

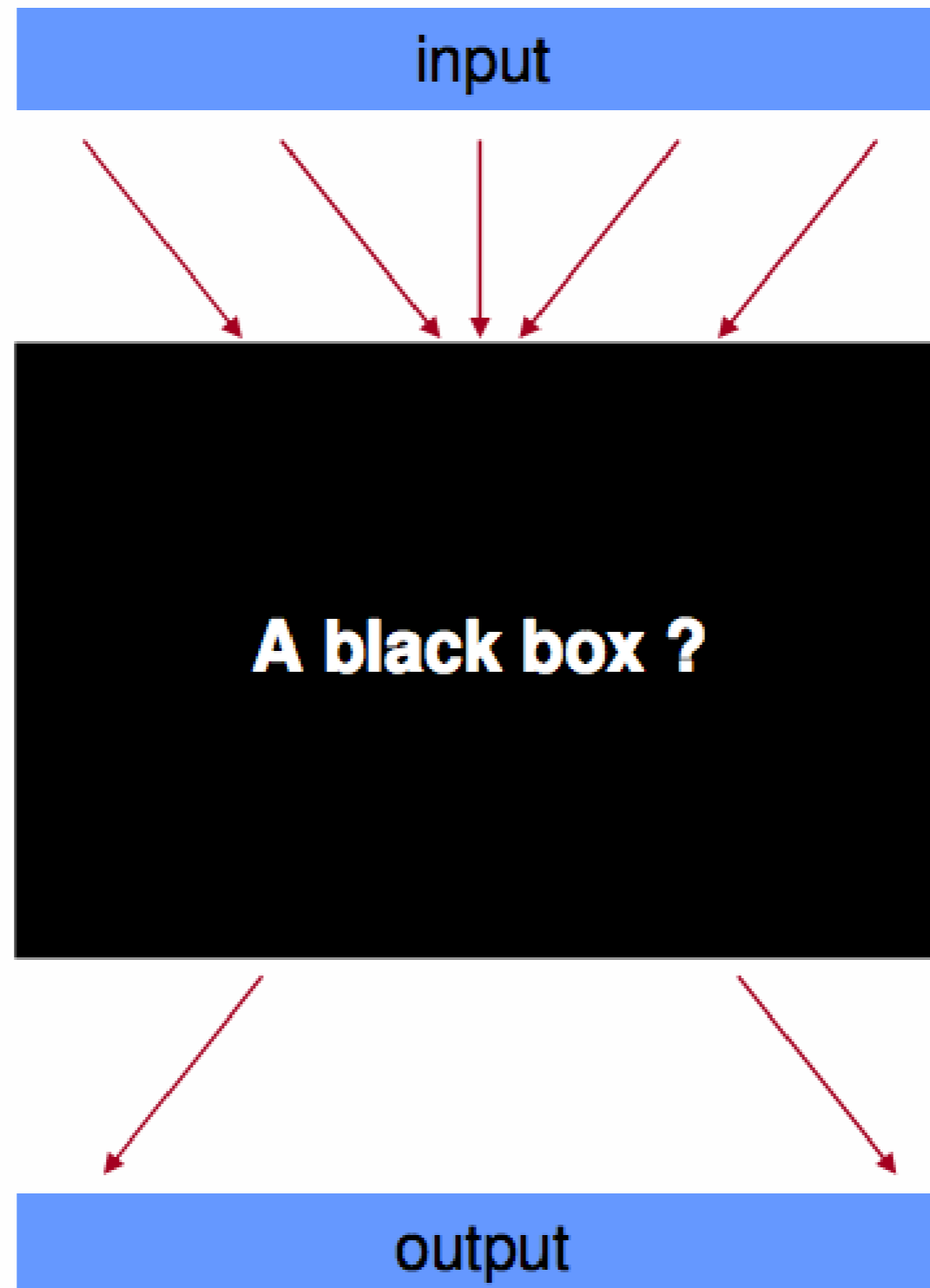
Pokročilá chemoinformatika

Neparametrické modely II
únor 2017

ASNN (ASsociative Neural Networks)

- Statistické metody používají informace a “učení”.
- Mozek ale nepotřebuje žádné statistické metody pro učení.
- Neuronové sítě simulují nervový systém za použití algoritmů a matematických modelů.

