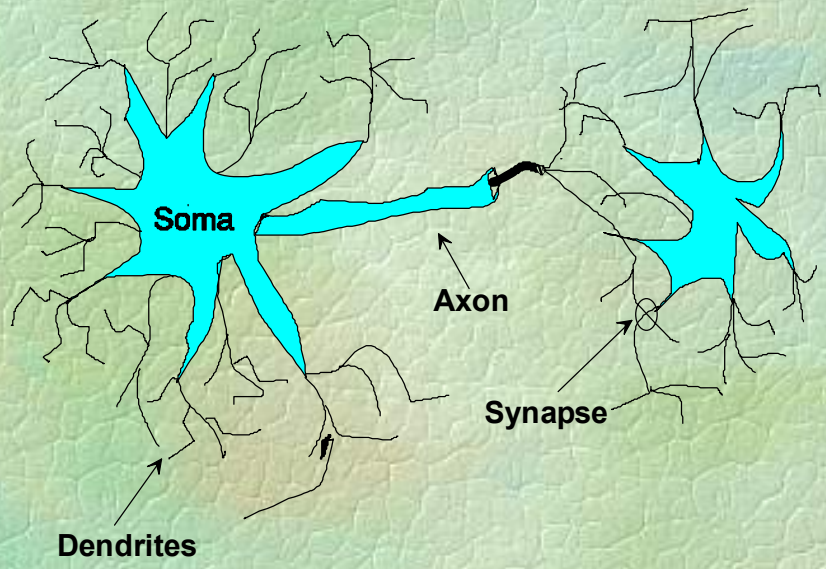
Нейронные сети

Хомичёва Ирина Вадимовна
аспирант лаборатории Теоретическая генетика

Биологическая мотивация



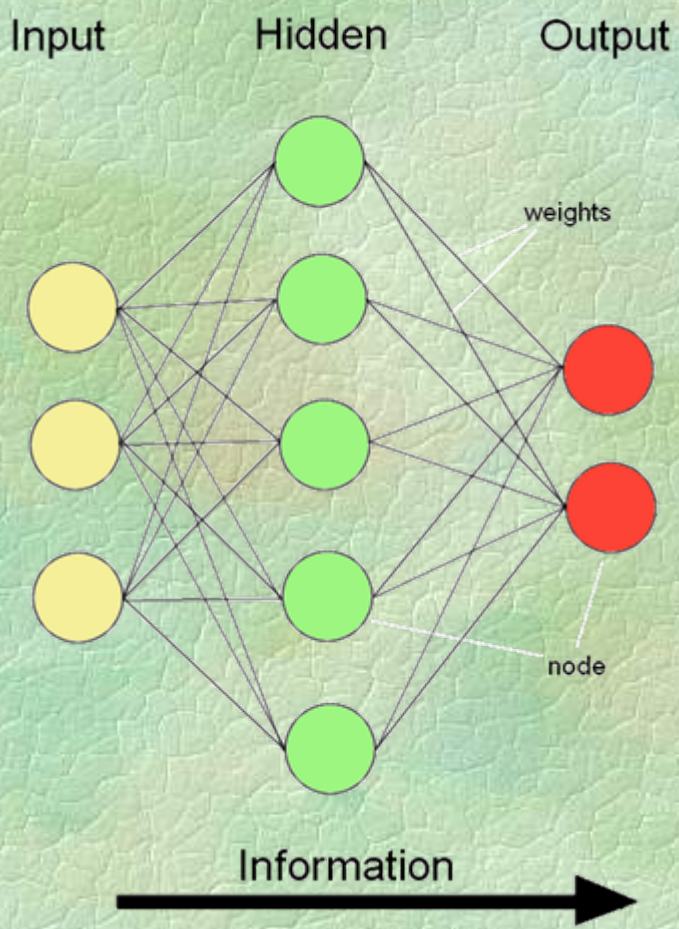
Нервная система: 10^{11} нейронов участвуют в 10^{15} передающих связях

Уникальной способностью нейрона является приём, обработка и передача электрохимических сигналов по нервным путям.

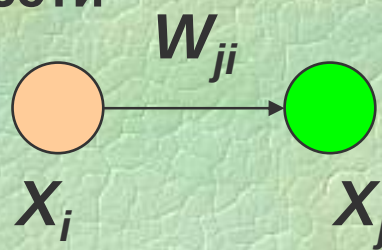
Каждый нейрон принимает взвешенную сумму входных сигналов и при определённых условиях имеет возможность передавать сигнал дальше.

Искусственные нейронные сети есть попытка воспроизвести способность нервных биологических систем обучаться и исправлять ошибки, моделируя низкоуровневую структуру мозга

Нейронная сеть-есть ориентированный мультиграф со взвешенными взаимосвязями.



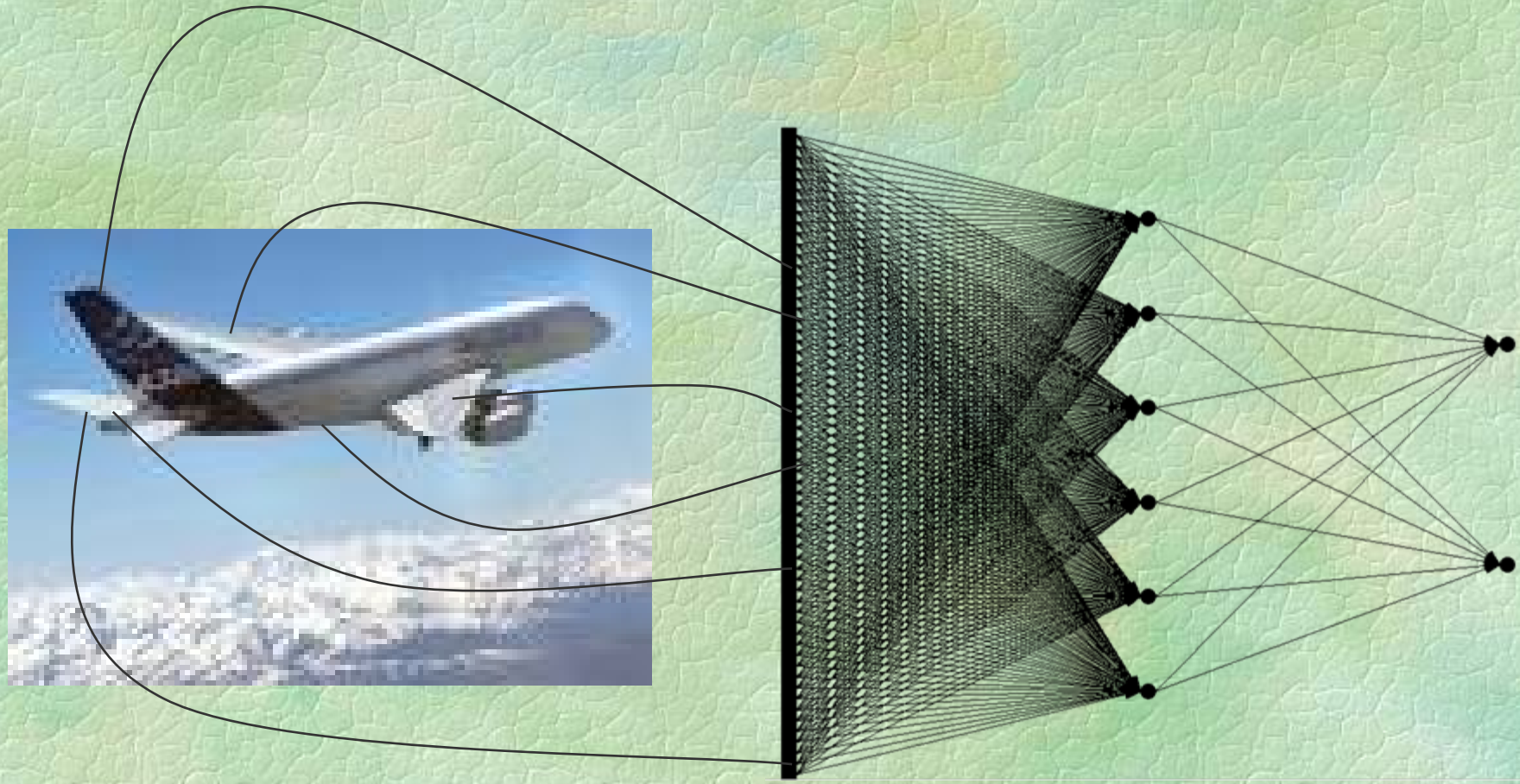
Множество вершин - множество нейронов сети



