



μ

μ

μ

μ

-

μ

μ

μ.

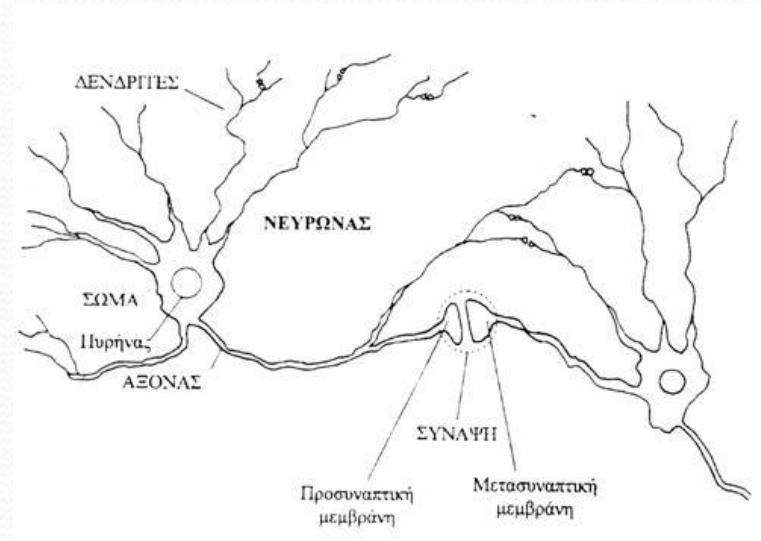
&

.

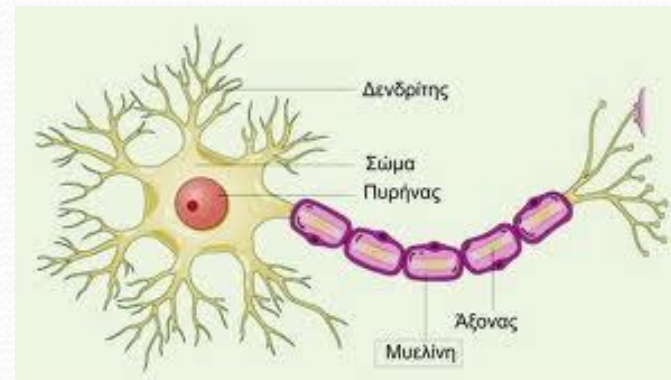
μ

Artificial Neural Networks (ANN)

- Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα () αποτελούν μ προσπάθεια προσέγγισης-μ μ λειτουργίας ανθρώπινου εγκεφάλου
- αρχιτεκτονική βασίζεται αρχιτεκτονική μ



-
-
- 1) μ , μ μ (input),
- 2) μ (cell body)
- 3) μ μ (output),
(axon).
- μ
- , μ
(synapse).





μ , μ
 μ μ

μ .

➤ Νευρωνικά Δίκτυα (. .) εκπαιδεύονται μ βοήθεια
 παραδειγμάτων, έτσι ώστε μαθαίνουν περιβάλλον
 . μ μ

μ μ .





μ

:

) μ - μμ

μ

μ

.

)

«

»,

μ

.

)

μ

.

V)

μ

μ

μ



μ

,

μ

μ

μ

μ

.

V)

(generalization)

μ

μ

μ

.

3.1.

μ

Νευρωνικά Δίκτυα	Στατιστικές μέθοδοι
Χαρακτηριστικά (features)	Μεταβλητές
Δεδομένα εισόδου (inputs)	Ανεξάρτητες μεταβλητές
Τιμές ή αποτελέσματα εξόδου (outputs)	Εξαρτημένες μεταβλητές (τιμές πρόβλεψης)
Συναπτικά βάρη (synaptic weights)	Συντελεστές παλινδρόμησης
Σφάλμα (error)	Υπόλοιπα
Εκμάθηση (learning)	Εκτίμηση (υπολογισμός) παραμέτρων
Εκπαίδευση (training)	
Προσαρμογή (adaptation)	
Πρότυπο ή ζεύγος εκπαίδευσης (training pair)	Παρατήρηση



μ

:

1)

:

μ



(nodes)

(cells)

(outputs

inputs)

“ μ ”.

μ

μ

“

”

μ

(activation level),

μ μ μ
(transfer function).

μ

μ

μ

μ

(input)

μ

μ

(output).