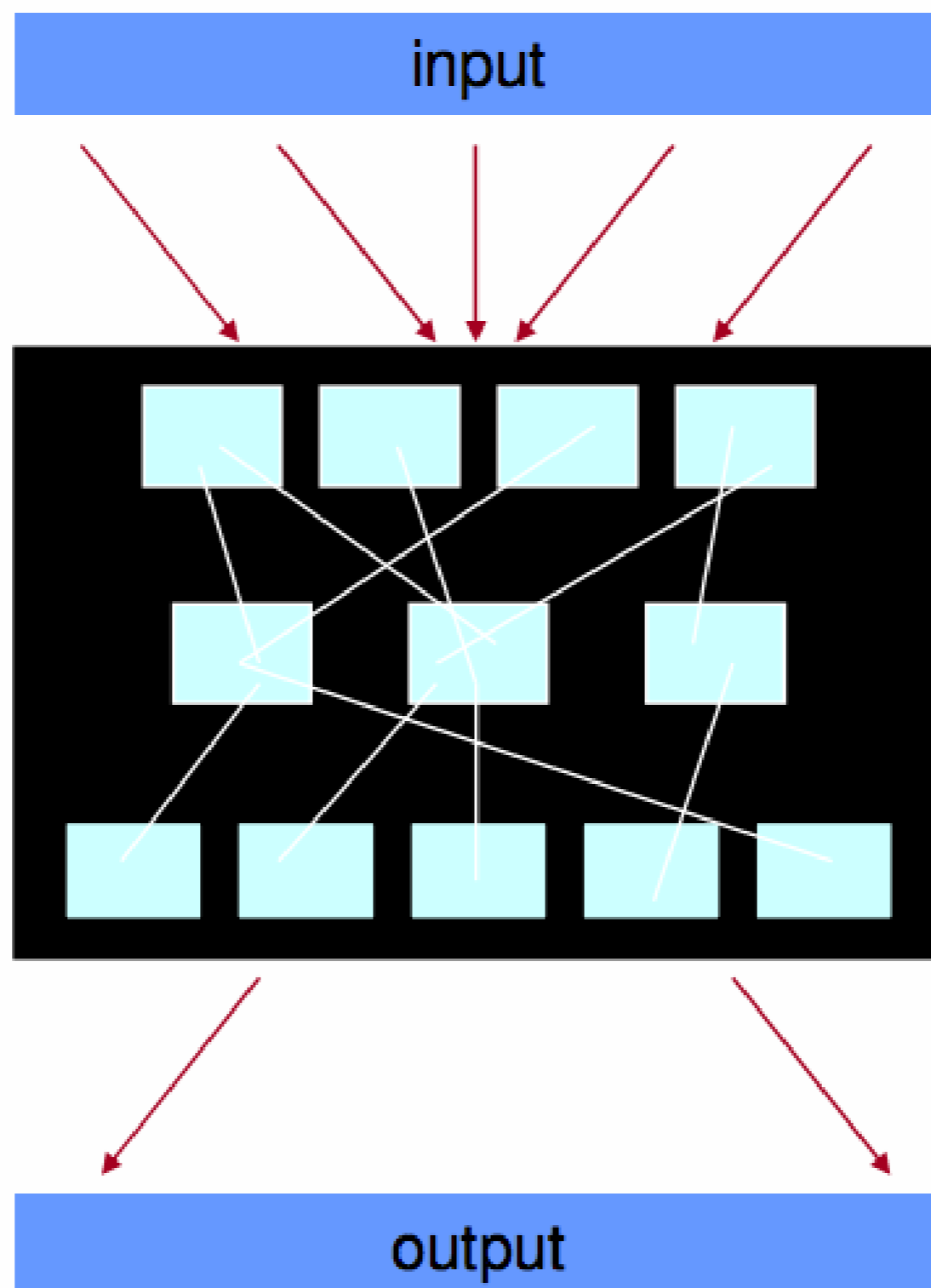
NN – black box?



