

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ
ИНСТИТУТ БИОФИЗИКИ

на правах рукописи

БАРЦЕВА Ольга Дмитриевна

ИССЛЕДОВАНИЕ ОТНОШЕНИЙ МЕЖДУ СТРУКТУРОЙ И ФУНКЦИЕЙ
ЭВОЛЮЦИОННО ВОЗНИКШИХ СИСТЕМ С ПОМОЩЬЮ
НЕЙРОСЕТЕВОЙ МОДЕЛИ.

03.00.02 - Биофизика

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Научный руководитель
доктор физико-математических наук,
профессор, Р.Г.Хлебопрос

КРАСНОЯРСК - 2002

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	4
ГЛАВА 1. ПРОБЛЕМА СООТВЕТСТВИЯ СТРУКТУРЫ И ФУНКЦИИ СИСТЕМ, ВОЗНИКШИХ ЭВОЛЮЦИОННЫМ ПУТЕМ.	9
1.1 ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ О СООТНОШЕНИИ СТРУКТУРЫ И ФУНКЦИИ БИОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ.	9
1.2 ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ - ИНСТРУМЕНТ ИССЛЕДОВАНИЯ СЛОЖНЫХ СИСТЕМ.	12
1.3 СЕТИ КАК СПОСОБ ОПИСАНИЯ СЛОЖНЫХ СИСТЕМ.	19
1.4 НЕЙРОННЫЕ СЕТИ.	22
1.5. ЭВОЛЮЦИОННЫЙ ПРОЦЕСС КАК ПОИСК ЭКСТРЕМУМА ФУНКЦИИ ПРИСПОСОБЛЕННОСТИ.	26
ГЛАВА 2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ.	29
2.1. АЛГОРИТМИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ГЕНЕРАЦИИ НЕЙРОСЕТЕВЫХ МОДЕЛЬНЫХ ОБЪЕКТОВ С ЗАДАННОЙ ФУНКЦИЕЙ.	29
2.2 СТАНДАРТНЫЕ МЕТОДЫ ОЦЕНКИ СХОДСТВА СТРУКТУР НМО.	37
2.3 МЕТОДЫ ПОИСКА ЛОКАЛЬНОЙ И ДИСКРЕТНОЙ СИММЕТРИЙ.	38
2.4. КОНТРАСТИРОВАНИЕ НМО.	39
2.5. ПОЛУЧЕНИЕ СТРУКТУР НЕЙРОСЕТЕЙ, СФОРМИРОВАННЫХ ПОД ДЕЙСТВИЕМ "МУТАЦИОННОГО ДАВЛЕНИЯ."	39
2.6. ОБОЗНАЧЕНИЯ НЕЙРОСЕТЕЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ В РАБОТЕ.	40
2.7. ОПИСАНИЕ ПРОГРАММНОГО ПАКЕТА, ИСПОЛЬЗУЕМОГО В РАБОТЕ.	41
ГЛАВА 3. РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПО СРАВНЕНИЮ СТРУКТУР НМО.	47
3.1 РЕЗУЛЬТАТЫ СРАВНЕНИЯ СТРУКТУР НМО ПРИ ПОМОЩИ СТАТИСТИЧЕСКИХ И АЛГЕБРАИЧЕСКИХ МЕТОДОВ.	47
3.2 ОЦЕНКИ СХОДСТВА СТРУКТУР НМО, ПОЛУЧЕННЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЕМ ЕВКЛИДОВА РАССТОЯНИЯ.	50
РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ ГЛАВЫ.	58
ГЛАВА 4. ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ МЕХАНИЗМОВ ФОРМИРОВАНИЯ КЛАСТЕРОВ.	60
4.1 ЛОКАЛЬНАЯ СИММЕТРИЯ СТРУКТУР НМО, ВЫПОЛНЯЮЩИХ ОДИНАКОВЫЕ ФУНКЦИИ.	61
4.2 ДИСКРЕТНАЯ СИММЕТРИЯ. ЧИСЛО КЛАСТЕРОВ, ФОРМИРУЕМЫХ СТРУКТУРАМИ НМО.	63
РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ ГЛАВЫ.	65
ГЛАВА 5. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ПРОВЕРКА ЭКВИВАЛЕНТНОСТИ СТРУКТУР НМО, ВЫПОЛНЯЮЩИХ ОДИНАКОВЫЕ ФУНКЦИИ.	66
5.1 ПРИМЕНЕНИЕ СИММЕТРИЧНЫХ ПРЕОБРАЗОВАНИЙ К НМО, ВЫПОЛНЯЮЩИМ ОДНУ И ТУ ЖЕ ФУНКЦИЮ.	66