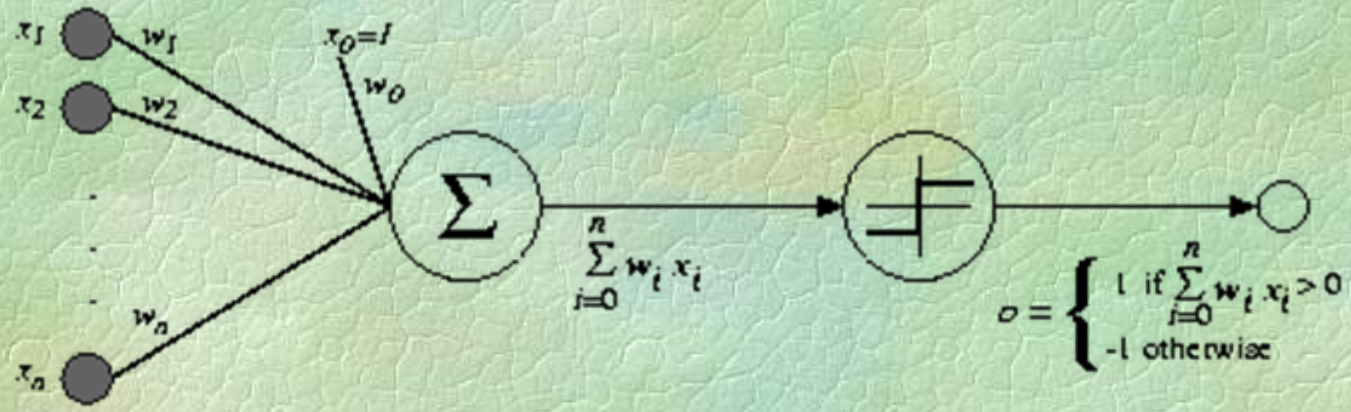
W_{ji}- вес пути от вершины X_i к X_j параметр сети

Обучение нейронной сети – изменение параметров сети

Применение нейронной сети для контроля технического состояния авиалайнера



Модель нейрона

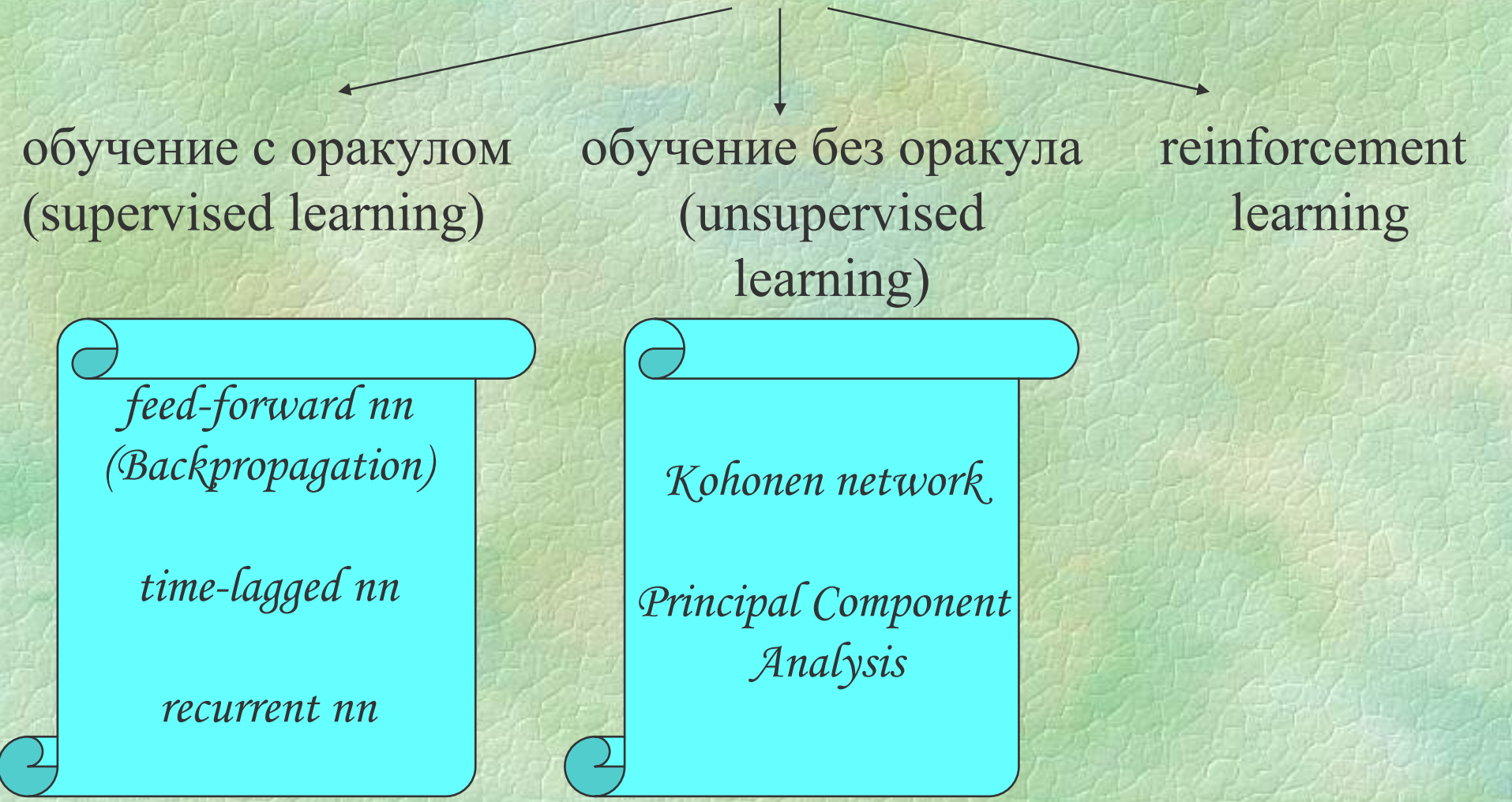


$$o(x_1, \ldots, x_n) = \begin{cases} 1 \text{ if } w_0 + w_1 x_1 + \cdots + w_n x_n > 0 \\ -1 \text{ otherwise.} \end{cases}$$

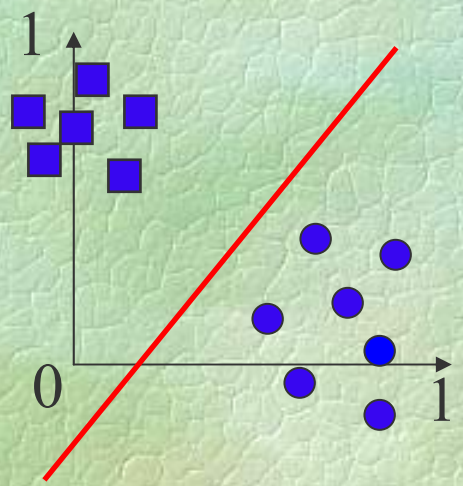
Sometimes we'll use simpler vector notation:

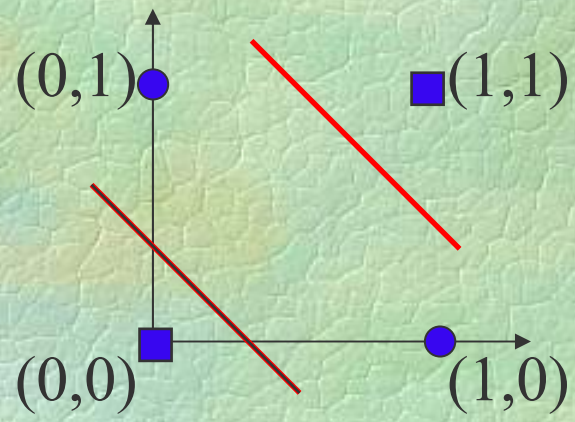
$$o(\vec{x}) = \begin{cases} 1 \text{ if } \vec{w} \cdot \vec{x} > 0 \\ -1 \text{ otherwise.} \end{cases}$$

Основные парадигмы обучения нейронной сети

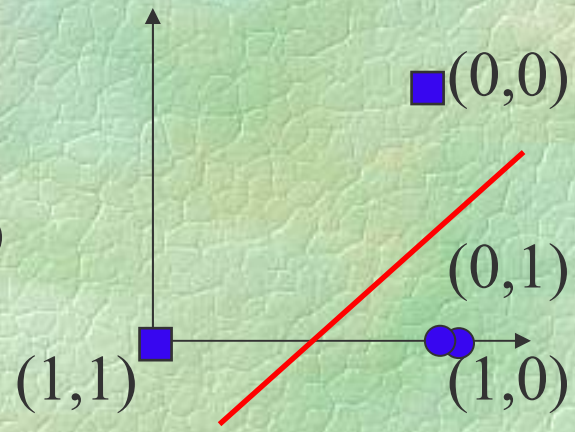


Линейная отделимость. Проблема XOR





Данные называются линейно-отделимыми, если существуют гиперплоскость, однозначно разделяющая их на два класса