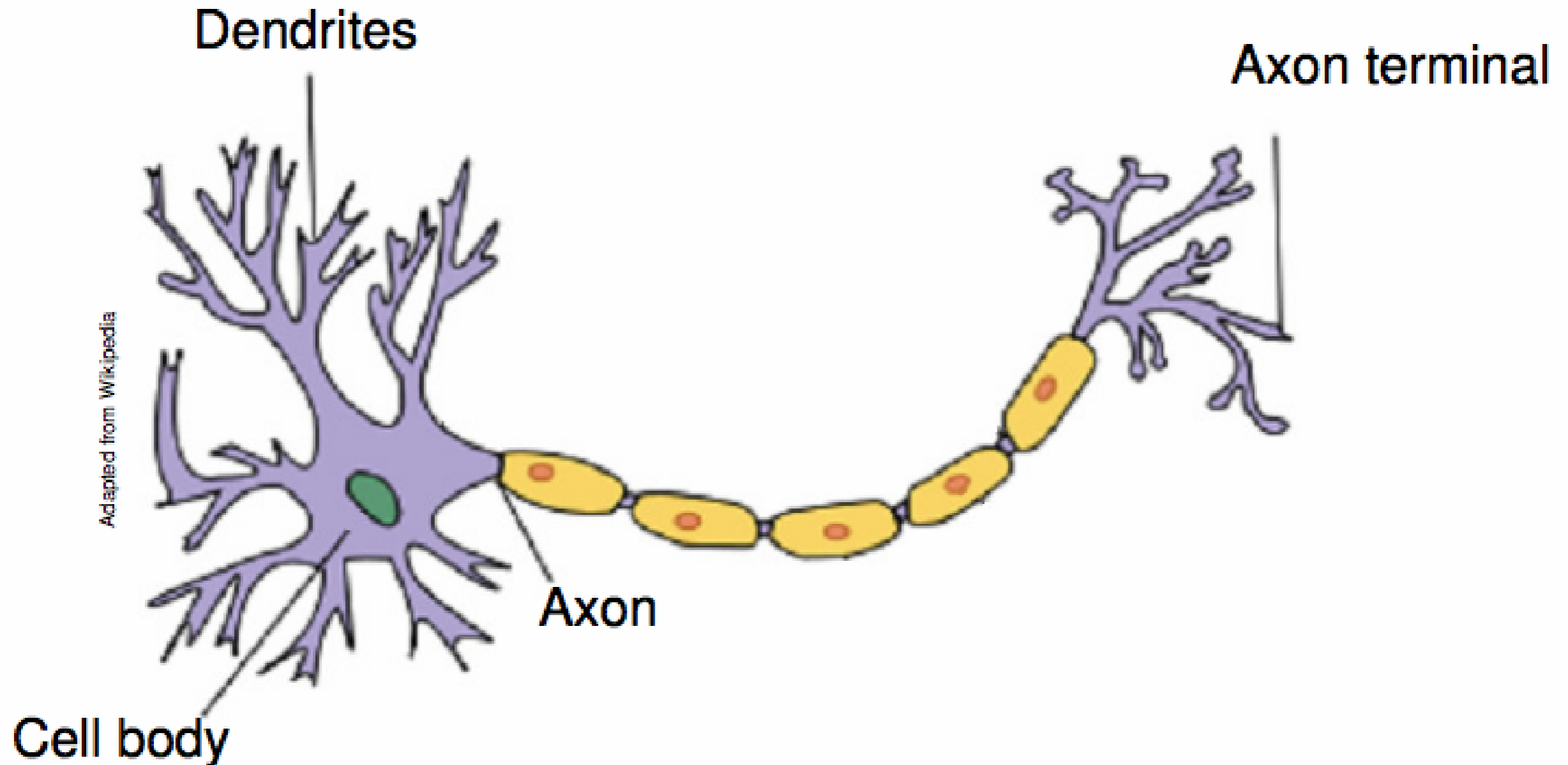
NN – black box? NE!