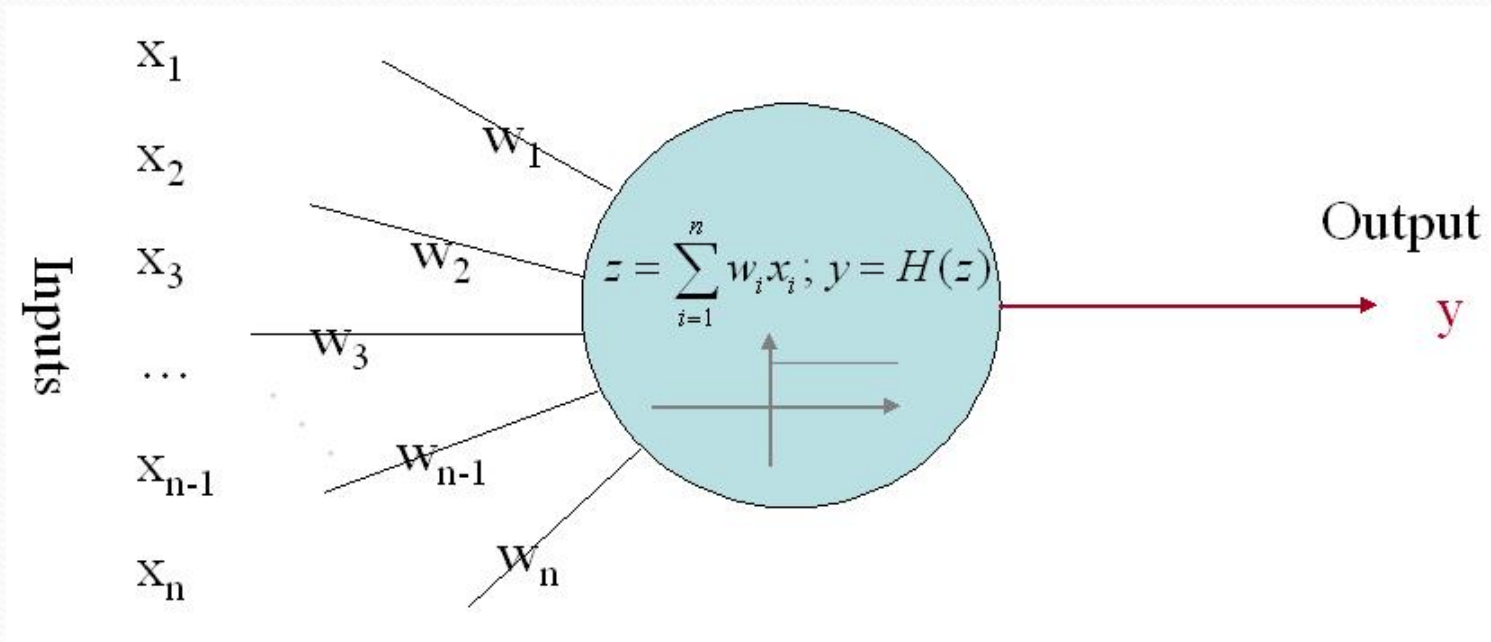
μ

2

(synaptic weight).

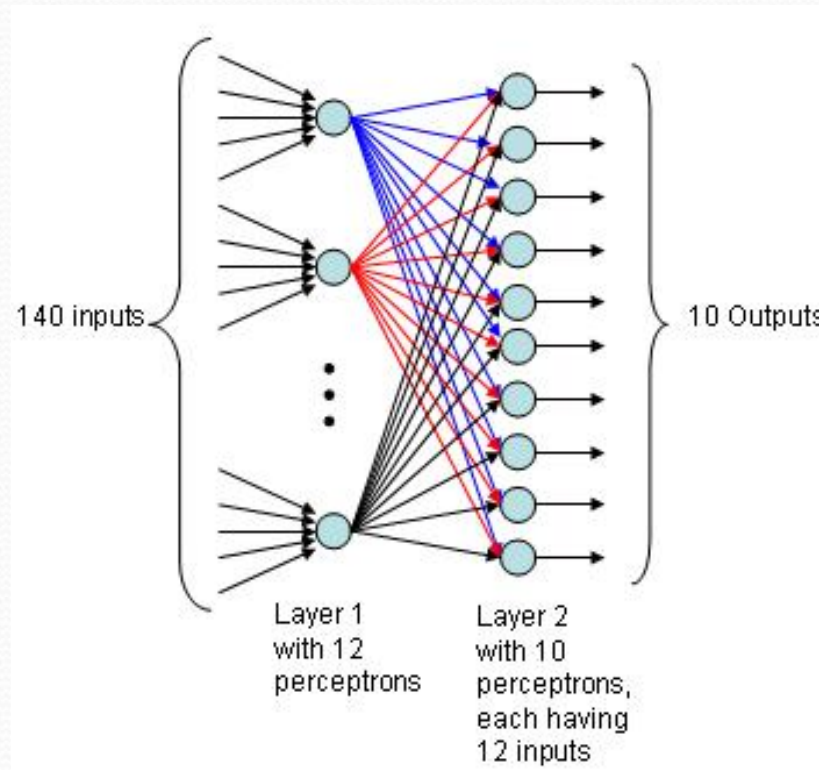
μ

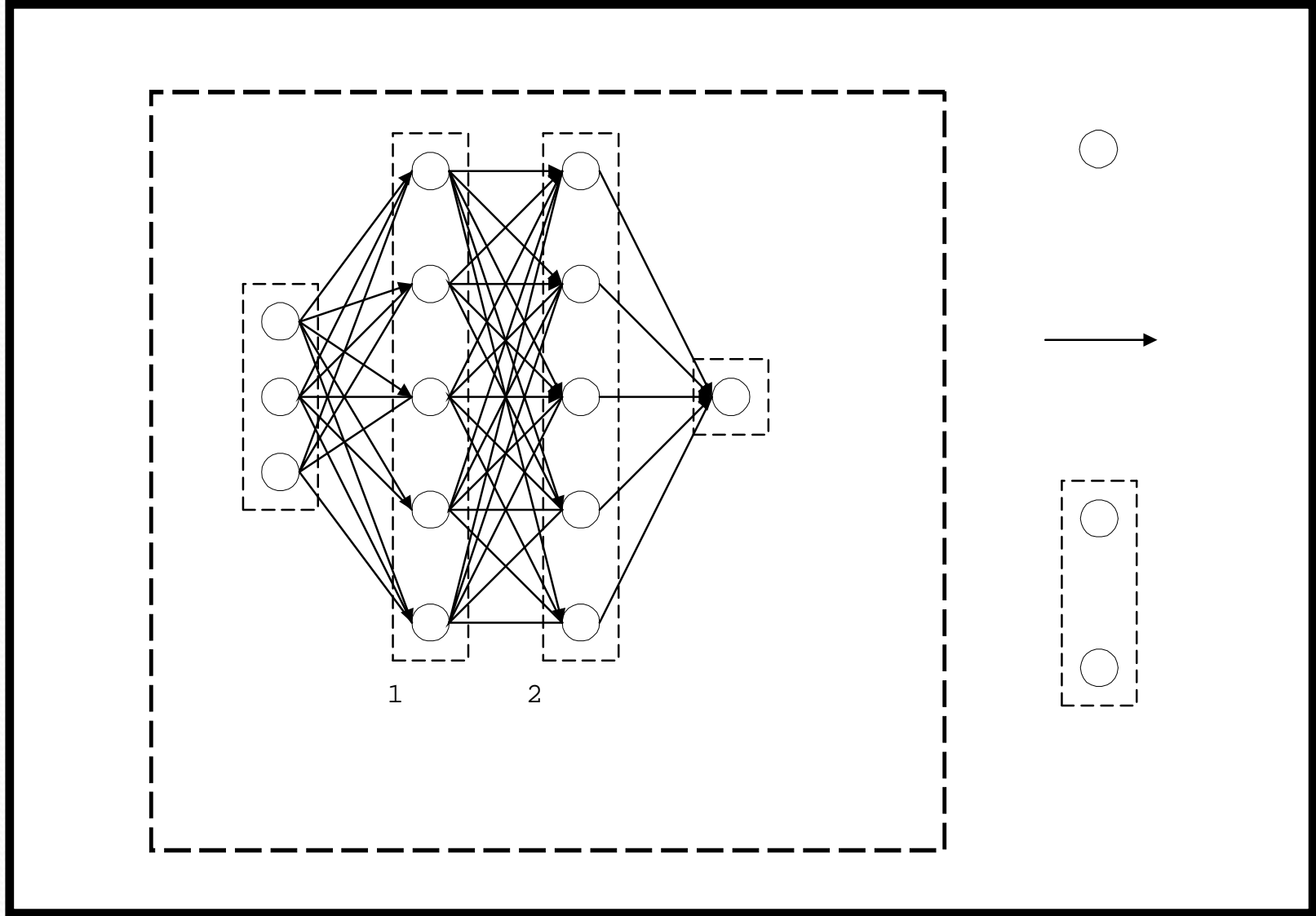
perceptron



2) _____ (layers):