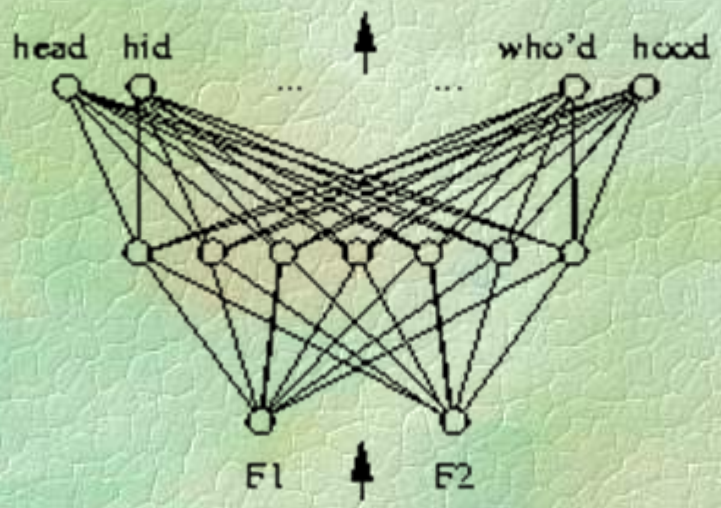
Обучение простейшей сети в случае линейно-отделимого пространства обучающих данных

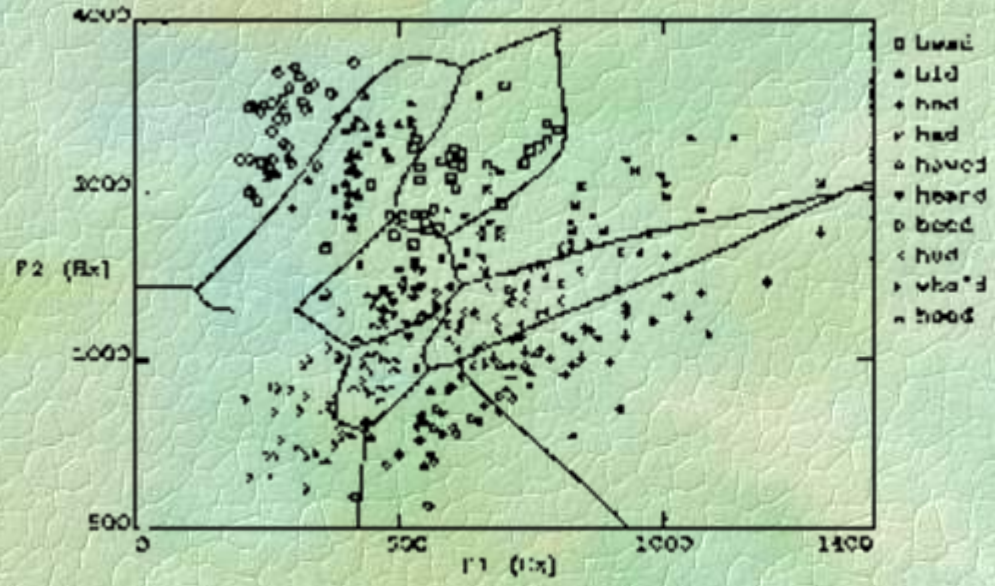
Обучение простейшей сети, состоящей из одноного нейрона, может происходить в соответствии с правилом Видроу-Хоффа (или дельта-правилом).

Значение целевой функции для некоторого примера: ***t*** .
Выходное значение нейрона: ***o***.
Инициализировать веса случайным образом.
Итеративно исправлять веса после каждого акта применения сети к данным:
$\Delta w_i = \eta\ (t\text{-}o)\ x_i$ ***правило Видроу-Хоффа или***
$w_j \leftarrow w_i + \Delta w_i$ ***дельта-правило***
η - норма обучения, параметр, который влияет на скорость сходимости правила.

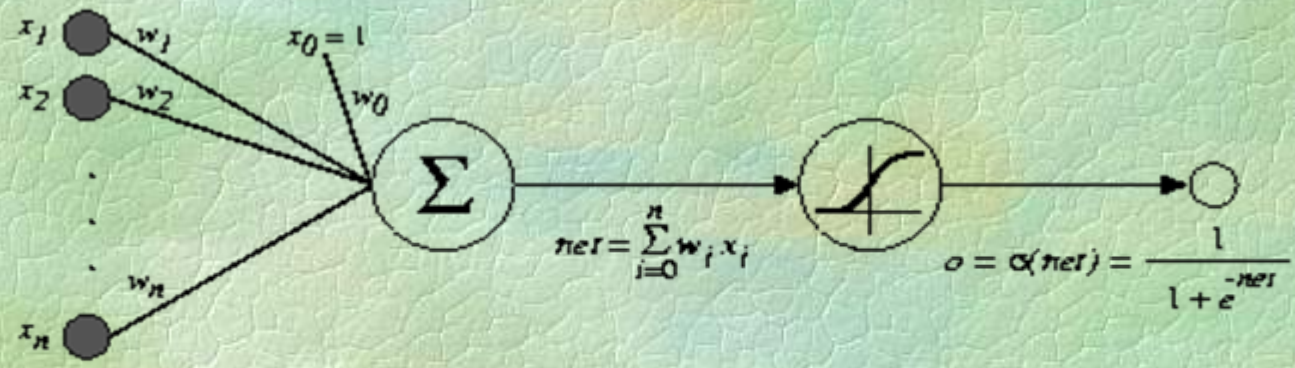
Для того, чтобы убедиться, что правило работает, выберем некоторые крайние точки значений целевой функции и нейрона. Если ***t=o*** для некоторого входного вектора, то веса сети не меняются, результат достигнут. Если же $t = +1$, а $o = -1$, то $\Delta w_i = \eta 2\ x_i$. Вспомним, что т.к. $o = -1$, то $\vec{w} \bullet \vec{x} \le 0$. Предположим, что $x_i > 0$, тогда увеличение весов сети приведёт к тому, что значение сети будет стремиться к значению функции.
В предположении линейной отделимости правило Видроу-Хоффа сходится к искомому решению за конечное число итераций.

Многослойные нейронные сети





Сигмоидная функция активации



$\sigma(x)$ is the sigmoid function

$$\frac{1}{1+e^{-x}}$$

Nice property: $\frac{d\sigma(x)}{dx} = \sigma(x)(1-\sigma(x))$

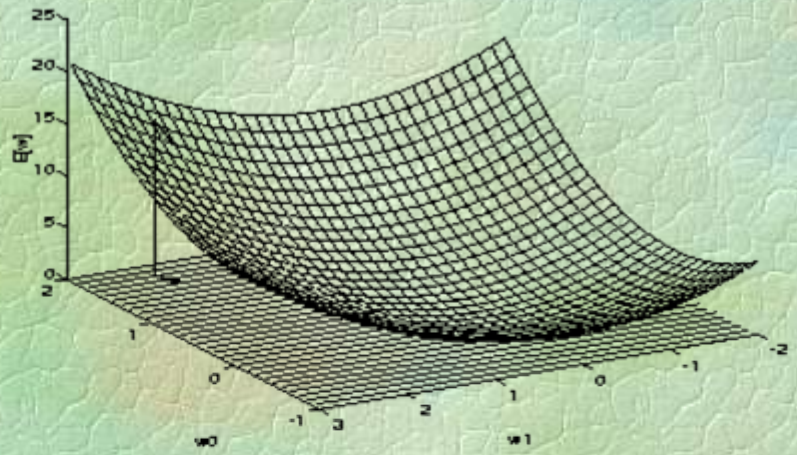
We can derive gradient decent rules to train

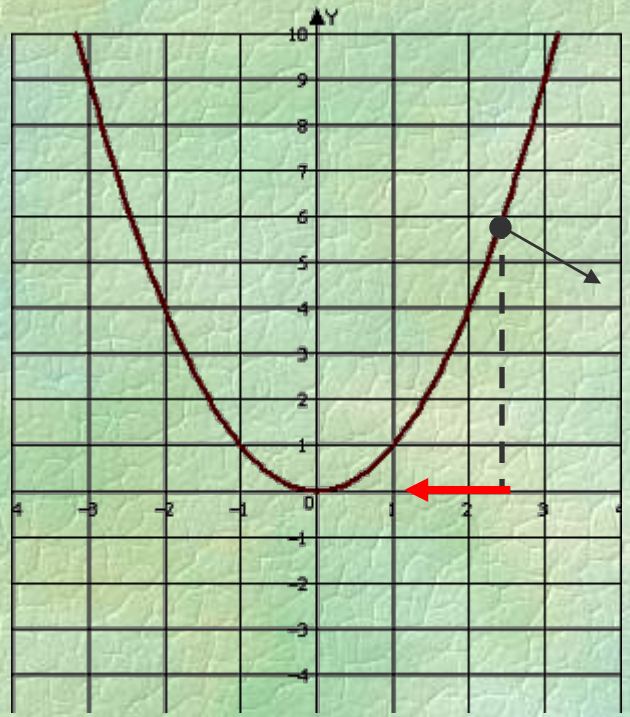
- One sigmoid unit
- *Multilayer networks* of sigmoid units → Backpropagation

Метод градиентного спуска

$$E(\vec{w}) = \frac{1}{2}\sum_{d \in D}(t_d - o_d)^2$$

Функционал ошибки





Gradient

$$\nabla E[\vec{w}] \equiv \left[\frac{\partial E}{\partial w_0}, \frac{\partial E}{\partial w_1}, \cdots \frac{\partial E}{\partial w_n}\right]$$

Training rule:

$$\Delta \vec{w} = -\eta \nabla E[\vec{w}]$$

i.e.,

$$\Delta w_i = -\eta \frac{\partial E}{\partial w_i}$$

Метод градиентного спуска

$$\frac{\partial E}{\partial w_i} = \frac{\partial}{\partial w_i}\frac{1}{2}\sum_d (t_d - o_d)^2$$

$$= \frac{1}{2}\sum_d \frac{\partial}{\partial w_i}(t_d - o_d)^2$$

$$= \frac{1}{2}\sum_d 2(t_d - o_d)\frac{\partial}{\partial w_i}(t_d - o_d)$$

$$= \sum_d (t_d - o_d)\frac{\partial}{\partial w_i}(t_d - \vec{w}\cdot\vec{x_d})$$

$$\frac{\partial E}{\partial w_i} = \sum_d (t_d - o_d)(-x_{i,d})$$

Дельта правило

Дельта правило позволяет избежать локально-оптимального решения.