5.2 Анализ минимальных структур, обеспечивающих выполнение данной функции.....	75
Результаты и выводы главы.	77
ГЛАВА 6. АНАЛОГИИ МЕЖДУ СВОЙСТВАМИ НМО И ДРУГИМИ СИСТЕМАМИ, ВОЗНИКШИМИ ЭВОЛЮЦИОННЫМ ПУТЕМ.	79
ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ.	83
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.	85
ЛИТЕРАТУРА	87
ПРИЛОЖЕНИЕ	94
Параметры различных режимов обучения	94
Значения коэффициентов корреляции НМО.....	94
Распределение синапсов НМО.....	102
Сравнение матриц НМО.....	105
Примеры вычисления парных расстояний для различных НМО.	108
Примеры применения симметричных преобразований к структурам 6-ти нейронных НМО, выполняющим функцию АЗ (сигмоидальная переходная характеристика, АДФ).	112
Применение преобразований к структурам, выполняющим разные функции.....	122

ВВЕДЕНИЕ

Проблема развития является центральной проблемой биофизики сложных систем (Волькенштейн, 1978; Fontana, Schuster, 1998a), и один из ее аспектов состоит в непредсказуемости конкретного пути эволюции при его принципиальной неизбежности (Эйген, 1973). Недетерминированность эволюции связана с тем, что требуемая для выживания вида функция может реализовываться разными эволюционно возникшими структурами (Фокс, 1966; Мейен, 1974; Fontana, Schuster, 1998a, 1998b). Следовательно, одной из причин непредсказуемости пути и исхода эволюции является неоднозначность отношений "структура-функция" в эволюционно возникших системах.

В то же время известен определенный параллелизм в эволюции различных видов и родов, нашедший свое выражение в законе гомологичных рядов в наследственной изменчивости Н.И.Вавилова (Мейен, 1974). Возникает вопрос о существовании некоторой структурной общности у систем, выполняющих одну и ту же функцию, но сформированных на разных эволюционных траекториях. Если эта общность существует, то в определенном смысле можно говорить об эквифинальности (прогнозируемости) эволюции.

Проблема структурно-функционального соответствия в контексте эволюции может быть сформулирована следующим образом: "Существует ли нечто общее в эволюционно возникших структурах, выполняющих одну и ту же функцию, что отличает их от структур, реализующих другие функции?". Тем самым ставится вопрос о существовании функционального инварианта структуры. Практический аспект этой проблемы значим для молекулярной биологии, белковой инженерии и экологии и может быть сформулирован следующим образом: "Можно ли по известной структуре предсказать функцию биологической системы, и наоборот, построить или реконструировать структуру, выполняющую данную функцию?".

Исследованию общих свойств биологических систем препятствуют два основных фактора. Во-первых, это единственность эволюционных исходов, которая не позволяет проводить сравнительный анализ биологических структур (в распоряжении исследователей имеется только один вариант живого, реализовавшийся на Земле). Во-вторых, это чрезвычайная сложность реальных биологических объектов, которая приводит к невозможности учесть все то огромное количество взаимодействий элементов структуры, которое определяет функцию данного объекта.