spojené
funkční
jednotky

NEURONY



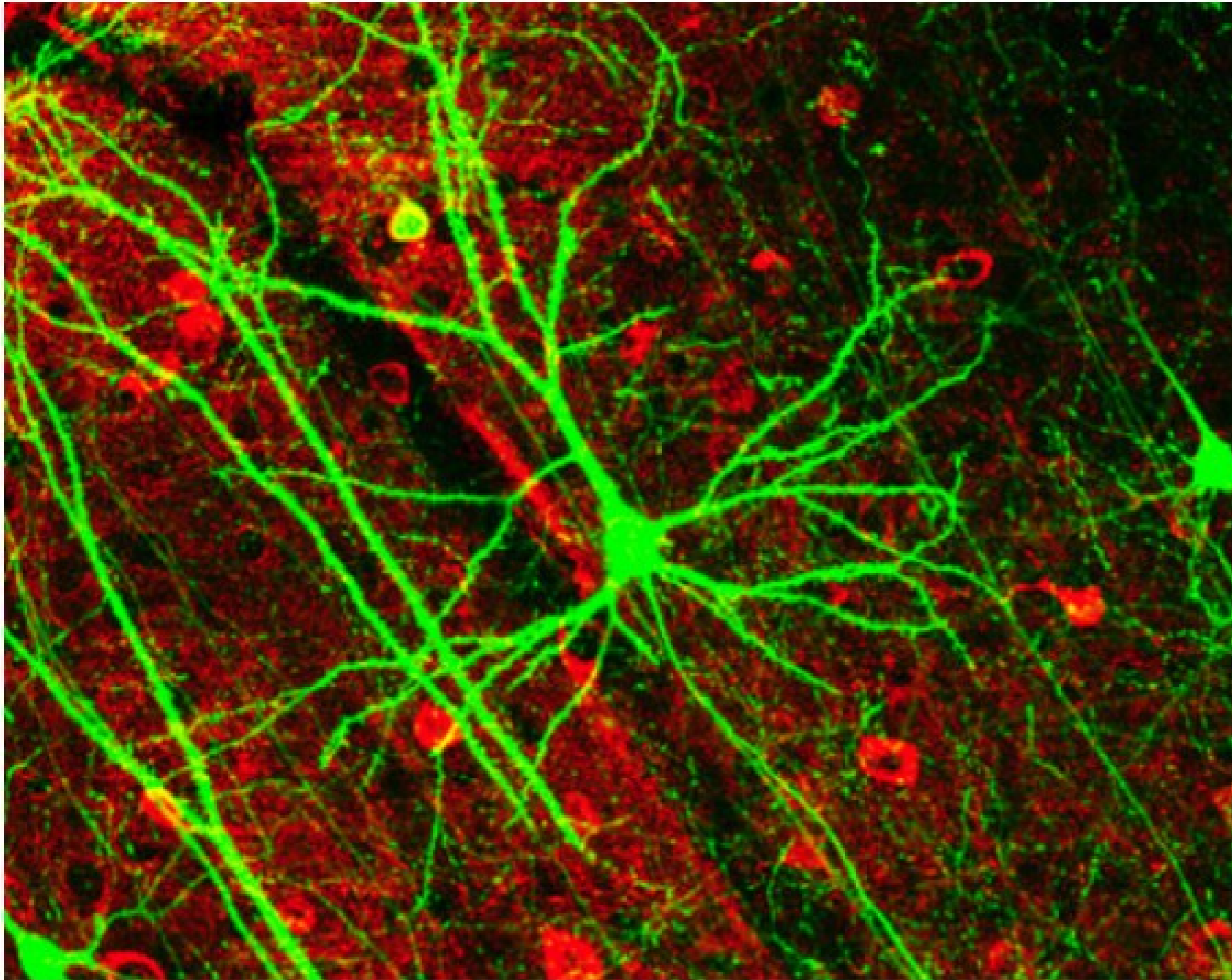
Biologický neuron



The human nervous system has ca. 10^{15} neurons.

Transmission of an electric signal between dendrites and axons occurs through the transport of ions

Biologický neuron



Neurons in the superficial layers of the visual cortex in the brain of a mice.