При этом изменение вектора весов происходит после каждого акта применения сети к обучающему примеру.

Функционал ошибки

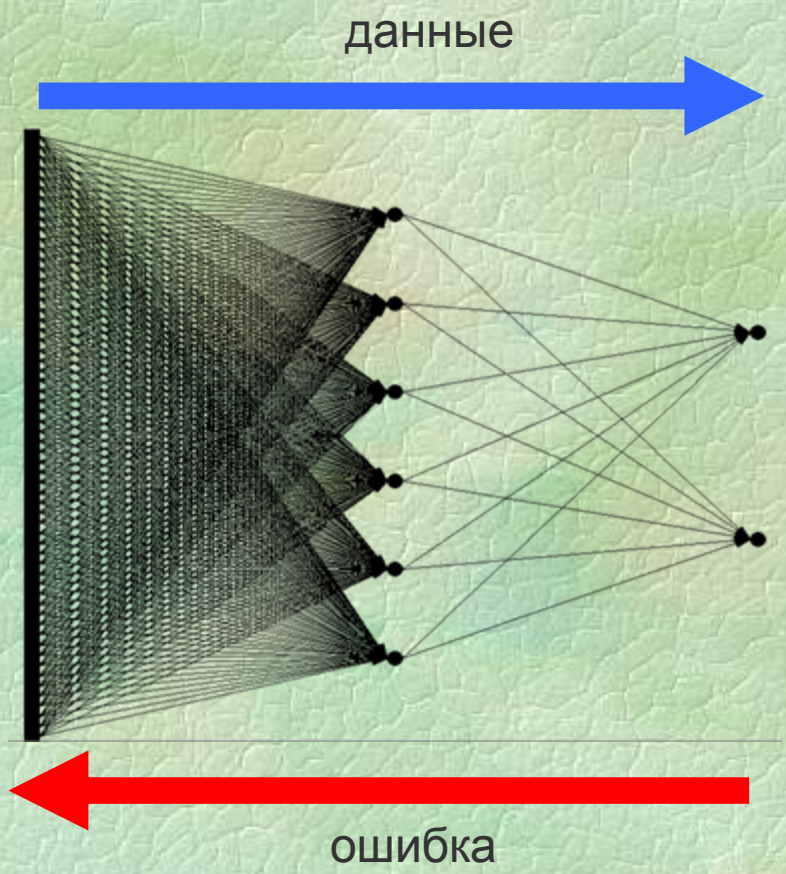
$$E_d[\vec{w}] \equiv \frac{1}{2}(t_d - o_d)^2$$

Правило корректировки весов

$$\Delta w_i = \eta(t - o)x_i$$

Backpropagation - алгоритм обратного распространения ошибки

-исправление весов сети в соответствии с методом градиентного спуска

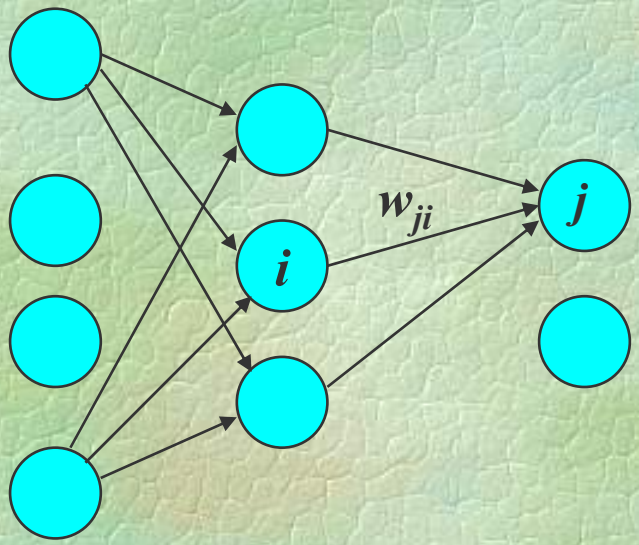


Определяет два потока в сети: прямой поток от входного слоя к выходному и обратный поток – от выходного слоя к входному.

Прямой поток продвигает входные векторы через сеть, в результате чего в выходном слое получаются выходные значения сети.

Обратный поток подобен прямому, но он продвигает назад по сети значения ошибок, в результате чего определяются величины, в соответствии с которыми следует корректировать весовые коэффициенты в процессе обучения. В обратном потоке значения проходят по взвешенным связям в направлении, обратном направлению прямого потока, т.е. в обратном потоке элементы некоторого слоя получают сигналы ошибок от каждого элемента следующего слоя.

Backpropagation - алгоритм обратного распространения ошибки



Функционал ошибки

$$E_d(\vec{w}) = 1/2 \sum_{k \in outputs} (t_k - o_k)^2$$

x_{ji} – i-тый вход на нейрон j;

w_{ji} – вес, приписанный связи между i-тым и j-тым нейронами;

$net_j = \sum_i w_{ji} x_{ji}$ - взвешенная сумма значений, поступивших на вход нейрону j;

o_j – значение выходного нейрона с номером j;

t_j – значение целевой функции;

outputs – множество нейронов выходного слоя

Backpropagation – правило корректировки весов выходного слоя

Напомним, что для минимизации функционала ошибки весовые коэффициенты корректируются в направлении, обратном вектору градиенту, а именно:

$$\Delta w_{ij} = -\eta \frac{\partial E_d}{\partial w_{ji}}$$

В терминах введённых обозначений, по правилу вычисления производной сложной функции:

$$\frac{\partial E_d}{\partial w_{ji}} = \frac{\partial E_d}{\partial net_j} \frac{\partial net_j}{\partial w_{ji}} = \frac{\partial E_d}{\partial net_j} x_{ji}.$$

В случае, когда j – нейрон выходного слоя:

$$\frac{\partial E_d}{\partial net_j} = \frac{\partial E_d}{\partial o_j} \frac{\partial o_j}{\partial net_j}, \quad (*)$$

$$\frac{\partial E_d}{\partial o_j} = \frac{\partial}{\partial o_j} \frac{1}{2} \sum_{k \in outputs} (t_k - o_k)^2$$

Backpropagation – правило корректировки весов выходного слоя

Заметим, что

$$\frac{\partial}{\partial o_j}(t_k - o_k)^2 = 0, \quad k \neq j .$$

Тогда

$$\frac{\partial E_d}{\partial o_j} = \frac{\partial}{\partial o_j}\frac{1}{2}(t_j - o_j)^2 = \frac{1}{2}2(t_j - o_j)\frac{\partial(t_j - o_j)}{\partial o_j} = -(t_j - o_j) .$$

Осталось вычислить ещё один множитель в уравнении (*). Для этого вспомним, что

$$o_j = \sigma(net_j) ,$$

и в соответствии с формулой для производной сигмоидальной функции (см. слайд 10)

$$\frac{\partial o_j}{\partial net_j} = \frac{\partial \sigma(net_j)}{\partial net_j} = o_j(1 - o_j) .$$

Окончательно, уравнение (*) примет вид:

$$\frac{\partial E_d}{\partial net_j} = -(t_j - o_j)o_j(1 - o_j) .$$

И правило исправления весов выходного слоя:

$$\Delta w_{ji} = -\eta \frac{\partial E_d}{\partial w_{ji}}(t_j - o_j)o_j(1 - o_j)x_{ji} .$$

Backpropagation – правило корректировки весов внутреннего слоя

Для вывода правила корректировки весов внутреннего слоя, введём величину: *Downstream*(*j*) – множество нейронов, на вход которым поступает выходное значение нейрона *j*.

$$\frac{\partial E_d}{\partial net_j} = \sum_{k \in Downstream(j)} \frac{\partial E_d}{\partial net_k} \frac{\partial net_k}{\partial net_j} = \sum_{k \in Downstream(j)} (-\delta_k) \frac{\partial net_k}{\partial net_j} = \sum_{k \in Downstream(j)} (-\delta_k) \frac{\partial net_k}{\partial o_j} \frac{\partial o_j}{\partial net_j} =$$

$$= \sum_{k \in Downstream(j)} (-\delta_k) w_{kj} \frac{\partial o_j}{\partial net_j} = \sum_{k \in Downstream(j)} (-\delta_k) w_{kj} o_j (1 - o_j).$$

Обозначив

$$\delta_j = -\frac{\partial E_d}{\partial net_j},$$

получаем

$$\delta_j = o_j (1 - o_j) \sum_{k \in Downstream(j)} \delta_k w_{kj}.$$

Правило исправления весов внутреннего слоя:

$$\Delta w_{ji} = \eta \delta_j x_{ji}$$

Заметим, что правило исправления весов внутреннего слоя является частным случаем правила исправления весов внутреннего слоя, когда *Downstream*(*j*) =*outputs*.