Средством работы со сложными системами являются феноменологические модели, описывающие систему в общем, не детализируя ее. Феноменологические модели являются традиционным инструментом исследований в биофизике сложных систем (Волькенштейн, 1978). Они предназначены для ответа на принципиальные вопросы. Примеры таких исследований "по принципу" хорошо известны в физике и биофизике (Рашевский, 1968; фон Нейман, 1973; Эйген, 1973; Николис, Пригожин, 1979).

В соответствии с подходом биофизики сложных систем для исследования проблемы структурно-функционального соответствия нужно использовать предельно простую, "прозрачную", возможно даже абстрактную, феноменологическую модель. Если выделено некоторое общее для множества систем свойство, то исследование "по принципу" можно проводить на объектах различной природы. Задача заключается в подборе модели, в которой структурно-функциональные отношения, лежащие в основе реальных жизненных процессов, выражены наиболее выпукло.

В настоящее время развивается подход к исследованию сложных систем, основанный на моделях эволюционирующих сетей. Проводится сравнительный топологический анализ моделей сетей различной природы: метаболических путей, белок белковых взаимодействий; пищевых цепей экосистем; нервных сетей, энергетических систем; Интернета и т.п. (Barbasi, 1999; Amaral, *et. all.*, 2000; Albert *et. al.*, 2001; Jeong *et.,al.*, 2001; Strogatz, 2001; Sanjay, Sandeep, 2001). Обнаружен ряд свойств, общих для этих сетей, что говорит о потенциально

широкой применимости сетевых моделей, к которым относятся и нейронные сети.

Развитие теории и практики нейронных сетей дает в руки исследователей инструмент моделирования с богатыми возможностями (Hopfield, 1982; Rumelhart, Hinton, Williams, 1986; Kohonen, 1982; Grossberg, 1988). Относительная простота обучения нейронных сетей позволяет создавать ансамбли из отдельных экземпляров нейросетей, выступающих в качестве нейросетевых модельных объектов (НМО), к которым применимы методы статистики и сравнительного анализа.

Сходство формального описания процессов эволюции и обучения нейронных сетей (Барцев, Гилев, Охонин, 1989; Wolpert, Macready, 1995; Stadler *et. al*, 2000) позволяет использовать нейросетевую модель, как инструмент исследования эквивиальности эволюционных процессов. Тем более, что в практике использования нейронных сетей, существует проблема воспроизводимости вычислительных экспериментов, родственная проблеме эволюционной эквивиальности (Partridge, Yates, 1996).

Цель работы. На примере простых эволюционно сформированных систем, в роли которых используются нейронные сети, оценить сходство структур, выполняющих одинаковые и различные функции.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие задачи:

1. Разработать пакет программ для генерации и исследования нейросетевых моделей в контексте эволюции их структуры и функции.
2. Провести вычислительные эксперименты с ансамблями нейронных сетей для получения достаточного для статистической обработки количества данных.
3. Провести сравнительный анализ нейросетей, выполняющих одну и ту же и различные функции, при помощи различных статистических и теоретических инструментов.

4. Оценить применимость выводов, полученных на нейросетевых моделях, к реальным биологическим системам.

Научная новизна:

1. Предложен подход к исследованию общих свойств структурно-функциональных отношений эволюционно возникших систем с помощью модельного объекта - ансамбля нейронных сетей;
2. Обнаружено, что структуры нейросетей, выполняющих одну и ту же функцию, образуют в пространстве структурных параметров обособленные скопления, кластеры. Показано, что структуры нейросетей, выполняющих одну и ту же функцию, могут различаться больше, чем структуры нейросетей, выполняющих разные функции.
3. На основе теоретического описания механизма формирования кластеров выявлены типы симметрий структур нейросетей, позволяющие свести все множество независимо сформированных нейросетей, выполняющих одну и ту же функцию, к любой нейросети из этого множества. Это указывает на существование функционального инварианта и функциональной симметрии структуры.
4. Получены точные оценки максимального количества кластеров, которые могут образовывать в пространстве структурных параметров нейросети, выполняющие данную функцию. Показана принципиальная возможность по результату одного эволюционного исхода, определить все множество эволюционных исходов, которые с учетом функциональных симметрий являются эквивалентными.

