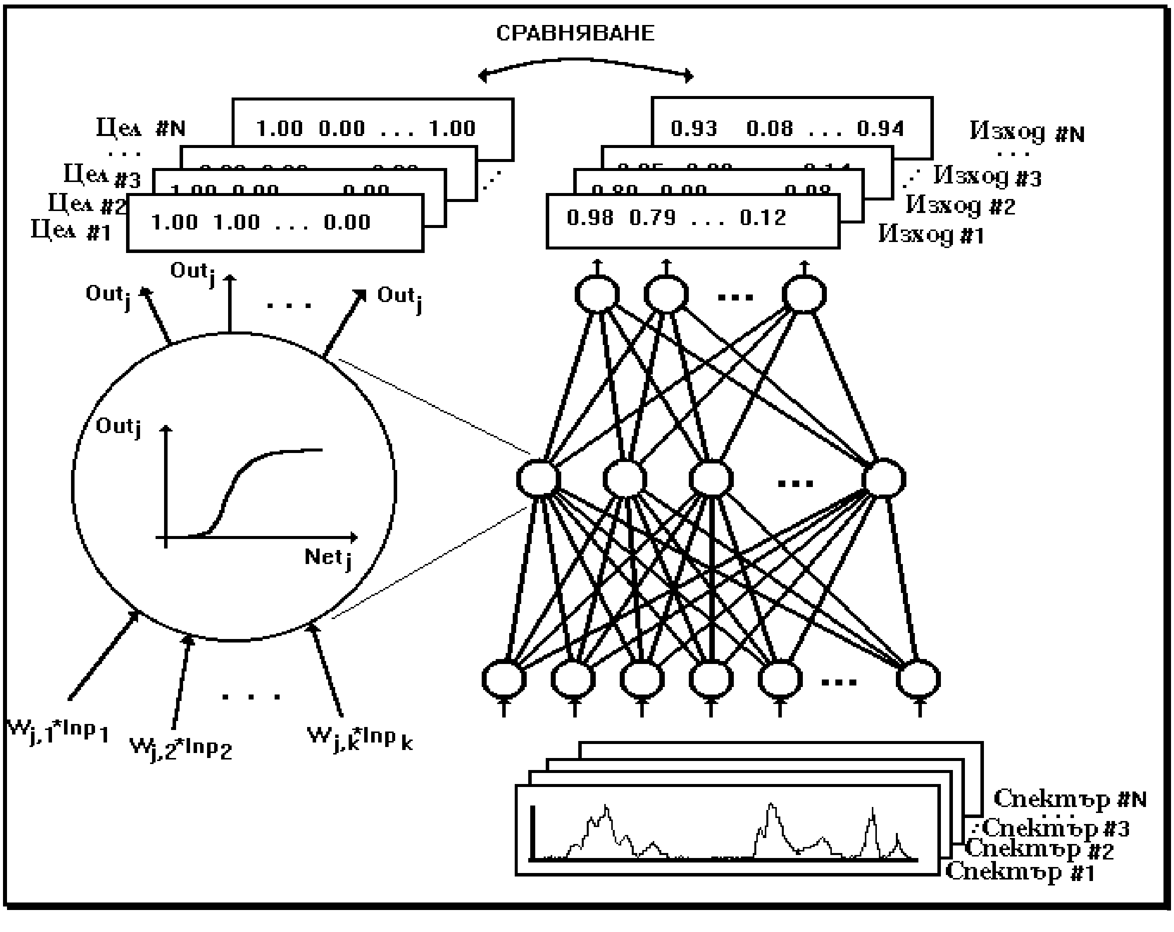
Лекция 11

Изкуствени невронни мрежи

Изкуствените невронни мрежи (ИНМ) са математически обекти, които изобразяват едно векторно пространство в друго. Те са изградени от единици, наречени неврони, които обработват входящите сигнали и препращат изхода към други неврони. Съществуват няколко класа невронни мрежи [1], които се различават по схемата на свързване на невроните, по стойностите на обработваните сигнали и по вида на преобразуващата функция.



