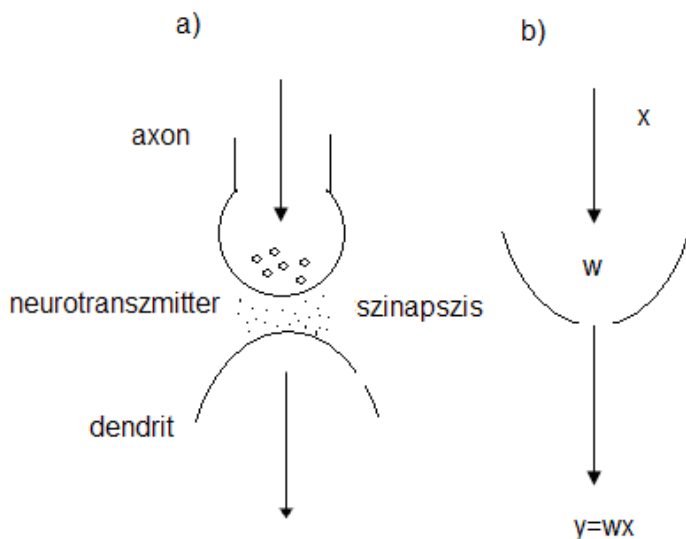


Neuronhálók alkalmazása a gyógyszerfejlesztésben

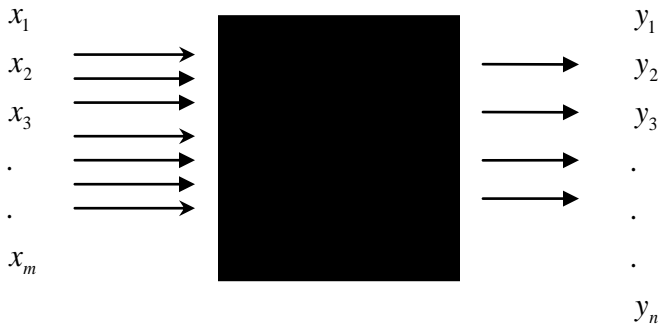
A neurális hálózatok létrehozásánál az alapötlet az emberi agy aktivitásának és alaptulajdonságainak modellezése. Biológiai szempontból a bejövő impulzust az idegsejt aksonján keresztül továbbítja a szinapszisba, mely a két sejt közötti kommunikáció helye [1].

A szinapszisban az információ átalakul, majd továbbítódik a másik sejt dendritjébe. Ezt szimulálhatjuk, ha a bejövő értéket x megszorozzuk a szinapszis súlyával w , így megkapjuk a kimenő értéket.

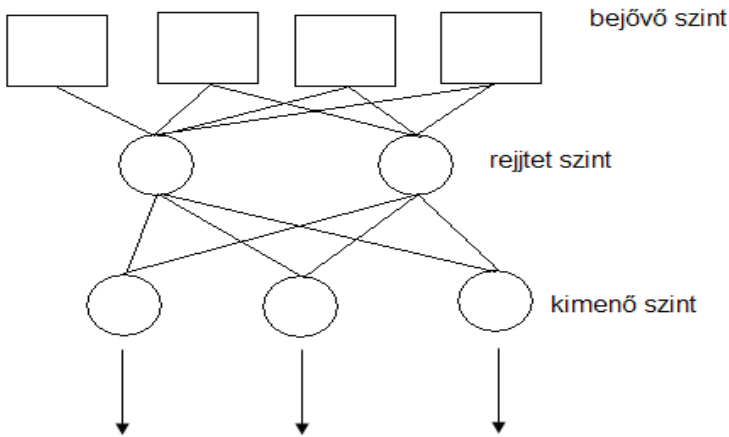


A mesterséges neurális hálózatok képviselője a fekete doboz, mely több bejövő jelet fogad és több kimenő jelet továbbít [2].

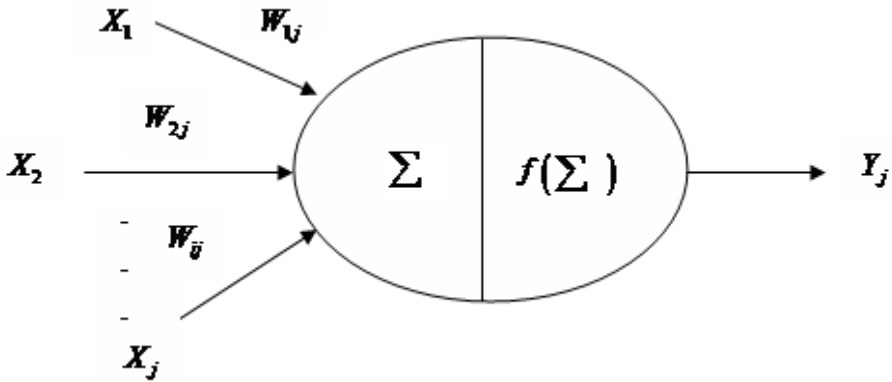
* Dr. Szebenyi Anna, egyetemi tanársegéd, Újvidéki Egyetem, Orvostudományi Kar, Gyógyszerészeti Tanszék, Újvidék



A neurális hálózatok többszintűek. A legegyszerűbb esetben ez egy bejövő és egy kimenő szintből tevődik össze. E két szint között lehetnek más, ún. rejtett szintek is.



Matematikailag a neuron nemlineáris függvény, mely függő változói az input az értéke pedig az output [3].



A paraméterek a neuronok inputjához köthetők, az output pedig az inputok nemlineáris kombinációja a paraméterek súlyozott összegével w . Ez általában így írható le:

$$y = f\left(\sum_i w_i x_i + w_0\right)$$

Y a neuron kimenetele- nemlineáris függvényének értéke, ami a bemeneti értékre vonatkozik x . w_0 a hajlam, amely nem kötelezően van jelen, attól függően hogyan definiáljuk az aktivációs függvényt. Amikor jelen van, mindig a bemenő vektor súlya és egyenlő eggyel.