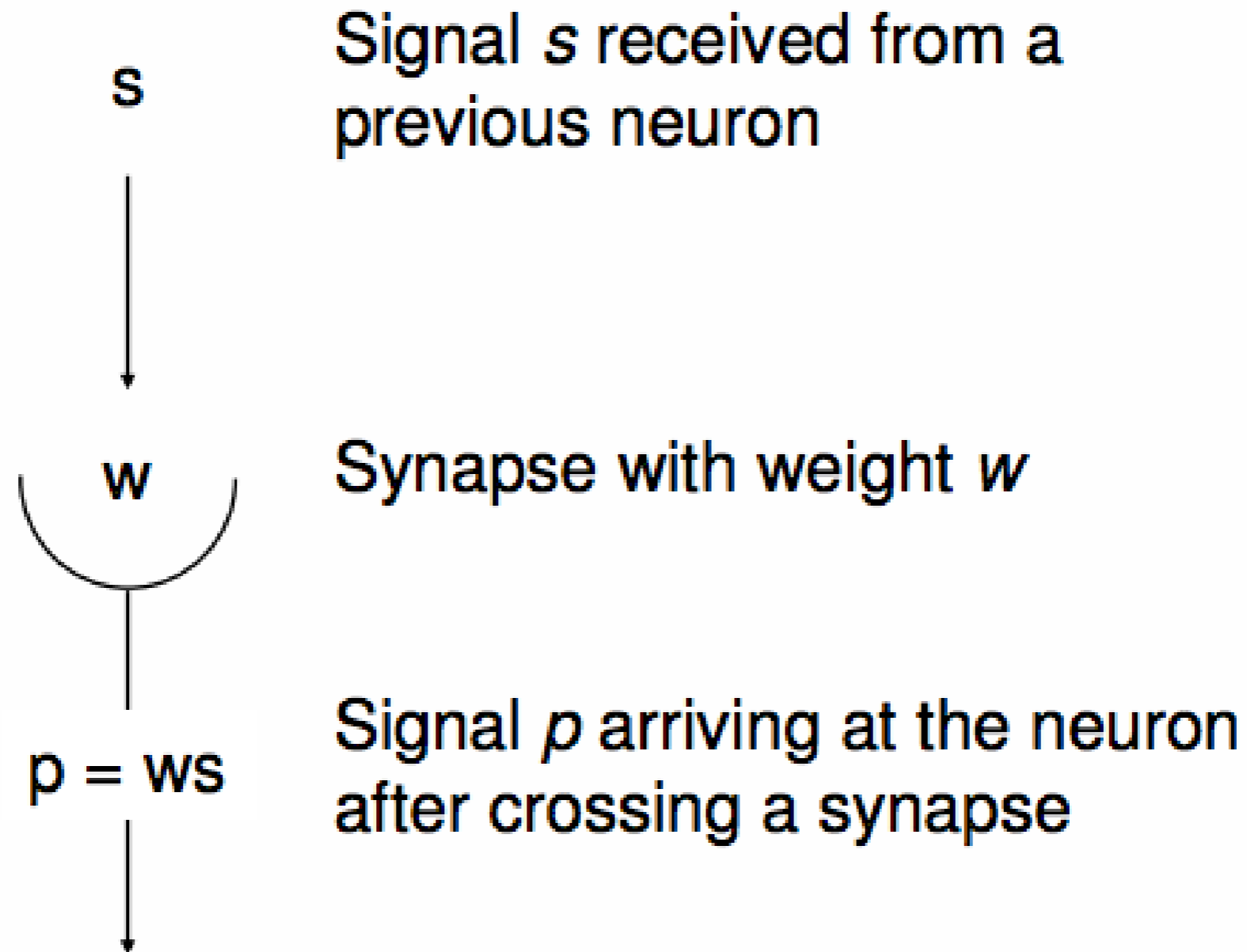
PLoS Biology Vol. 4, No. 2, e29 DOI: 10.1371/journal.pbio.0040029

Co je nejdůležitější pro neurony?

Co je nejdůležitější pro neurony?

SÍŤ (NETWORK)