Практическая значимость.

Полученные результаты позволяют:

- а) с помощью обнаруженных симметрий обеспечить воспроизводимость вычислительных экспериментов с нейронными сетями;

- b) усовершенствовать существующие нейросетевые алгоритмы, обеспечив преодоление нейтральных участков, на которых градиент целевой функции равен нулю;
- c) наметить подход к уменьшению разнообразия биологических экспериментальных данных путем целенаправленного поиска функциональных симметрий структуры биосистем.

На защиту выносятся следующие положения.

1. В пространстве структурных параметров нейросетевые модельные объекты, выполняющие определенную функцию, образуют скопления, кластеры. Это явление устойчиво, то есть проявляется для разных алгоритмов, условий обучения, количеств нейронов и видов переходной характеристики нейронных сетей.
2. У нейросетей с четно/нечетными переходными характеристиками, существует три типа функциональных симметрий, позволяющих с помощью соответствующих этим симметриям преобразований, свести все множество структур нейросетей, выполняющих данную функцию к любой одной структуре из этого множества.
3. Существование функционального инварианта структуры нейросети означает эквивалентность исходов процесса обучения вне зависимости от конкретной траектории его реализации.

Апробация работы. Материалы диссертационной работы докладывались на Сибирском Конгрессе по Прикладной и Индустриальной математике (ИНПРИМ-98), IX Международном симпозиуме "Реконструкция гомеостаза", 1998; VII Всероссийском семинаре "Информатика и ее приложения", 1999; III Всероссийском семинаре "Моделирование неравновесных систем-2000"; Симпозиуме «Гомеостаз», 2000; Конференции, посвященной 90-летию со дня рождения А.А.Ляпунова, Новосибирск, 2001; IV Всероссийском семинаре "Моделирование неравновесных систем-2001".

ГЛАВА 1. ПРОБЛЕМА СООТВЕТСТВИЯ СТРУКТУРЫ И ФУНКЦИИ СИСТЕМ, ВОЗНИКШИХ ЭВОЛЮЦИОННЫМ ПУТЕМ. (ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ).

1.1 Экспериментальные данные о соотношении структуры и функции биологических систем.

Центральной проблемой теоретической биологии и биофизики сложных систем, по мнению М.Волькенштейна, является проблема развития, имеющая филогенетический и онтогенетический аспекты (Волькенштейн, 1975). Одной из граней проблемы развития является проблема эволюции. Однако эту проблему невозможно обсуждать без обсуждения проблемы соответствия структуры и функции, поскольку результатом эволюции является выполнение определенной функции, а изменения происходят в структурах, выполняющих эту функцию. По мнению Дж.Бернала (1968): "биология методологически отличается от других естественных наук тем, что в фокусе внимания находятся прежде всего *функционирование* (курсив Дж.Бернала) и эволюция систем. Структура здесь имеет значение только в связи с функцией и происхождением. ...Происхождение, структура и функция теперь уже не могут быть разделены". Аналогичное мнение высказывал и Т.Добжанский: "Все в биологии имеет смысл только в контексте эволюции" (цит. по Schuster, 1996, стр.1).

Возможно, наиболее полно суть этой проблемы отражена в следующем высказывании: "Каждая отдельная система, возникающая в результате мутаций и отбора, непредсказуема в отношении своей структуры; тем не менее неизбежным результатом всегда является процесс эволюции - это закон. ... оптимизирующий процесс эволюции в принципе неизбежен, хотя выбор конкретного пути не детерминирован" (Эйген, 1973). Таким образом, из этого высказывания следует, что соответствующая функция в результате эволюционного процесса возникает неизбежно, а конкретный вид структуры, выполняющей эту функцию, непредсказуем.