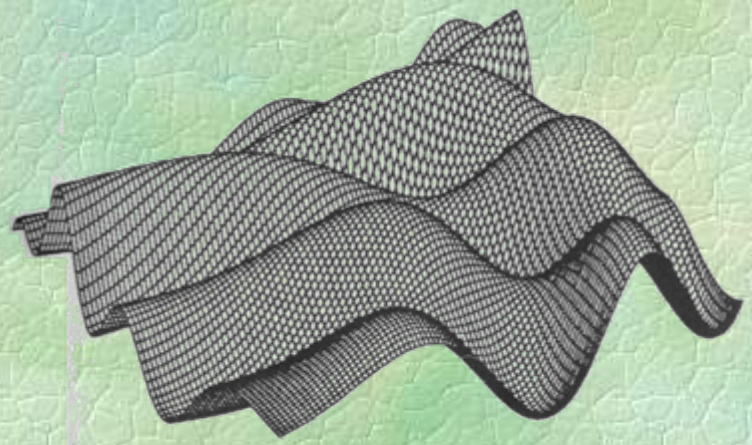
Backpropagation - алгоритм обратного распространения ошибки

-применяется для многослойных однопотоковых сетей

-функция активности - сигмоид

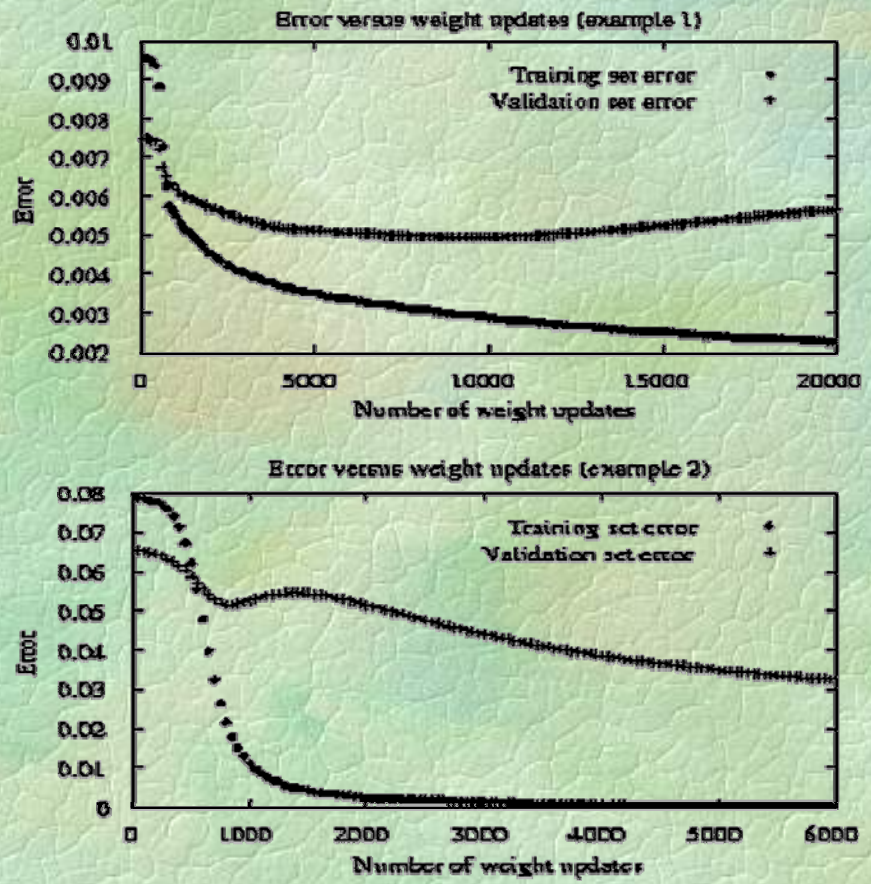
-осуществляет исправление весов сети в соответствии с методом градиентного спуска

В случае, если пространство ошибки имеет несколько локальных минимумов, есть опасность не найти глобального минимума



Практические советы

Overfitting in ANNs



Баум и Хасслер, 1989

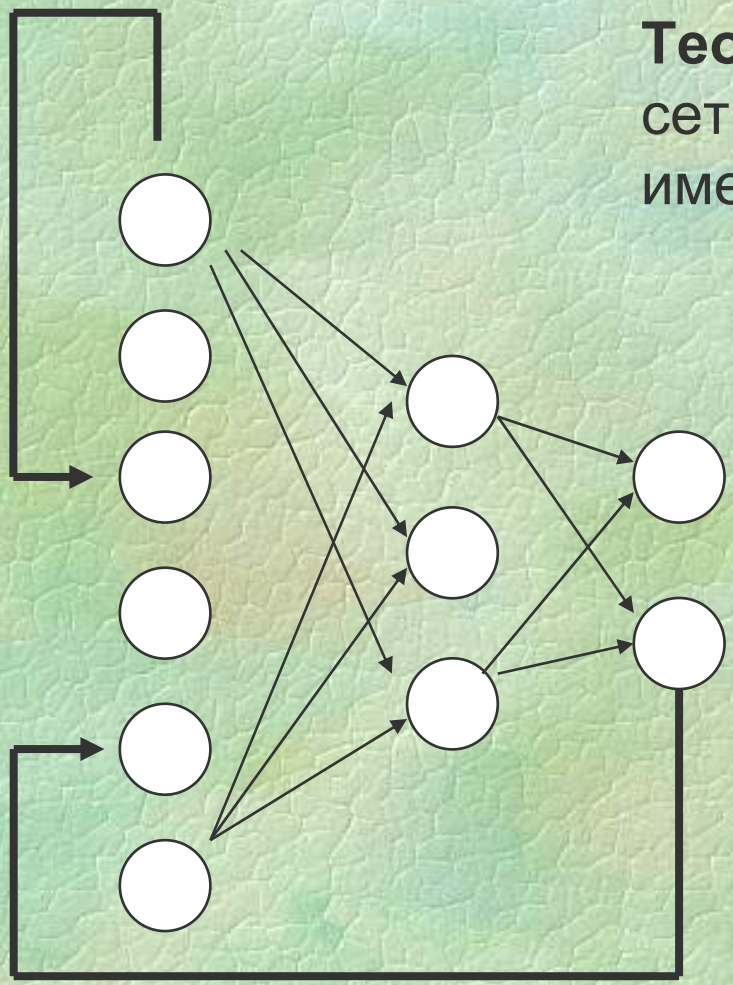
$$N > \frac{W}{\varepsilon}$$

N - размер обучающих данных

W - число весовых коэффициентов

ε - доля ошибок

Рекуррентные нейронные сети



Теорема. Для любой рекуррентной сети существует сеть с прямой связью, имеющая идентичное поведение.

Обнаружение временных закономерностей

Выполнение задач, зависящих от последовательности состояний

Свойства краткосрочной памяти: может предсказать следующий элемент последовательности по текущему и предшествующему вводу.