Přenos signálu



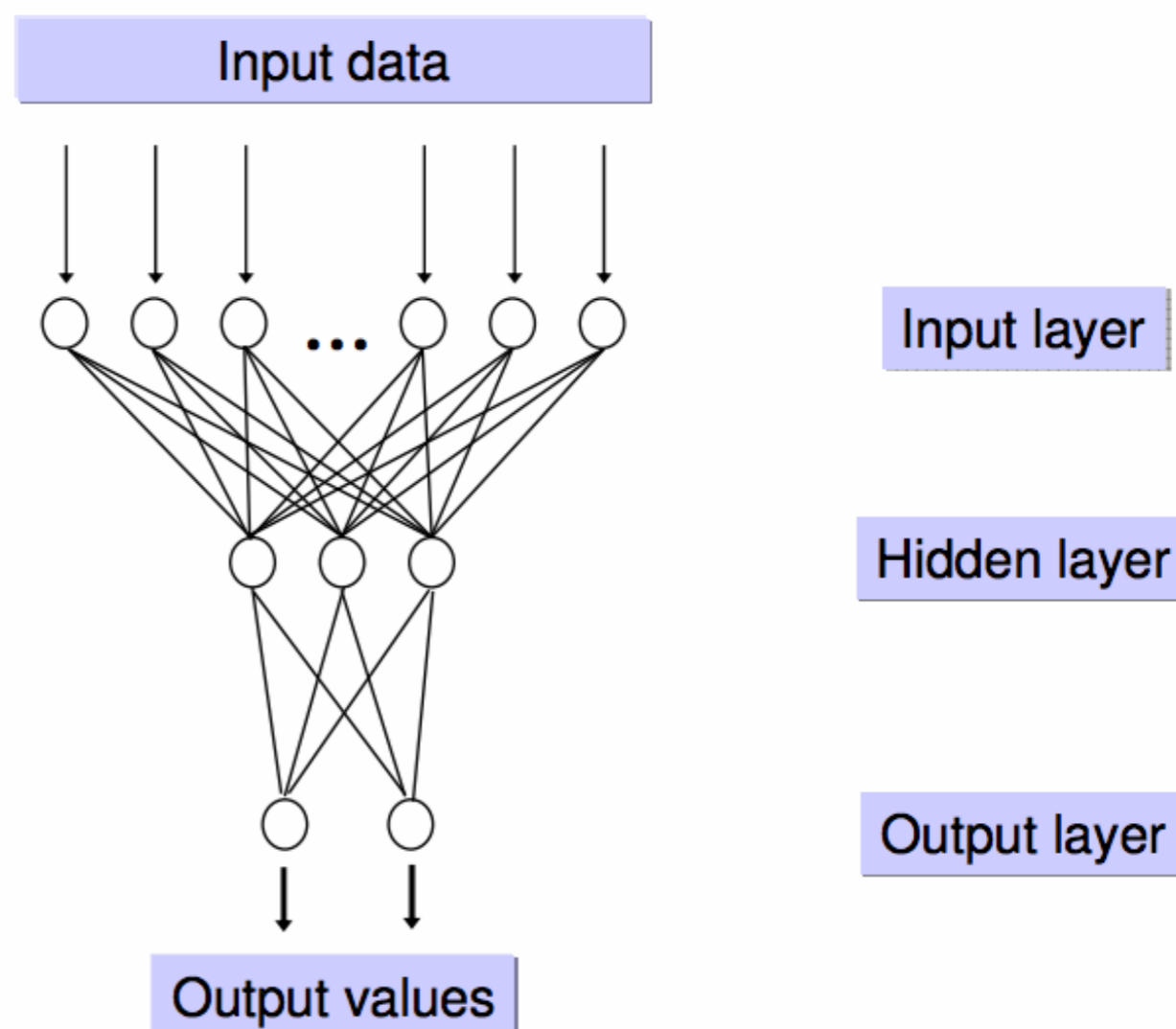
In artificial neurons, the synaptic strength is called **weight**.

Synapse a učení

- **Učení a paměť jsou považovány za výsledek dlouhodobých změn synaptické síly.**
- **V umělých neuronových sítích dochází k učení opravou váhy.**