_____ (input layer), _____
_____ (output layer) _____
_____ () _____
_____ () (hidden layer(s)).





3) _____ (*connections*): $\mu\mu$

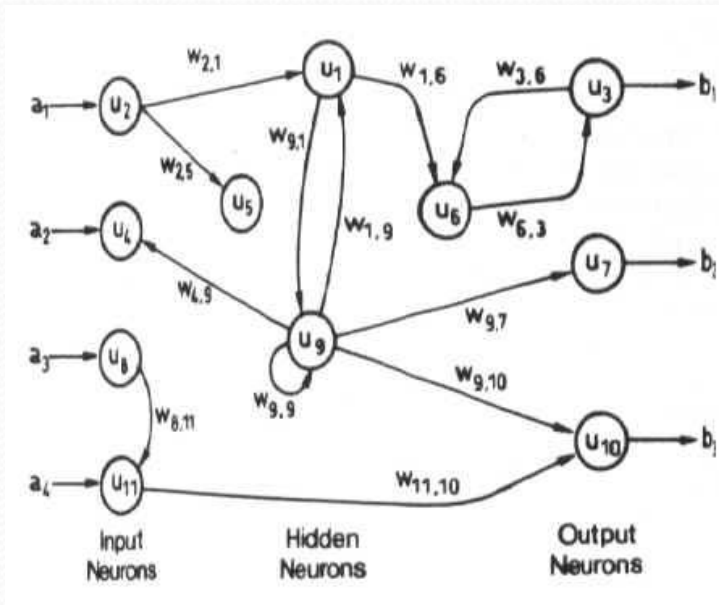
μ . - μ - $\mu\mu$

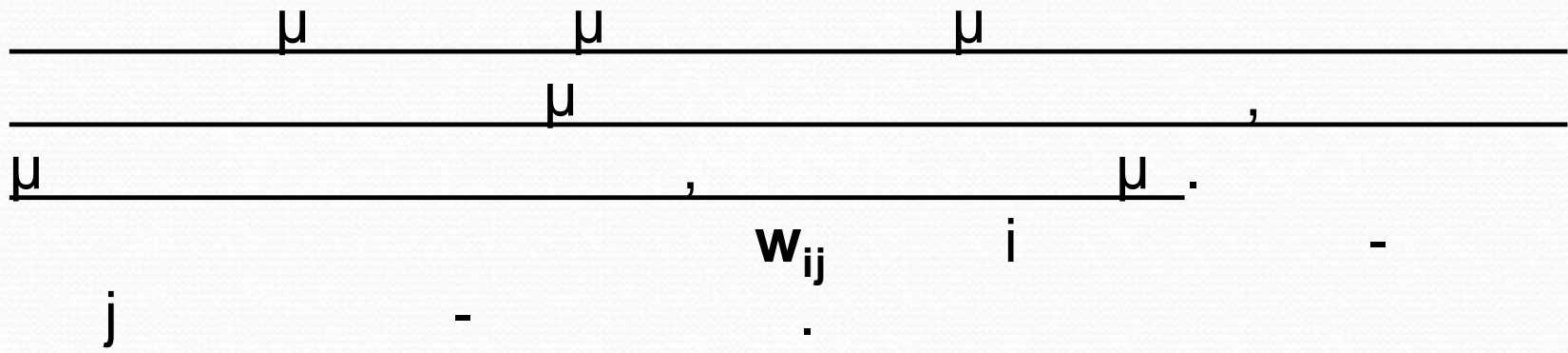
(*excitatory*)

(*inhibitory*)

, μ μ

μ μ ,





“ μ μ μ ” (training phase). μ μ

μ
) μ (training set),
 II) μ (cross validation set)
) μ (testing set).

μ μ μ
 μ μ μ
 μ μ μ
 (learning rule).

μ μ μ
 μ (unsupervised). μ (supervised) μ

•

μ

“ μ ”
)

μ

(

μ

μ

μ

μ

μ

:

$$net_i = \sum_{j=1}^n (w_{ij} \times x_j)$$

(net)

μ

μ

μ

(output)

i,

μ

μ

μ

(inputs)

i

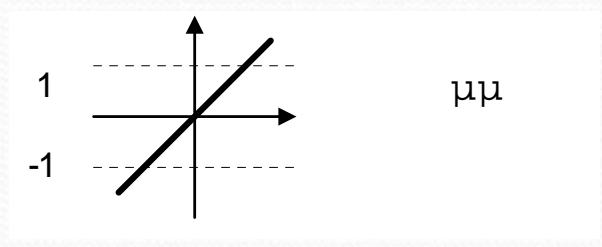
μ

j.

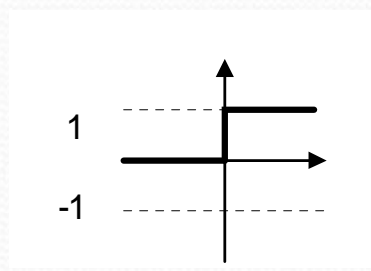


) $\mu\mu$ (linear), (slope) $\mu\mu$

μ μ .



) μ (threshold), « » , (threshold)-
 μ μ (bias), μ μ
 1, μ 0.



)

μ

(sigmoid or logistic),

μ

μ

μ

μ

μ

$\mu\mu$



μ

μ

μ

μ

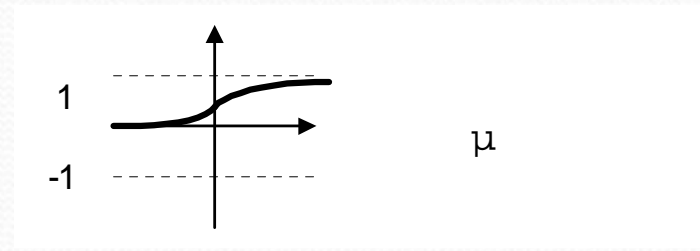
μ

μ

0

1.

$$F = \frac{1}{1 + e^{-\beta(\text{NET}(x) - \theta)}}$$



μ

μ

IV)
tangent),
 μ

μ

μ

-1

μ

μ

(hyperbolic

μ

.