Применение в биоинформатике

предсказание структуры и функции белков, и их классификация (Nakata *et al*., 1995, Wood *et al*., 2004)

распознавание промоторов, кодирующих участков ДНК (Cai *et al*., 1995, Reese, 2001);

обработка и анализ данных микроэррея: кластеризация профилей экспрессии с целью выявления биологически осмысленных групп генов (Sawa *et al*., 2003), моделирование динамики экспрессии генов (Vohradsky, 2001), обнаружение временных закономерностей, предсказание состояния генной сети в следующий временной такт (Liang *et al*., 1998), обнаружение классов в образцах различных тканей (Herrero *et al*., 2001);

Neural network model of gene expression

JI Í VOHRADSKY *The FASEB Journal*. 2001;15:846-854

В статье искусственные нейронные сети используются как модель динамики экспрессии генов

В модели рассматриваются прямые и обратные связи между генами

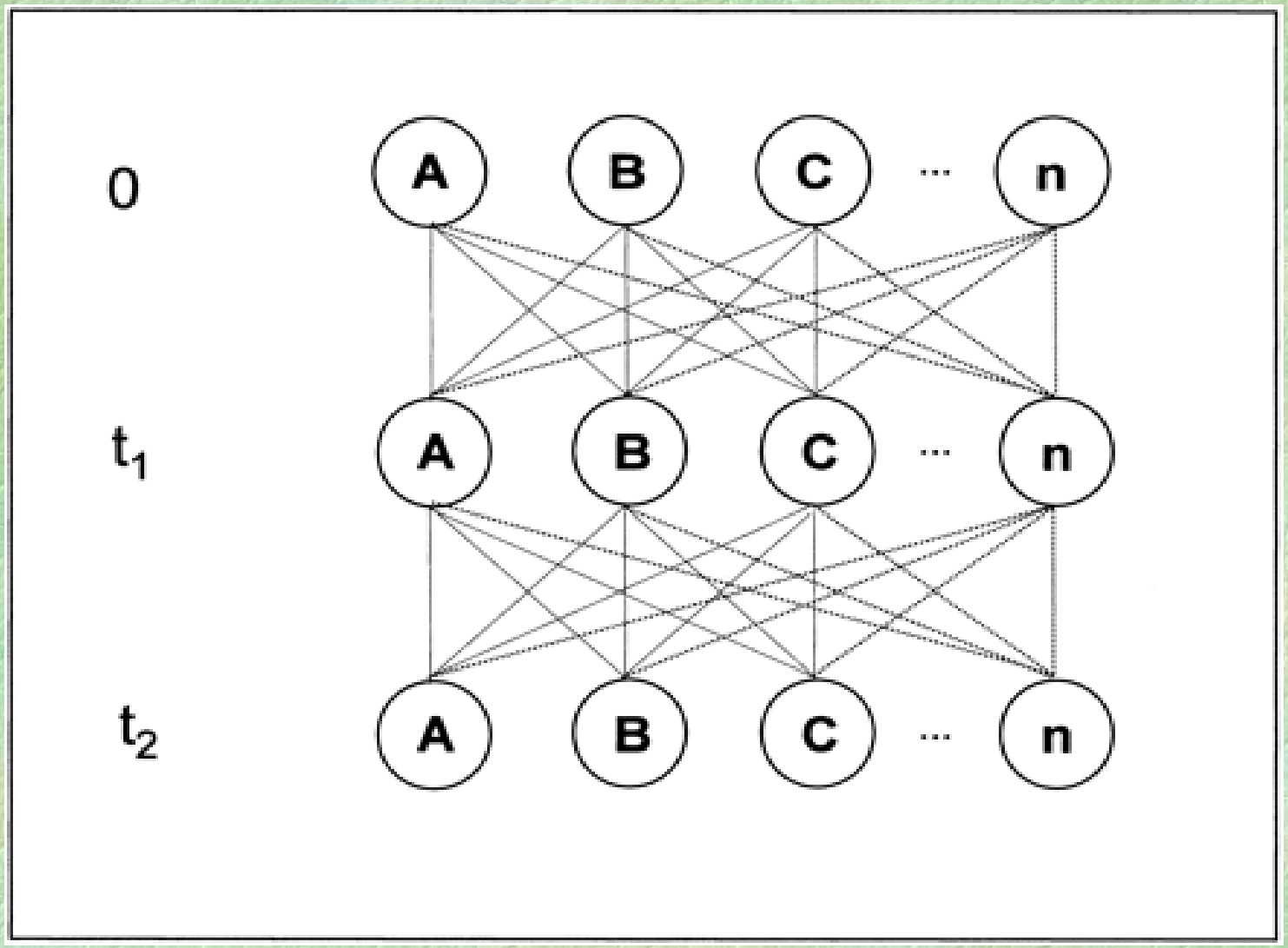
Веса сети отражают регуляторный эффект одного гена на экспрессию других Генов

Экспрессия генов моделируется одной сетью, а так же композицией сетей, обучаемых независимо для моделирования транскрипции и трансляции.

В статье обсуждаются методы вычисления параметров модели на основании экспериментальных данных.

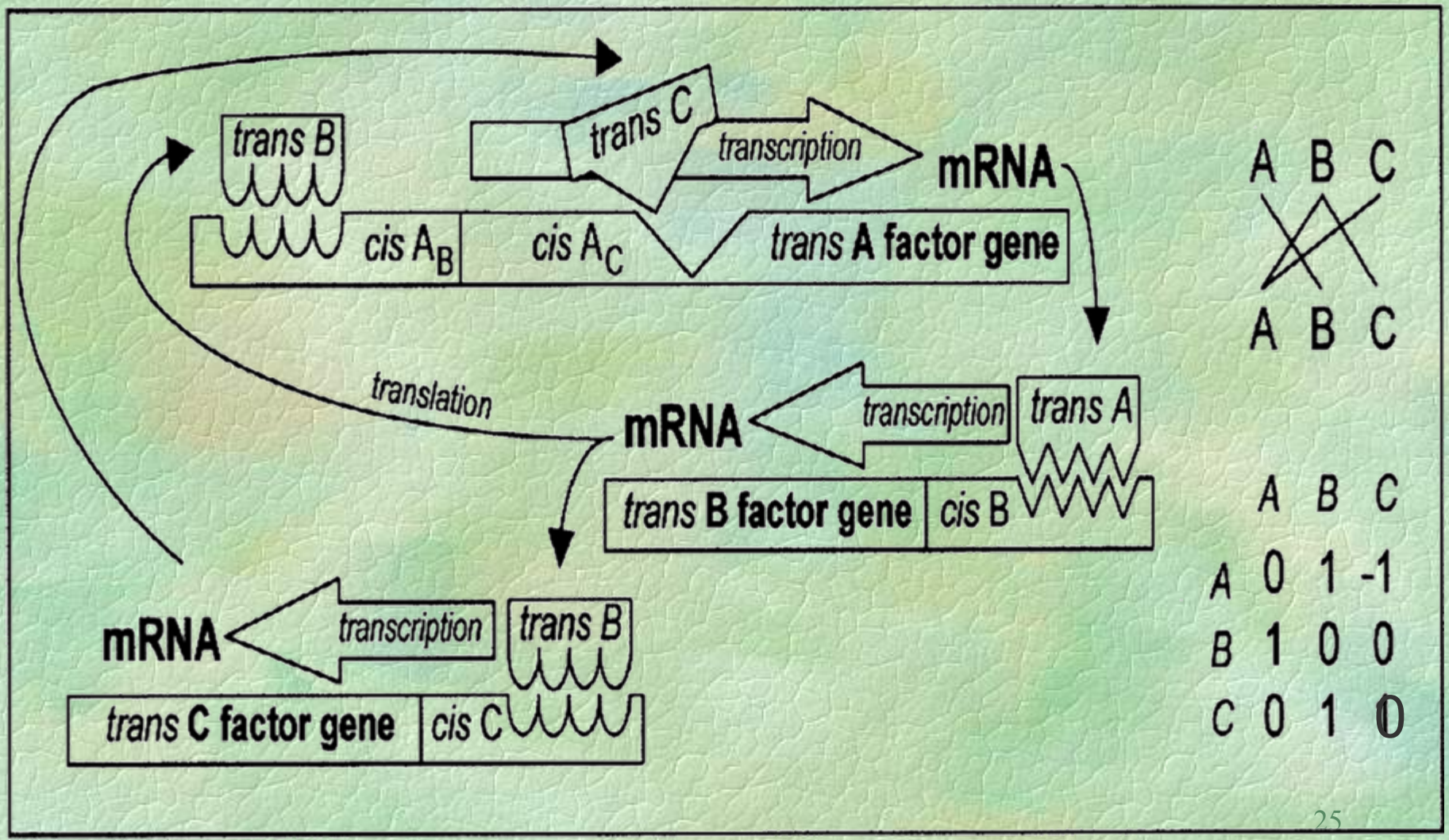
Результаты, полученные при помощи модели, соотносятся с экспериментальными наблюдениями.