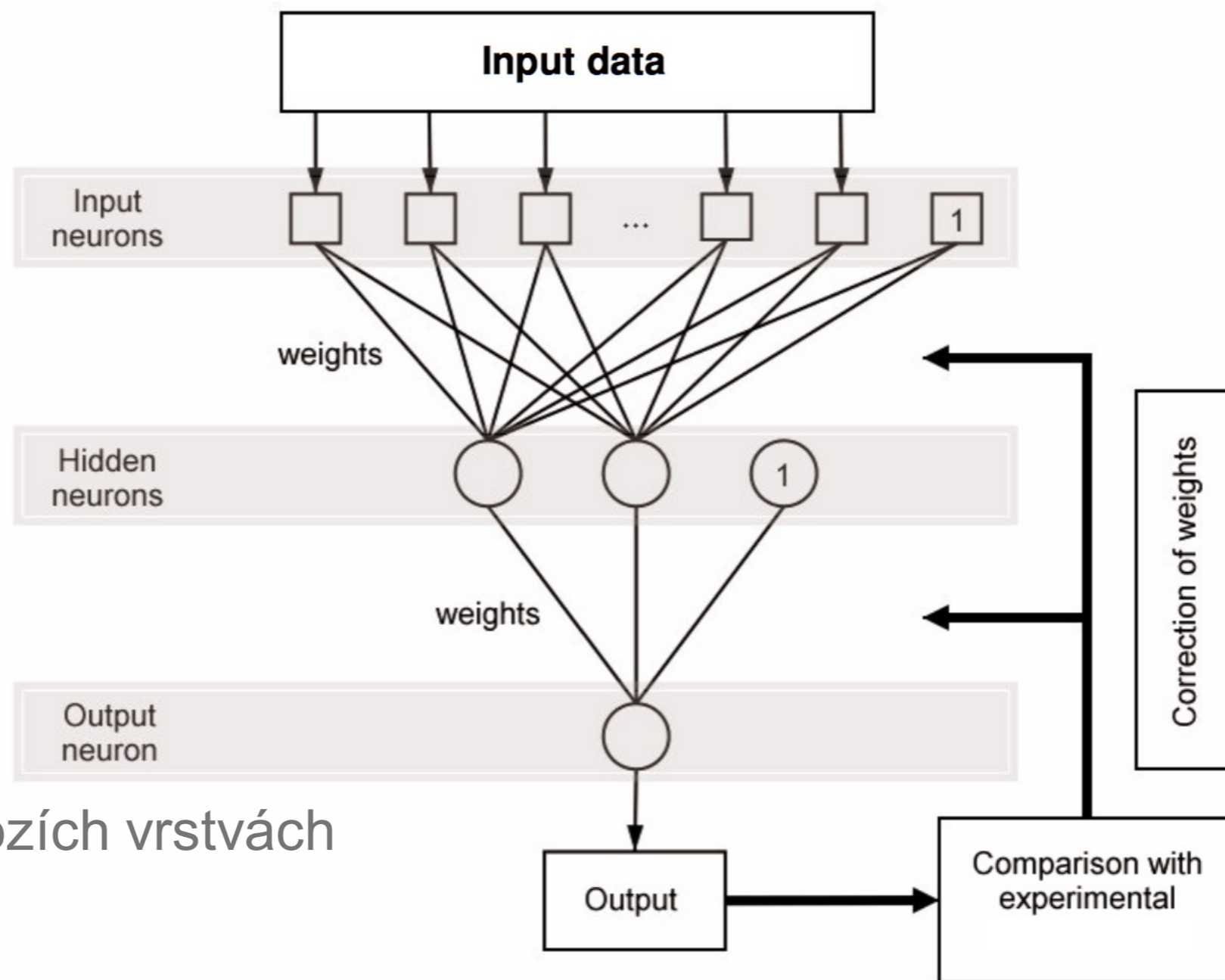
Neuronové sítě – parametry neuronových sítí

- Topologie sítě
 - Počet vstupů, výstupů a vrstev ve skryté vrstvě
- Rekurze



Backpropagation – úprava váh

1. Nahodné váhy
2. Síť se vstupem X
3. Výpočet ve všech vrstvách
4. Porovnání s oček. Výstupem
5. Korekce váh v poslední vrstvě
6. Korekce váh v předchozích vrstvách
7. Aplikace korekcí



Průběh učení



Ukázka

- <http://playground.tensorflow.org/>

↻ ▶

Iterations: 000,000

Learning rate: 0.03

Activation: Tanh

Regularization: None

Regularization rate: 0

Problem type: Classification

DATA

Which dataset do you want to use?



Ratio of training to test data: 50%

Noise: 0

Batch size: 10

FEATURES

Which properties do you want to feed in?