1,

,

$$F = \tanh(x/2)$$

V)

Gauss (Gaussian)

μ

μ

μ

.

1)

μ

2)

μ

μ

.

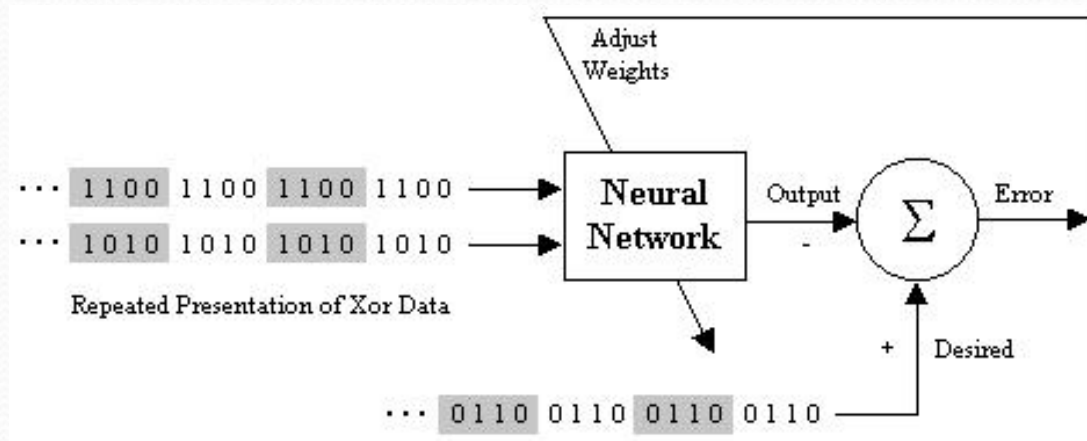
μ

:

,

μ

μ



SNN

MLF

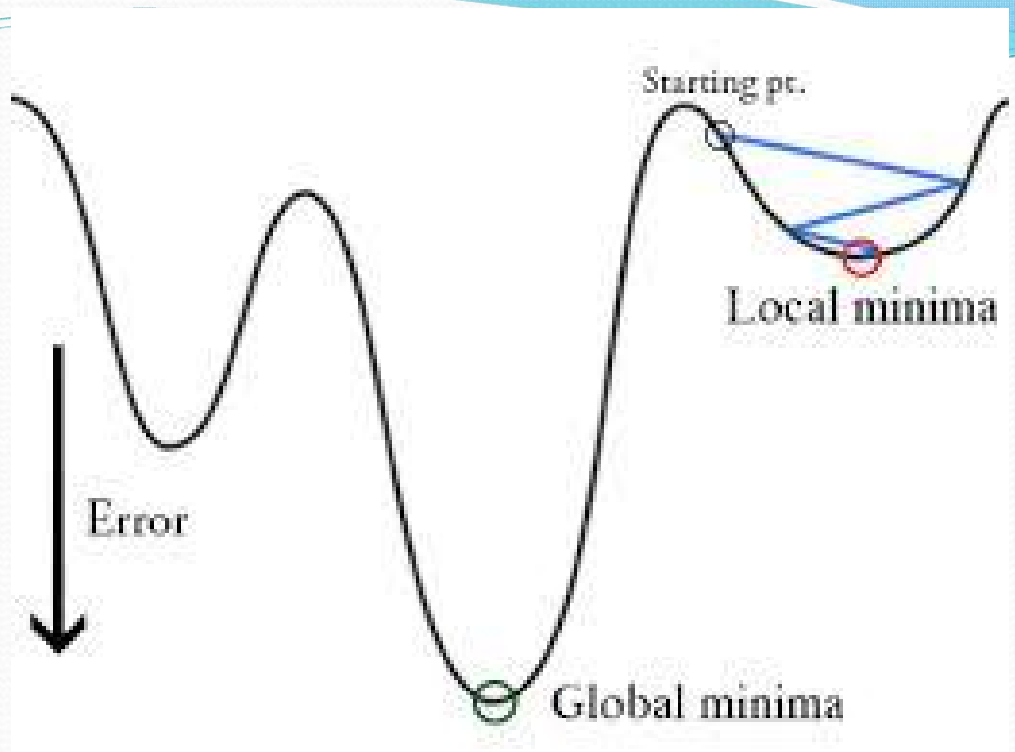
,
(back propagation).

,
(on-line μ),
_____ (batch μ), _____
 μ _____ μ _____

μ _____ μ _____
 μ . (1)
)