A neurális hálózatok képesek a tanulásra. A legtöbb neurális hálózat meghatározott szabályok szerint tanul, ami után a neuronok közti kapcsolatok koefficiensei változhatnak a bejövő értékek alapján. Különböző tanulási algoritmusok alapján felismerik a kapcsolatokat és sablonokat a prezentált adatok között és ez alapján előreláthatják az eredményeket megváltozott experimentális feltételeknél.

A felhasználónak tudnia kell, hogyan választjuk és készítjük elő az adatokat, hogyan választjuk ki a megfelelő neurális hálózatot, hogyan tolmácsoljuk az eredményeket. Ez a tudásmennyiség azonban sokkal kisebb, mintha valamely tradicionális nemlineáris statisztikai módszert használnánk.

Ma a neurális hálózatokat sikeresen használjuk különböző problémák megoldására számos tudományterületen (orvostudomány, geológia, fizika, kémia, ökonómia). A neurális hálózatok kifinomult nemlineáris számítógépes eszköz, mely képes összetett funkciók modellezésére. Feloszthatók a szintek száma, a neuronok közti kapcsolatok, tanulási

folyamatok, információk terjedésének iránya, az adatok tulajdonságai alapján.

A neurális hálók felhasználása a hemometriában

Köszönhetően annak, hogy felügyelt térképezést végezhetünk több dimenzióból két dimenzióba, a Kohen-hálót használhatjuk az adatok strukturális elemzésére, relációk felfedésére az adatok közt és ha léteznek csoportok felfedésére (klaszter).

A térképek súlyának elemzésével, azaz a bejövetek eloszlásával a Kohen hálóban, meghatározhatók a kapcsolatok az experimentális mutatók között és elhelyezkedésük a mappán. Így megválaszolható melyik experimentális mutató felelős a csoportosulásért.

A másik felhasználási lehetőség a megfelelő tréning adatok analízise. Amikor felügyelt kemometriai eljárásokat alkalmazunk, egy külső validációs szett létrehozása szükséges elérhető minták alapján [4][5]. A minták projekciója alapján a Kohen hálóra jó módszer a megfelelő adatok kiválasztására a tanulási folyamatban és a tesztelésben.

Regresszió

A multivariáns nemlineáris regresszió olyan terület, ahol a mesterséges neurális hálózatokat legtöbbször használjuk. A feed forward és counterpropagation neurális hálózatot használhatjuk itt. A többszintű feed forward neurális háló használata előnye a könnyebb általánosítás. Ezért az összetett problémák megoldására e két módszert használjuk.

Klasszifikáció

A kimenő vektorok kódolásával, a felügyelt mesterséges neurális hálózat a klasszifikáció eszköze lehet. Alkalmazásukhoz annyi kimenő komponensnek kell lennie, mint a megfigyelt kategóriák száma, így a célvektor minden pozíción nulla-, kivéve a megfelelő klasszist meghatározó pozíción. Így az előrelátott kimenő értékek azt a valószínűséget mutatják, mely szerint a minta egy kategóriához tartozik. Amikor a tradicionális kemometriai módszerek nem jelzik elő elfogadható megbízha-

tósággal az értékeket, sikeresen alkalmazható a többszintű és counter-propagation háló.

A counterpropagation hálózat előnye a klasszifikációs határok grafikai bemutatása a kategóriák közt. A Kohen-szint grafikai bemutatása közvetlen információt nyújt arról, hogy melyek a leghasonlóbb kategóriák és melyek a hibás társítások.

Csoportok modellezése mesterséges neurális hálózatok segítségével

Csoportok modellezésénél egy kategória megfigyelése révén verifikálni próbáljuk a bemenő vektor megfelelését a specifikus csoport modelljének. Nagy kihívás ebben a helyzetben a megfelelő algoritmusok megtalálása a neurális hálózatok tanítására, mely az egyes csoportok adatait használja.

A mesterséges neurális hálózatok széleskörűen használhatók: térképezésre, regresszió kivitelezésére, modellezésre, csoportosításra és klasszifikációra, ám elég flexibilisek is. Képesek a saját szükségleteik alapján alakulni. Különösen alkalmasak a nemlineáris problémák megoldására, ahol a tradicionális statisztikai módszerek nem alkalmazhatóak. Fontos kiemelni, hogy az állítható paraméterek révén hajlamosak a prefitelésre, amikor a bejövő és kimenő változók közötti összefüggés szintje alacsony.

Felhasznált irodalom:

[1] F. Marini, R. Bucci, A.L. Magri, A.D. Magri. Artificial neural networks in chemometrics: History, examples and perspectives, *Microchemical Journal* 88 (2008) 178–185.

[2] J. Zupan, J. Gasteiger, *Neural Networks in Chemistry and Drug Design*, 2nd ed. Wiley VCH Ed., Weinheim ISBN: 978-3527297795, 1999.

[3] G. Dreyfus, *Neural networks: an overview*, in: G. Dreyfus (Ed.), *Neural Networks — Methodology and Applications*, Springer, Heidelberg, ISBN: 978-3540229803 (2005) 1–84.

[4] V. Simon, J. Gasteiger, J. Zupan, A combined application of two different neural network types for the prediction of chemical reactivity, *J. Am.Chem. Soc.* 115 (20) (1993) 9148–9159.

[5] F. Marini, A.L. Magri, R. Bucci, A.D. Magri, submitted for publication. Use of different artificial neural networks to resolve binary blends of monocultivar Italian olive oils, *Anal. Chim. Acta.* 599 (2) (2007) 232–240.