levels at Canfranc Underground Laboratory. *arxiv* (2021)

Propagación de la incertidumbre

- Uncertainty estimation in the forecasting of the ^{222}Rn Radiation Level Time Series at the LSC. *Logic Journal of IGPL* (2020)
- Estimation of machine learning model uncertainty in particle physics event classifiers.

TFMs

US

- Inteligencia artificial explicable aplicada a la Física de Partículas, *Olmo Chiara* (2020-2021)
- Optimización de arquitectura de redes neuronales con algoritmos evolutivos, *Pedro García Vitoria* (2020-2021)
- Desarrollo de algoritmos basados en inteligencia artificial para clasificación de eventos en los experimentos DEAP-3600 *Juan Antonio Ramírez Pérez* (2019-2020)
- Segmentación automática de series temporales con algoritmos de aprendizaje no supervisado con aplicación a la calidad de aire en Madrid, *Alejandro Luque Cerpa* (2019-2020)
- Optimización Automática de Hiperparámetros en Modelos de Aprendizaje Automático mediante PBIL, *Andrés Vasco Carofilis* (2018-2019)
- Técnicas de Deep Learning para la predicción de los niveles de contaminación, *Juan Cañete Rodríguez* (2018-2019)
- Aplicaciones del Aprendizaje: Modelado y Pronóstico de la Serie Temporal de ^{222}Rn en el Laboratorio Subterráneo de Canfranc, *Iván Méndez Jiménez* (2017-2018)

UCM-UPM

- Aplicación de redes neuronales a la clasificación y propagación de incertidumbre de procesos físicos en el experimento CMS, CERN, *Julia Vázquez Escobar* (2019-2020)

UCM

- Desarrollo de una red neuronal para rechazar eventos de fondo en el detector de materia oscura DEAP-3600, *Iñaki Rodríguez García* (2018-2019)
- Clasificación de objetos cosmológicos usando Redes Neuronales Convolucionales, *Enrique Galceran García* (2018-2019)

IA ODS