Фигура 11.1. Схема на изкуствена невронна мрежа с право разпространение на сигналите и обратно разпространение на грешките.

11.1. ИНМ с право разпространение на сигналите. Засега най-много приложения в спектроскопията имат невронните мрежи, разпространяващи напред сигналите (*forward feed*) и извършващи корекция на грешките в обратна посока (*back propagation of errors*). Невронните мрежи с обратно разпространение на грешките са изградени от няколко слоя неврони: входен слой, няколко скрити слоя и един изходен слой. На фигура 11.1 е изобразена невронна мрежа с един скрит слой. Всеки неврон получава „претеглени" сигнали от всички неврони на предхождащия слой и изпраща своя изходен (обработен) сигнал към всички неврони на следващия слой. Полученият (чист) сигнал на един неврон, Net_j, е сума от произведенията на коефициентите на мрежата (силата на връзките - $W_{j,k}$) и изходните сигнали от предхождащия слой (Out_k), уравнение (11.1).

$$Net_j = \Sigma W_{j,k}*Out_k \tag{11.1}$$

Net_j се обработва по-нататък от т.н. изглаждаща (*squashing*) функция (фигура 11.1, в ляво), за да се получи изходен сигнал в интервала 0.0 - 1.0. Могат да се използват редица функции, но най-разпространени са приложенията, в които сигналите се обработват по формула (11.2).

$$Out_j = 1/[1 + \exp(-Net_j+offset_j)] \tag{11.2}$$

Преобразуващата функция превръща чистия сигнал в числа между нула и единица. Ако нямаше тази функция и нямаше скрит слой, ИНМ щеше да дава резултати, аналогични на линейната многопроменлива регресия, но наличието на един или няколко скрити слоя, както и тази нелинейна преобразуваща функция водят до нелинейно изображение на входните в изходни вектори.

Когато невронните мрежи се използват за обработка на спектри, входните вектори се формират от спектралната крива или набор от други спектрални признаци, които се представят като един многомерен вектор. Изходните вектори се получават от информацията за структурата на съответните химични съединения; те също са вектори, но с координати нула или единица, показващи наличието (1) или отсъствието (0) на даден структурен фрагмент. Съответно броят на входните/изходните неврони съвпада с размерността на входните/изходните вектори.

11.2. Обучение на ИНМ. За да се получат спектро-структурните корелации между спектрите и съответните структурни дескриптори е необходимо невронната мрежа да бъде обучена с подходяща по обем и представителност извадка от спектри на съединения с известна структура, наречена *обучаваща извадка*. Входните вектори (спектрите) се пропускат последователно през мрежата, като получените изходни вектори се сравняват с целевите изходни вектори, отразяващи структурата на съединенията.

Получените грешки се "разпространяват" обратно като биват променяни стойностите на коефициентите на мрежата [1]:

$$W_{i,j}(new) = W_{i,j}(old) + \eta * \Delta W_{i,j}(calc) + \mu * \Delta W_{i,j}(old) \qquad (11.3)$$

$\Delta W_{i,j}(calc)$ включва разпространението на грешката и се изчислява чрез параметри, специфични за всеки слой от неврони. Параметърът η се нарича скорост на обучение (*learning rate*) и определя големината на градиента, т.е. влияе върху сходимостта на оптимизационната процедура. Параметърът μ се нарича моментен коефициент (*momentum factor*) и заедно с $\Delta W_{i,j}(old)$ спомага за преодоляване на локалните минимуми, запазвайки една стабилна посока на преход към минимума - пълното съвпадение на реалните и целевите изходи.

Като критерий за спиране на обучението се използвана относителната промяна на средно-квадратичната грешка, **MSE**, на изходите от мрежата. **MSE** се изчислява по следната формула:

$$MSE = \Sigma\Sigma(O_{k,j} - T_{k,j})^2, \quad (11.4)$$

където лявата сума е по κ, т.е. по всички образи в обучаващата извадка, а втората сума е по j, т.е. по всички изходи от невронната мрежа. $O_{k,j}$ е целевият, а $T_{k,j}$ реалния изход за k-тия образ на j-тия изходен неврон.