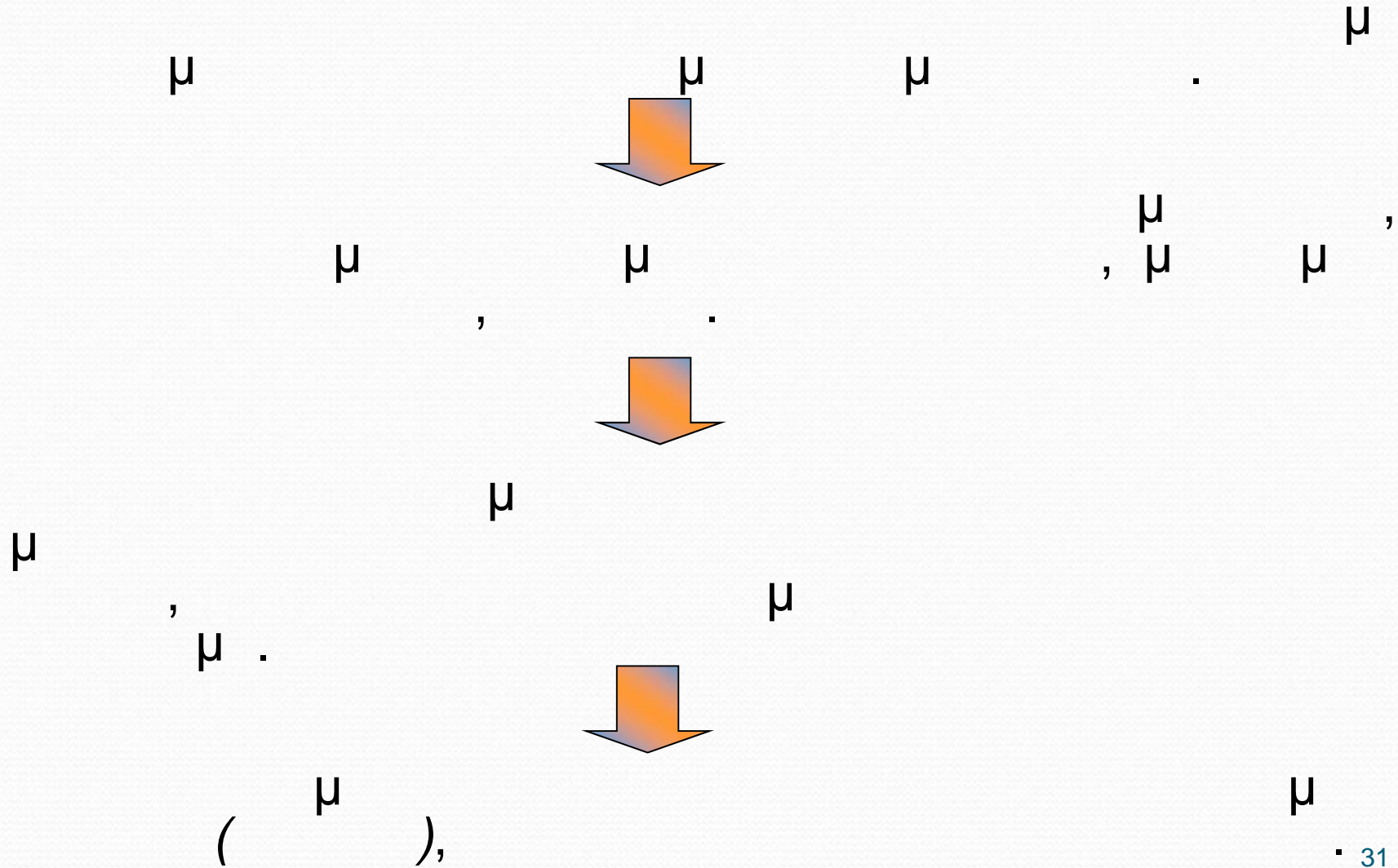
μ _____ (μ _____)
_____ . (epoch)

μ _____
 μ _____ μ _____ μ _____ .



μ (momentum), μ " "
 $0,6 < \mu < 0,8$, μ
 μ μ μ μ

ΑΡΧΙΤΕΚΤΟΝΙΚΗ ΤΕΧΝΗΤΩΝ ΝΕΥΡΩΝΙΚΩΝ ΔΙΚΤΥΩΝ:



....

“over-training”):

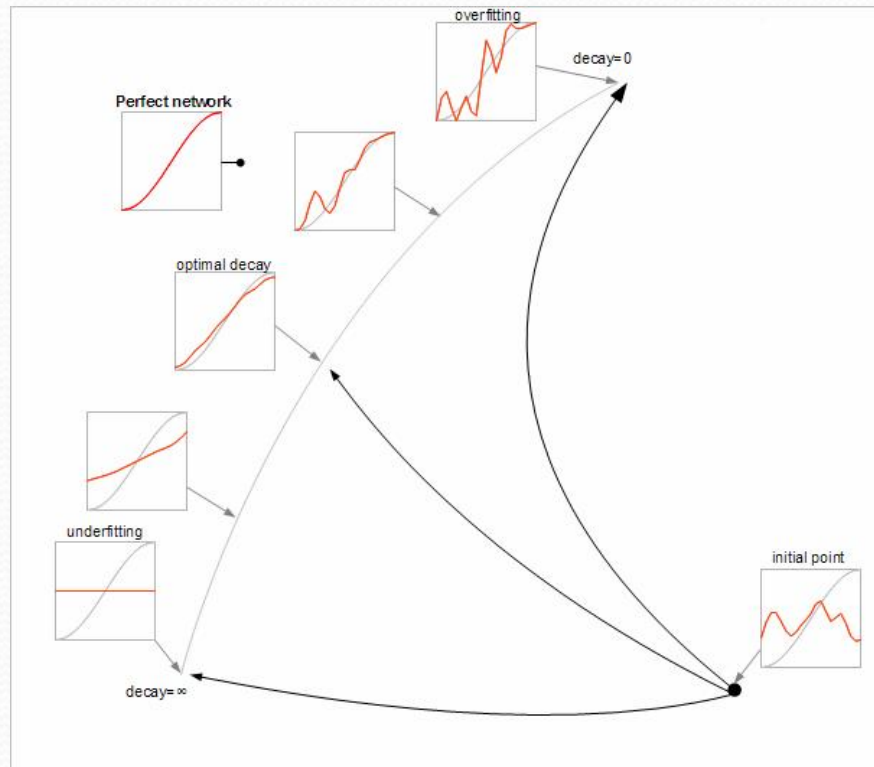
μ (“over-fitting”, “over-learning”

μ μ
μ μ

(μ) μ μ
.

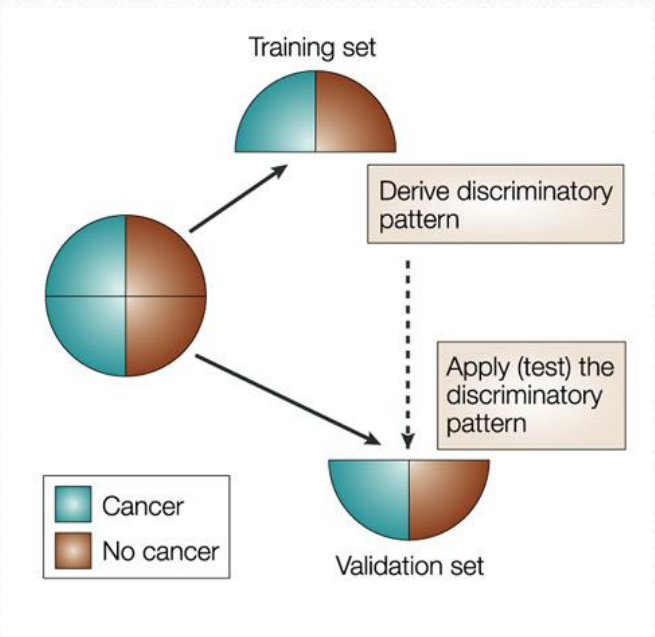
μ

() μ .