Прикладной аспект этой проблемы, важный для белковой инженерии и экологии, может быть сформулирован следующим образом: "Можно ли по известной структуре предсказать функцию биологической системы, и наоборот, построить или реконструировать структуру, выполняющую данную функцию?".

В настоящее время известны многочисленные примеры выполнения одной и той же функции различными структурами. Например, в лабораторных экспериментах было показано, что при случайном синтезе полипептидов возникает много каталитических функций, иногда очень специфических, например, химотрипсиноподобная функция у полипептидов с беспорядочной структурой. Эти продукты не образуются воспроизводимым образом. И даже, если некоторые функции возникают воспроизводимо, их носителями оказываются совершенно различные и неродственные структуры (Фокс, 1969).

Известно, что имеется много типов ферментов, катализирующих реакции с использованием молекулярного кислорода, причем эти ферменты структурно неродственны. Также существует много типов ферментов, катализирующих гидролиз пептидной связи. Каждое из семейств этих ферментов имеет особый механизм и структуру (Уайт, 1981).

Другим указанием на неоднозначное соответствие структуры и функции биологических макромолекул являются теория нейтральности М.Кимуры (Кимура, 1985; Kimura, 1991). Из проведенного им анализа экспериментальных данных и разработанной им теории нейтральности следует, что большая часть мутационных замещений в ходе эволюции обусловлена случайным закреплением нейтральных или почти нейтральных мутаций. Наличие нейтральных мутаций говорит о неоднозначном соответствии функции биологических макромолекул их структуре.

Идейно близки к концепции М.Кимуры исследования по изучению отображения нуклеотидной последовательности в фенотип, использующие вычислительную модель мутационного процесса РНК длиной 70 нуклеотидов. Следует отметить, что первоначально эксперименты проводились на реальных

последовательностях, но выяснилось, что содержательные выводы получаются и при работе на компьютерных моделях, а выгоды работы на "компьютере" по сравнению с работой "в колбе" очевидны. На компьютере моделируется сворачивание РНК во вторичную структуру, которая и считается фенотипом. За наиболее "приспособленную" вторичную структуру произвольно выбрана одна из возможных конфигураций. На этой компьютерной модели получены данные о неоднозначном соответствии фенотипа генотипу (функции структуре) (Fontana, Schuster, 1998b; Fontana, Schuster, 1998a; Schuster, 1996).

Поднимаясь выше по ступеням организации, можно, например, отметить, что механизмы работы крыльев насекомых и птиц различны, крылья имеют совершенно различную структуру, но выполняют одну и ту же функцию (Уайт, 1981). Можно привести удивительный пример разнообразия звукопроизводящих органов у многих личинок насекомых, живущих под землей, и являющихся близкородственными группами. (Любищев, 1971). Кроме того, если предположить, что у экосистем одна и та же функция (Печуркин, 1982), то разнообразие видов экосистем дает еще один пример неоднозначности структурно-функциональных отношений.

Тогда закономерно возникает следующая формулировка проблемы структурно-функционального соответствия: есть ли что-то общее в эволюционно возникших структурах, выполняющих одну и ту же функцию, отличающее их от структур, реализующих другую функцию?

В то же время известен определенный параллелизм в эволюции различных видов и родов, нашедший свое выражение в законе гомологических рядов в наследственной изменчивости Н.И.Вавилова (Мейен, 1974). По мнению А.Любищева "в многообразии форм есть своя, не зависящая от функции упорядоченность, своя закономерная система, обнаруживаемая, например, в процессе выявления симметрий на основе строгого математического описания" (цит. по Мейен, 1977).

Таким образом, существует противоречие: с одной стороны говорится о совершенном различии структур, выполняющих одинаковые функции, с другой

стороны - существование сходства у структур, выполняющих различные функции, причем параллелизм в изменчивости проявляется в сложных конфигурациях, которым, как правило, не удается дать приспособительного толкования (там же).