Именно стойностите на коефициентите $W_{i,j}$ съдържат спектро-структурните корелации, при което знанията се пазят подобно на тези в човешкия мозък - разпределено.

За да се разбере обучителния процес и корекцията на коефициенти, която става при него, трябва да се разгледа **MSE** от формула (11.4) като функция на коефициентите и офсетите на ИНМ. Нека използваме следните означения, дадени в таблицата

Величина*	**Смисъл, тълкование**
I	Брой входни неврони
H	Брой скрити неврони
O	Брой изходни неврони
$\mathbf{w21_{h,i}}$	Коефициент между h^я скрит и i^я входен неврон
$\mathbf{w32_{h,i}}$	Коефициент между o^я изходен и h^я скрит неврон
$\mathbf{Of2_h}$	Офсет във функцията на h^я скрит неврон
$\mathbf{Of3_o}$	Офсет във функцията на o^я изходен неврон

* **21** във **w21** идва от факта, че това е коефициент, който свързва неврон от 2^ри слой (скрития) с неврон от 1^ви слой (входния). Подобен смисъл има означението за **w32**.

Това е една сложна, нелинейна функция[1]

$$\mathbf{MSE = f(W21_{1,1}\ldots W21_{H,I},\ W32_{1,1},\ldots W32_{O,H},\ Of2_1\ldots\ Of2_H,\ldots\ Of3_1\ldots\ Of3_O)} \quad \mathbf{(11.5)}$$

Смисълът на корекциите $\Delta W_{i,j}$ в уравнение (11.3) е, че векторът

$$\mathbf{(\Delta W21_{1,1}\ldots\Delta W21_{H,I},\ \Delta W32_{1,1},\ldots\ \Delta W32_{O,H},\ \Delta Of2_1\ldots\ \Delta Of2_H,\ldots\ \Delta Of3_1\ldots\ \Delta Of3_O)}$$

[1] Това означение на функцията f() няма никаква връзка с преобразуващата функция, която се разглежда в задачите на тази лекция и на семинар 11.

представлява градиентът на функцията (11.5) по коефициентите и офсетите (нейните променливи), т.е. това е един градиентен метод за спускане (*gradient descent*).

Литература

1. J. Zupan, J. Gasteiger; *Neural Networks for Chemist: An Introduction*. VCH Publishers, Weincheim, Germany, 1993.
2. D.E. Rumelhart (Ed.); *Parallel Distributed Processing*. MIT Press, Cambfidge, USA, 1986.
3. T. Kohonen; *Self-Organization and Associative Memory*. Springer Verlag, Berlin, 1988.
4. P.J. Werbos; *The Roots of Backpropagation*. John Wiley, New York, 1994.

Въпроси и задачи

11.1. Проверете какво става с функцията `y = 1/[1 + exp(-x+const)]` при клонене на x към -∞. А към +∞? Обърнете внимание, че това е преобразуващата функция от уравнение (11.2). Преобразувайте тази функция във вида `y = exp(x-const)/[1 + exp(x-const)]` – използвайте равенството `1/exp(x) = exp(-x)`.

11.2. Диференцирайте функцията от задача 11.1. Проверете че тя няма нито локален максимум, нито локален минимум и функцията е нарастваща в целия интервал от -∞ до +∞ т.е. първата производна е винаги положителна.

11.3. Получете втора производна на функцията от задача 11.1. и проверете, че тя е нула за `x = const`. В тази точка първата производна има максимална стойност, което ще рече, че преобразуващата функция се променя най-бързо в нея.

11.4. От резултатите от задачи 11.1 – 11.3 съобразете общия вид на функцията. Начертайте нейна приблизителна графика за x от -9 до + 11 при const = 1.0.