Формальное представление регуляции транскрипции нейронной сетью



Пример булевых правил

A=B, A=*not* C; B=A; C=B



Моделирование генной сети рекуррентной нейронной сетью

Выход нейрона в момент времени t+ Δt определяется через уровни экспрессии в момент времени $t(y_j)$ и значениями весов w_{ij}, которые приписаны соответствующим связям. Регуляторный эффект генов, который испытывает на себе ген i:

$$g_i \approx \sum_j w_{ij} y_j .$$

Регуляторный эффект:

$$g_i = \left\{ 1 + \exp\left[-\left(\sum_j w_{ij} y_j + b_i \right) \right] \right\}^{-1}$$

y_i - уровень экспрессии гена в предыдущий временной такт

w_{ij} - веса нейронной сети

b_i - параметр задержки реакции

Моделирование генной сети рекуррентной нейронной сетью

Изменение уровня экспрессии гена *i* выражается через регуляторный вклад других генов ρ и эффект деградации:

$$dz_i/dt = \rho_i - x_i$$

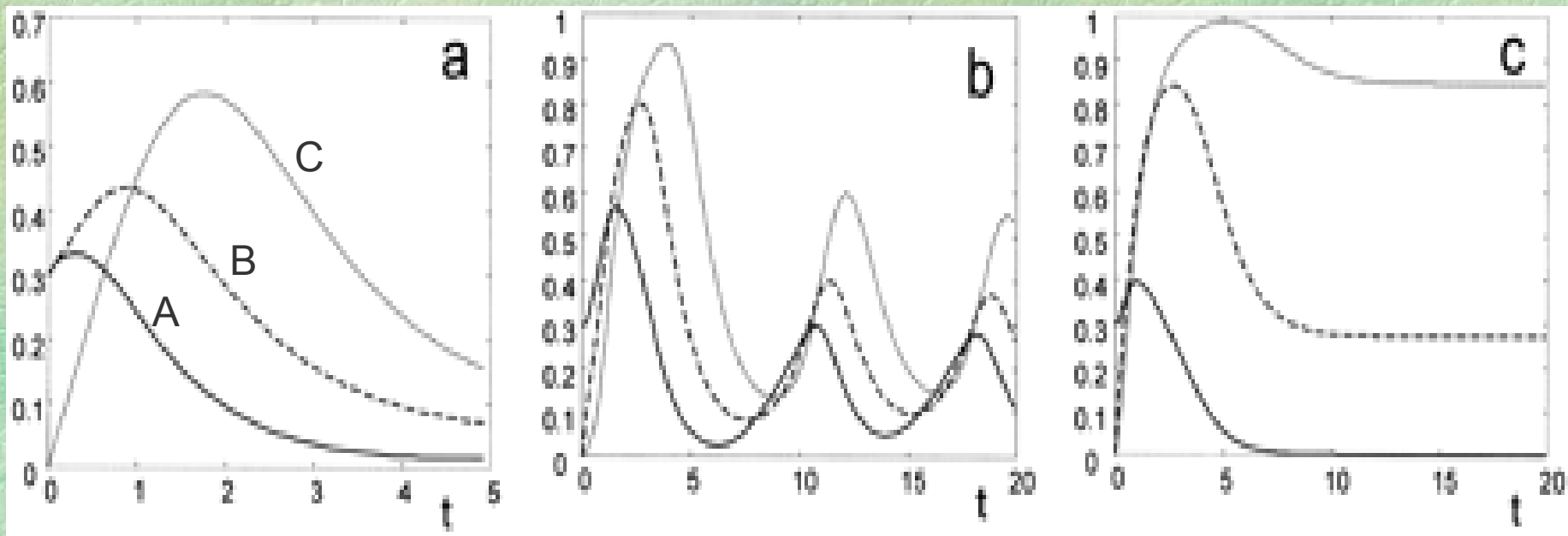
Уровень экспрессии гена *i*: $\rho_i = k_{1i} g_i$

Эффект деградации: $x_i = k_{2i} z_i$

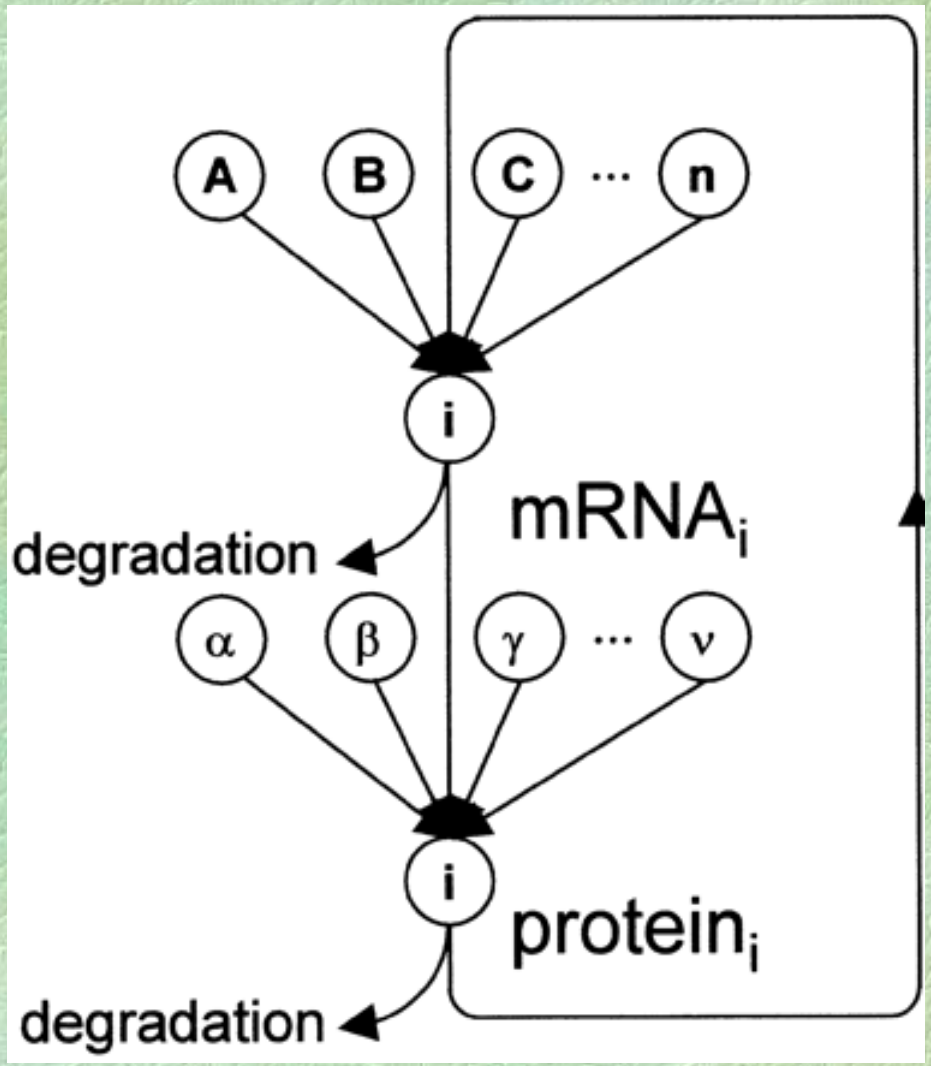
Таким образом, модель имеет вид:

$$\frac{dz_i}{dt} = k_{1i} \frac{1}{1+\exp[-(\sum_j w_{ij} y_j + b_i)]} - k_{2i} z_i$$

Паттерн экспрессии генов A, B и C для разных значений параметра задержки реакции



Модель экспрессии генов, состоящая из двух компартментов



Регуляторные белки A, B, C…n контролируют экспрессию гена i

Трансляция мРНК контролируется набором факторов

Извлечение архитектуры нейронных сетей из экспериментальных данных

Максимально задействовать априорную информацию о модели: предполагаемые зависимости, гипотезы относительно параметров задержки

Достаточное количество экспериментальных данных

Использование процедур оптимизации, чтобы избежать сходимости к локальному минимуму

Необходима предобработка экспериментальных данных, например, предварительная кластеризация профилей экспрессии

Bayesian Learning

Сведения из теории вероятностей

A, B – некоторые события

Вероятность пересечения этих событий:

$$P(A \wedge B) = P(A/B)P(B) = P(B/A)P(A)$$

Вероятность объединения:

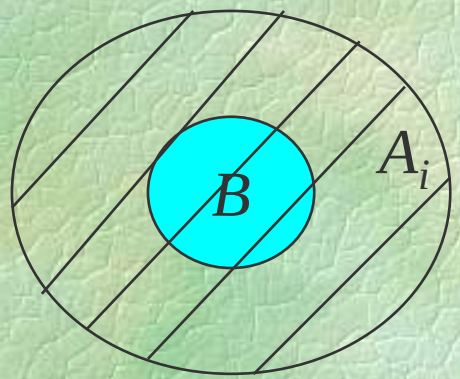
$$P(A \vee B) = P(A) + P(B) - P(A \wedge B)$$

Теорема полной вероятности:

$A_1, \ldots, A_n$ - система событий, такая, что:

1. $\sum_{i=1}^{n} P(A_i) = 1$

2. $\bigcup_{i=1}^{n} A_i \supset B$



Тогда справедливо равенство: $P(B) = \sum_{i=1}^{n} P(B/A_i)P(A_i)$

Теорема Байеса. MAP-гипотеза.

D – таблица данных; h – гипотеза относительно D

Теорема Байеса: $P(h/D) = \dfrac{P(D/h)P(h)}{P(D)}$

$P(h)$ - априорная вероятность гипотезы h;

$P(D)$ - априорная вероятность возникновения данных D;

$P(h/D)$ - вероятность гипотезы h при условии возникновения данных D (апостериорная вероятность гипотезы h);

$P(D/h)$ - вероятность возникновения данных D в условиях гипотезы h.