_____ : μ _____ μ _____ μ :
(validation set).

μ : μ () μ μ μ .
 μ μ μ " " .



3 μ μ :

➤ $\frac{\mu \quad \mu}{\mu \quad \mu} /$ “ ”

➤ $\frac{\mu}{\mu}$ μ μ

➤ $\frac{\mu}{\mu}$ μ μ μ μ .

(Unsupervised learning)

μ μ , “ ”
 μ μ μ ,
 μ μ . μ
 μ μ μ μ .

(self-organization)

(adaptation)

μ μ / μ μ .



(μ , winner neuron) μ μ
 μ , μ .

μ « μ » μ μ μ μ , μ μ .

Kohonen

μ μ μ ,
 o- (self-organizing maps). μ ,
 μ μ ,
 μ μ .

Πλεονεκτήματα ANNs



μ (inputs) μ μ μ (outputs).
μ μ , μ μ



μ μ μ μ μ μ μ μ



ANNs μ μ μ μ μ μ μ μ μ μ



“ ” ,



μ “ ” μ



μ “ ” μ μ . μ



μ .



μ μ . μ ,



μ (μ μ)
μ .

Μειονεκτήματα ANNs



μ



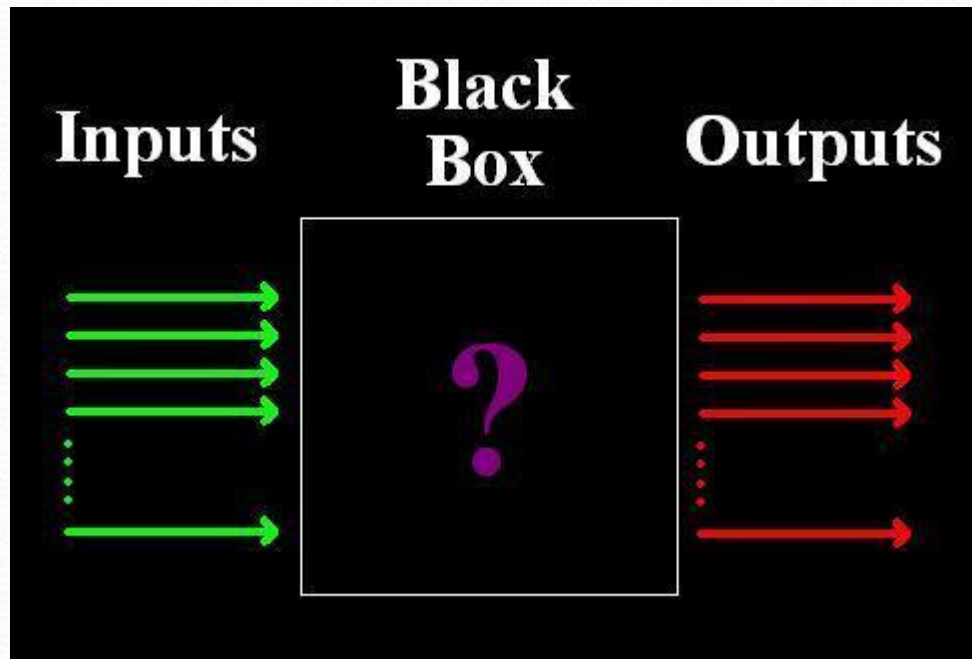
“black-box”.

μ

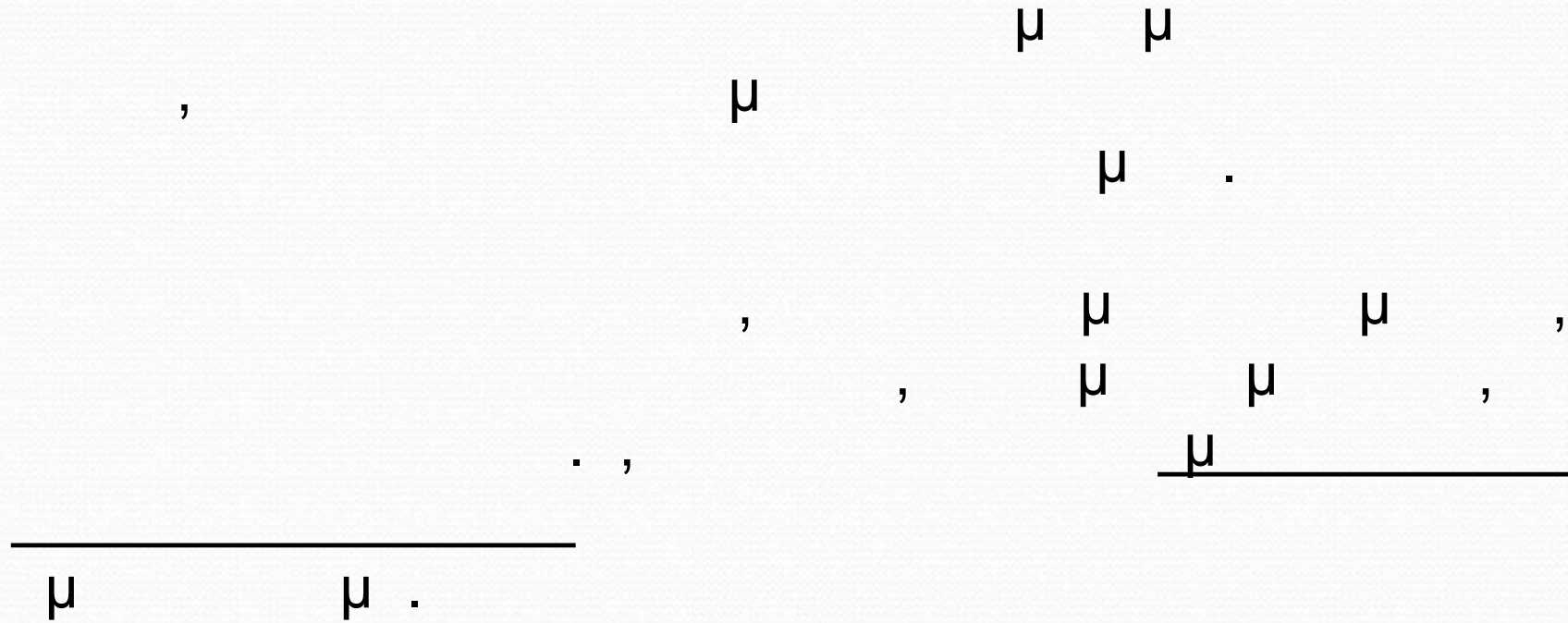
μ

μ

μ



μ (Genetic Algorithms)



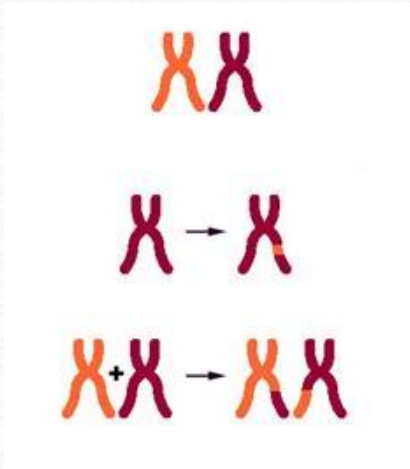
(global search)
(selection),
(mutation).