Следовательно, несмотря на большой объем фактического материала и длительность обсуждения, вопросы, сформулированные выше, до сих пор не имеют общепризнанного ответа. Это можно объяснить проявлением принципа дополнительности Н. Бора, из которого следует, что практически невозможно одновременно изучать атомарно-молекулярную структуру организма и его поведение как целостной биологической системы. Применимость принципа дополнительности в биологии Н. Бор аргументировал чрезвычайно высокой сложностью организма как целостной системы. Хотя это утверждение высказано по отношению к организму, оно имеет силу даже на уровне макромолекул, то есть, им охватываются биосистемы различных уровней.

Исключительная сложность реальных биологических систем и длительность процесса эволюции препятствуют исследованию свойств структурно-функциональных отношений на естественных объектах. Возможный выход видится в исследовании этого вопроса "в принципе", что позволяет использовать предельно простые модельные системы.

1.2 Феноменологические модели - инструмент исследования сложных систем.

Еще раз отметим, что исследованию общих свойств биологических систем препятствуют два основных фактора. Во-первых, это чрезвычайная сложность реальных биологических объектов, которая приводит к невозможности учесть то огромное количество взаимодействий, которое определяет функцию этого объекта. Биологическая система всегда исследована не окончательно, никогда нет уверенности, что известны все значимые для данной функции параметры или свойства взаимодействующих частей.

Во-вторых, это единственность эволюционных исходов, которая не позволяет использовать один из самых эффективных инструментов исследования - сравнительный анализ биологических структур (в распоряжении исследователей имеется только один вариант живого, реализовавшийся на Земле).

Практически единственно доступным сейчас средством работы со сложными системами являются феноменологические модели, которые описывают систему в общем, не детализируя ее. Феноменологические модели являются традиционным инструментом исследования в биофизике сложных систем (Волькенштейн, 1978). Уместно привести пространную, но исчерпывающе объясняющую ситуацию цитату известного биофизика Н.Рашевского.

"Мы начинаем с исследования в высшей степени идеализированных систем, которые могут не иметь никаких прямых аналогов в реальной природе. Этот момент следует особо подчеркнуть. Против такого подхода можно выдвинуть возражение, что подобные системы не имеют никакой связи с действительностью и что поэтому никакие заключения относительно таких систем не могут быть перенесены на реальные системы. Тем не менее, именно этот подход применяли и всегда применяют в физике. Физик занимается детальным математическим исследованием таких нереальных вещей, как "материальные точки", "абсолютно твердые тела", "идеальные жидкости" и т. п. *В природе подобных вещей не существует.* Однако же физик не только изучает их, но и применяет свои выводы к *реальным вещам*. И что же? Такое применение ведет к практическим результатам – по крайней мере в известных пределах. Все дело в том, что в этих пределах реальные вещи имеют свойства, общие с воображаемыми идеальными объектами! Только сверхчеловек мог бы охватить в математическом аспекте сразу всю сложность реального предмета. Мы, обыкновенные смертные, должны быть скромнее, и нам следует подходить к реальности асимптотически, путем постепенного приближения." (цит. по Моровиц, 1968, стр.41).

Работа с феноменологическими моделями есть работа с принципиальными вопросами. Примеры исследований "по принципу" хорошо известны в физике и биофизике. Так, например, исследование цикла Карно, позволило ответить на методологически важный вопрос: "Можно ли в принципе построить тепловой двигатель с к.п.д. 100%?". При этом не важно, что самая эффективная тепловая машина – машина Карно практически бесполезна.

В качестве примера наиболее известных феноменологических моделей можно так же привести модель известного математика и химика А. Тьюринга (Turing, 1952), направленную на выяснение вопроса о принципиальной возможности возникновения организованности (диссипативных структур) в гомогенной среде. Позднее, в работах И. Пригожина и его школы (Николис, Пригожин, 1979) была предложена и исследована идейно близкая модели Тьюринга абстрактная модель "брюсселятора", позволившая ответить на этот вопрос в принципе, хотя модельную реакцию "брюсселятор" сложно сопоставить с какой-либо реальной биохимической реакцией.