Определение. MAP-гипотезой (maximum a posteriori) называется такая гипотеза:

$$h_{MAP} = \arg\max_{h \in H} P(h/D) = \arg\max_{h \in H} \frac{P(D/h)P(h)}{P(D)} = \arg\max_{h \in H} P(D/h)P(h).$$

Если положить:

$$P(h_i) = P(h_j),$$

всем гипотезам $h \in H$ приписывают одинаковую априорную вероятность, тогда;

$$h_{MAP} = h_{ML} = \arg\max_{h \in H} P(D/h)$$

h_{ML} - максимально правдоподобная гипотеза, maximum likelihood.

Пример обнаружения MAP-гипотезы

Пусть имеется две гипотезы:

$h_1 : cancer$ - у пациента имеется определённая форма рака;

$h_2 : \neg cancer$ - пациент здоров

В лаборатории при обработке анализа получают два вида результата, маркеры “+” и “-”. Причём верный результат в лаборатории получают с некоторой вероятностью, а именно:

$P(+/cancer) = 0.98$, тогда $P(-/cancer) = 0.02$

$P(+/\neg cancer) = 0.03$, $P(-/\neg cancer) = 0.97$

Статистика по населению утверждает, что рак проявляется с вероятностью:

$P(cancer) = 0.008$, и, соответственно, $P(\neg cancer) = 0.992$.

Требуется установить, болен ли раком пациент, у которого результатом лабораторного теста является положительный маркер.

В данном случае априорные вероятности гипотез (о присутствии/отсутствии рака) не равны, поэтому воспользуемся формулой для обнаружения гипотезы, обладающей максимальной апостериорной вероятностью.

Вычислим необходимые произведения:

$P(+/cancer)P(cancer) = 0.98 \cdot 0.008 = 0.0078$,

$P(+/\neg cancer)P(\neg cancer) = 0.03 \cdot 0.992 = 0.0298$.

Итак, $h_{MAP} : \neg cancer$

NAÏVE BAYES CLASSIFIER

Наивный классификатор Байеса применяется к задачам, в которых обучающие примеры $x \in X$ представлены конъюнкцией значений признаков $\langle a_1,...,a_N \rangle$. Целевая функция приписывает некоторый класс $v_j \in V$ обучающему примеру $x \in X$.

Найдём класс, обладающий максимальной апостериорной вероятностью для некоторого поднабора значений признаков $\langle a_1,...,a_n \rangle$.

$$v_{MAP} = \arg\max_{v_j \in V} P(v_j / a_1,...,a_n) = \arg\max_{v_j \in V} \frac{P(a_1,..., a_n / v_j)P(v_j)}{P(a_1,..., a_n)} = \arg\max_{v_j \in V} P(a_1,..., a_n / v_j)P(v_j).$$

В данном произведении, множитель $P(v_j)$ легко оценивается из таблицы обучающих данных как часть примеров, принадлежащих классу v_j. Для оценки оставшегося множителя в произведении требуется большой объем обучающих данных, поэтому наивный классификатор Байеса основан на упрощающем предположении о независимости признаков $a_1,...,a_N$. Это предположение позволяет переписать искомую вероятность в следующем виде:

$$P(a_1,..., a_n / v_j) = \prod_i P(a_i / v_j).$$

Тогда

$$v_{MAP} = v_{NB} = \arg\max_{v_j \in V} \prod_i P(v_j)P(a_i / v_j)$$

Обучающие данные

Day	Outlook	Temperature	Humidity	Wind	PlayTennis
D1	Sunny	Hot	High	Weak	No
D2	Sunny	Hot	High	Strong	No
D3	Overcast	Hot	High	Weak	Yes
D4	Rain	Mild	High	Weak	Yes
D5	Rain	Cool	Normal	Weak	Yes
D6	Rain	Cool	Normal	Strong	No
D7	Overcast	Cool	Normal	Strong	Yes
D8	Sunny	Mild	High	Weak	No
D9	Sunny	Cool	Normal	Weak	Yes
D10	Rain	Mild	Normal	Weak	Yes
D11	Sunny	Mild	Normal	Strong	Yes
D12	Overcast	Mild	High	Strong	Yes
D13	Overcast	Hot	Normal	Weak	Yes
D14	Rain	Mild	High	Strong	No

Пример применения классификатора

$$\langle Outlook = Sunny, Temperature = Cool, Humidity = High, Wind = Strong, PlayTennis = ? \rangle$$

Вычисляем

$$v_{NB} = \arg\max_{v_j \in \{yes,no\}} \prod_i P(v_j) P(a_i / v_j) =$$

$$\arg\max_{v_j \in V} P(v_j) P(Outl = Sunny / v_j) P(Temp = Cool / v_j) P(Hum = High / v_j) P(Wind = Strong / v_j)$$

В данной записи содержится 10 вероятностей, которые необходимо оценить из таблицы данных.

Для значений целевой функции:

$$P(PlayTennis = yes) = 9/14 = 0.64$$

$$P(PlayTennis = no) = 5/14 = 0.36$$

Вычислим условные вероятности для фиксированных значений признаков:

$$P(Wind = Strong / PlayTennis = yes) = 3/9 = 0.33$$

$$P(Wind = Strong / PlayTennis = no) = 3/5 = 0.60$$

Вероятности для других признаков вычисляются аналогичным образом.

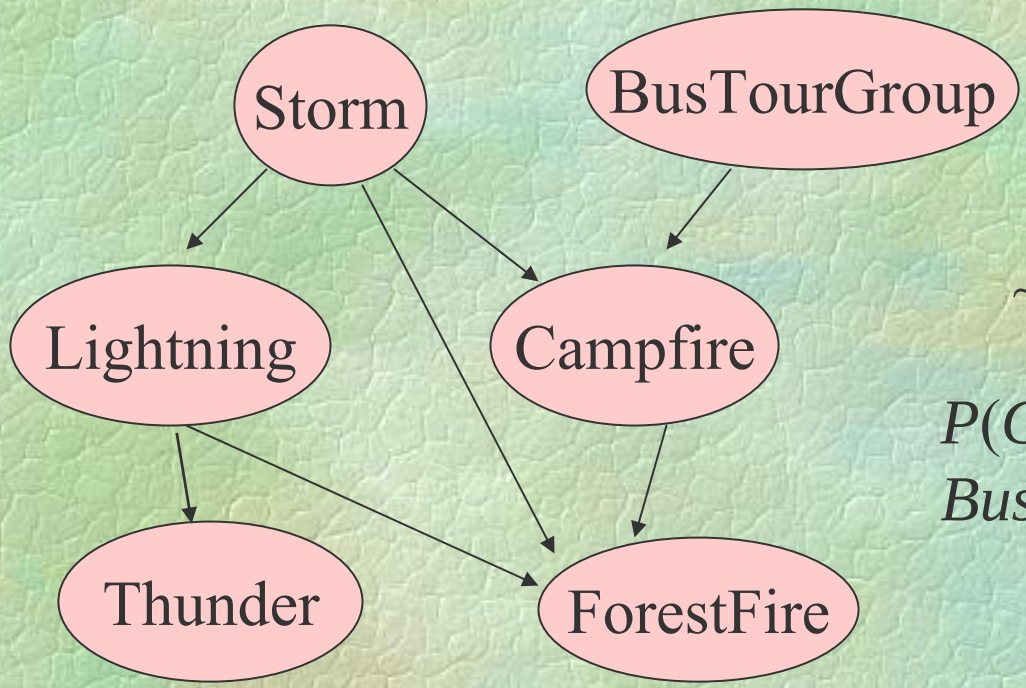
Окончательно имеем;

$$P(yes)\, P(Sunny / yes)\, P(Cool / yes)\, P(High / yes)\, P(Strong / yes) = 0.0053$$

$$P(no)\, P(Sunny / no)\, P(Cool / no)\, P(High / no)\, P(Strong / no) = 0.0206 .$$

Итак, классификатор Байеса склонятся к значению целевой концепции $PlayTennis = no$.

Байесовские сети



	S.B	S.~B	~S.B	~S.~B
C	0.4	0.1	0.8	0.2
~C	0.6	0.9	0.2	0.8

P(*Campfire* = true | *Storm* = false, *BusTourGroup* = false) = 0.2

Выполнено условие независимости признака от НЕ предшественников:

$$(\forall x_i, y_j, z_k)\ P(X = x_i / Y = y_j, Z = z_k) = P(X = x_i / Z = z_k)$$

Совместное распределение значений $\langle y_1, \ldots y_n \rangle$ признаков $\langle Y_1, \ldots Y_n \rangle$:

$$P(y_1, \ldots y_n) = \prod_{i=1}^{n} P(y_i | Parents(Y_i)),$$

Parents(Y_i) – непосредственные предшественники признака Y_i.

Применение Байесовских сетей в биоинформатике

- моделирования сайтов сплайсинга последовательностей ДНК

- предсказания вторичной структуры белка

- симуляции генной сети и отслеживания её динамики

Сети Байеса способны поддерживать данные с шумами, оперировать неполными данными, с пробелами. Как и в случае решающих деревьев, и индуктивно-логических правил, такой способ интерпретации фактов как граф позволяет наиболее естественно проверить гипотезу типа “если, то”. В отличие от решающих деревьев, сети Байеса менее склонны к переобучению.