X_1



X_2



X_1^2



X_2^2



X_1X_2



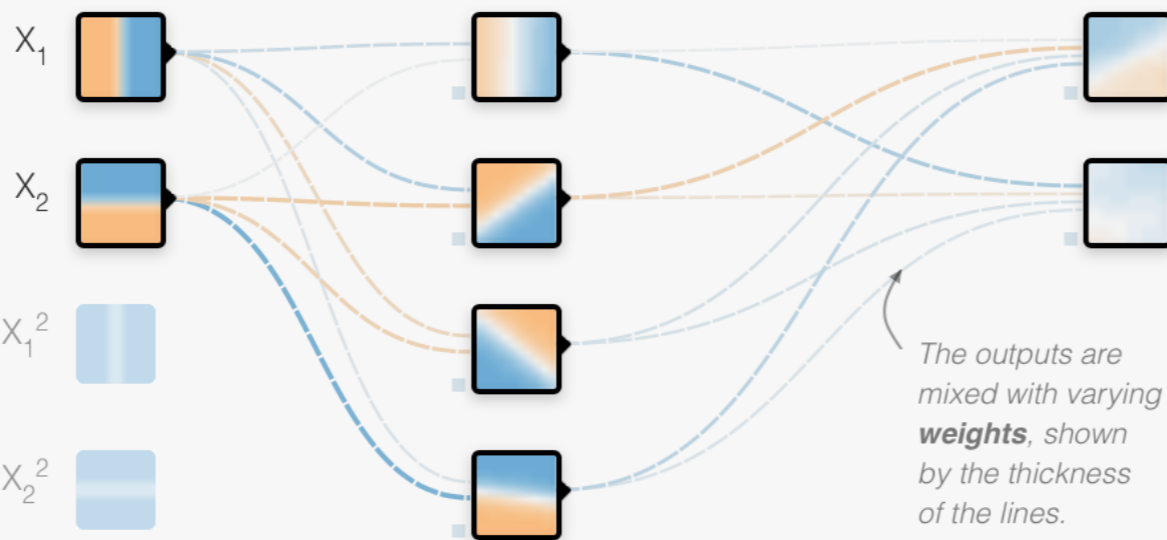
2 HIDDEN LAYERS

+ -

4 neurons

+ -

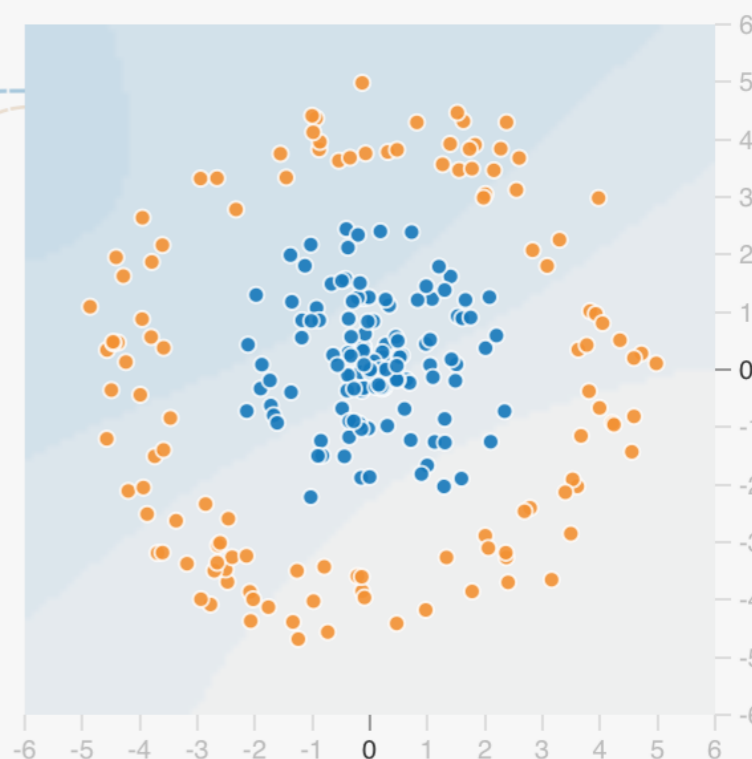
2 neurons



OUTPUT

Test loss 0.510

Training loss 0.500



Výhody a nevýhody ANN

- Výhody:
 - Robustní na libovolný problém
 - Výuka hraní her, rozpoznávání obrázku, ...
 - <https://www.youtube.com/watch?v=V1eYniJ0Rnk>
 - Jednoduchá implementace
- Nevýhody:
 - Potřeba definovat vstup
 - Potřeba definovat topologii sítě
 - Časově náročný proces tréninku sítě

Support vector machine

- todo

Naive Bayes

- todo