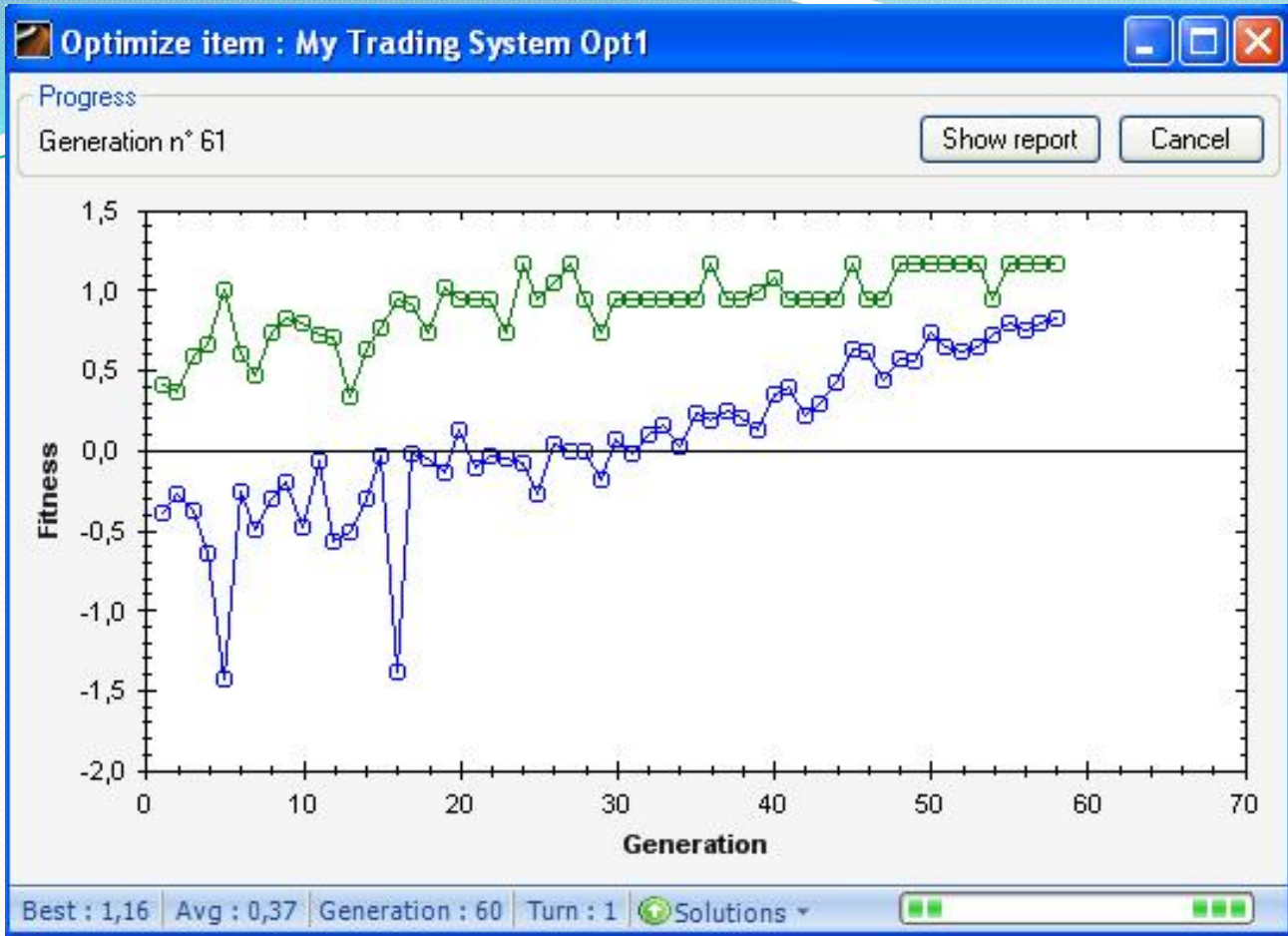
μ μ

(crossover)

μ

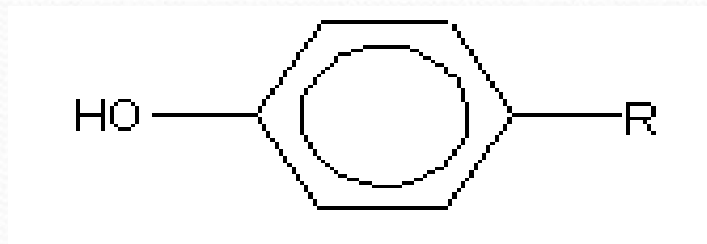
« (genetic operations),





QSPR

μ : μ μ
 $p - \mu$



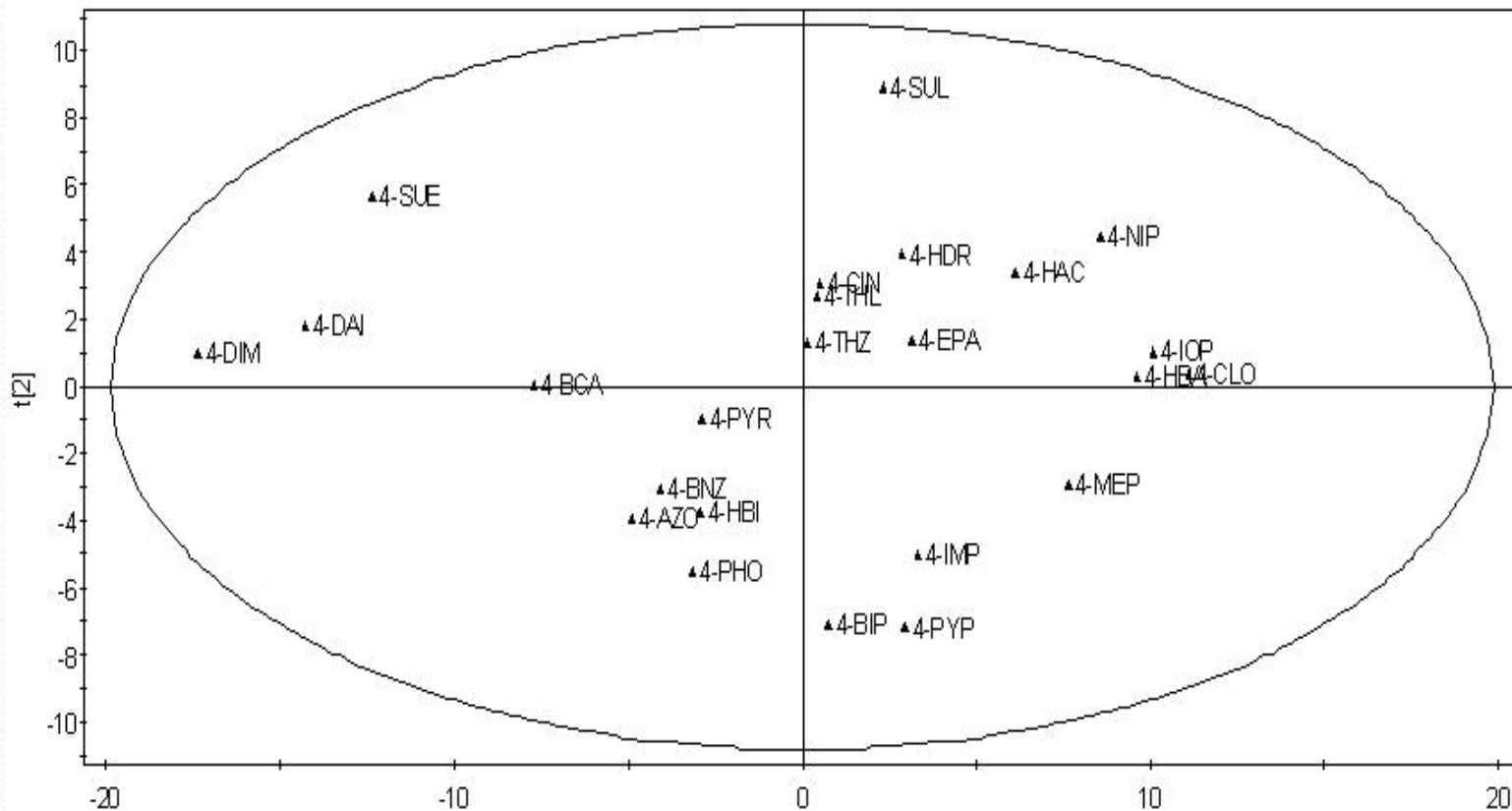
-24 (μ)
- μ μ μ μ **HRP**
(μ)- H_2O_2 - μ (μ μ)
- μ -
QSPR

- (descriptors) μ μ 158 μ

-O μ
(data normalization), μ
, μ , « μ »
descriptor μ .

- μ
() μ ,

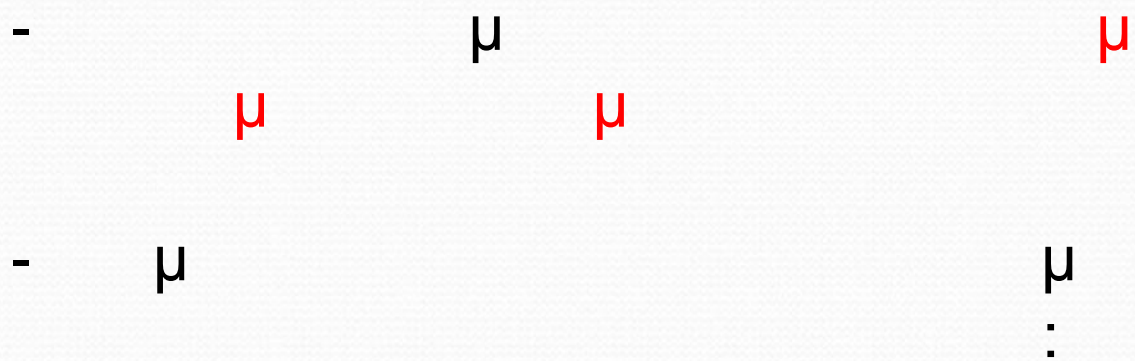
, PCA



Τα διαγράμματα αυτά αποκαλύπτουν την ύπαρξη ομάδων, τάσεων, εκτρόπων τιμών κ.λ.π. Για παράδειγμα οι ενώσεις 4-BIP και 4-PYP έχουν παρεμφερείς ιδιότητες, ενώ οι 4-DIM και 4-MEP, που βρίσκονται στο απέναντι διαγώνιο τεταρτημόριο, έχουν αντίθετες ιδιότητες.

Ομάδα εκπαίδευσης (16)	4-AZO, 4-HAC, 4-BCA, 4-BIP, 4-CLO, 4-DAI, 4-EPA, 4-DIM, 4-MEP, 4-NIP, 4-PHO, 4- PYR, 4-PYP, 4-SUL, 4-SUE, 4-THZ
Ομάδα επικύρωσης (4)	4-IMP, 4-CIN, 4-IOP, 4-HBI
Ομάδα ελέγχου (4)	4-BNZ, 4-HDR, 4-HBA, 4-THL

- - - μ (MLP)



1) μ μ (Mean Squared Error, MSE), μ
 μ (Normalized Mean Squared Error, NMSE)

$MSE = \frac{\sum_{j=0}^P \sum_{i=0}^N (d_{ij} - y_{ij})^2}{N \times P}$	$NMSE = \frac{P \times N \times MSE}{\sum_{j=0}^P \frac{N \times \sum_{i=0}^N d_{ij}^2 - (\sum_{i=0}^N d_{ij})^2}{N}}$
--	--

2)

μ
Predictions, **RMSEP**)

μ
(Root Mean Square Error of

$$RMSEP = \sqrt{\frac{\sum_i^n |y_{obs} - y_{pred}|^2}{n}}$$

3)

coefficient, r (R)

$\mu\mu$

(Correlation

()

μ

μ