В работах М.Эйгена теория, построенная на ряде достаточно абстрактных моделей гиперциклов, дает общий принцип отбора и эволюции на молекулярном уровне (Эйген, 1973).

Работы Дж. фон Неймана позволили положительно ответить на вопрос: "Можно ли в принципе объяснить самовоспроизведение систем на основе известных законов физики, без привлечения понятия "жизненная сила"? (фон Нейман, 1973). При этом совершенно не важно, что самовоспроизводящиеся автоматы Дж. фон Неймана никому в реальном исполнении не нужны. Современным примером абстрактных моделей являются клеточные автоматы (Wolfram 1984b; Ermentrout *et.al.*, 1993; Sipper, 1994) с помощью которых показано, что в общем случае вычисление, соответствующее эволюции неприводимо, то есть исход эволюции непредсказуем.

Опираясь на приведенные примеры, можно ожидать, что преодоление фактора сложности биологических систем возможно через исследование проблемы структурно-функционального соответствия "по принципу", с

помощью предельно простой, "прозрачной", пусть даже и абстрактной феноменологической модели.

Если выделено некоторое общее свойство, то исследование "по принципу" можно проводить на объектах различной природы. "Еще механика Ньютона прибегала к аналогии между падением яблока и движением планет - аналогии, далеко не такой очевидной, как может показаться в силу давней привычки. Но, отождествив (в каком-то отношении) столь разные предметы и процессы, мы освобождаемся от априорных запретов на отождествления, можем искать инварианты в объектах, сколь угодно различных с точки зрения "здорового" смысла" (Мейен и др., 1977).

Аналогично, выделение энергетического принципа позволило сделать следующее утверждение: "Именно поток энергии организует систему (круговорот) и заставляет ее эволюционировать. И здесь нет фундаментальных различий между открытыми системами разной степени сложности. Можно, сказать, что и любой ручей и река "эволюционируют" (как активные элементы физических круговоротов), и "выживают" те, через которые с наибольшей скоростью проносится наибольшее количество воды. "Эволюционируют" по форме и речные камни, и здесь "отбор" приводит к большему продвижению закругленных форм, "захвату" ими нового пространства, и т.д. То же самое (но уже без кавычек) можно сказать об эволюции биосистем" (Печуркин, 1982).

Выбор феноменологической модели зависит от принципиального вопроса, который будет ей задан и доступных способов анализа результатов, полученных на этой модели. Вопрос, который задается феноменологической модели структурно-функциональных отношений, должен быть осмысленным и допускающим конкретный ответ, доступный проверке. Сформулировать его можно следующим образом: "Существует ли, в принципе, что-то сходное в независимо сформировавшихся структурах, выполняющих одну и ту же функцию, и что отличает их от структур, реализующих другую функцию?".

Одним из способов, позволяющих выделить общее, уменьшить разнообразие является поиск симметрии. Под симметрией следует понимать неизменность

(инвариантность) какого-либо объекта при определенного рода преобразованиях (Вейль, 1969). Можно сказать, что симметрия есть совокупность инвариантных свойств объекта. По современному определению "симметрия - понятие, характеризующее переход объектов в самих себя или друг в друга при осуществлении над ними определенных преобразований (преобразований симметрии); в широком плане - свойство неизменности (инвариантности) некоторых сторон, процессов и отношений объектов относительно некоторых преобразований" (Фил. слов, 1989). Принципы симметрии - это запреты, которые ограничивают число вариантов исследуемого объекта или явления. В симметрии проявляется общность свойств, в асимметрии - их различие. В физике законы симметрии выражены в виде запретов на ряд процессов. Эти запреты известны как законы сохранения: энергии, количества движения, момента импульса и т.п.

В биологии тоже делаются попытки поиска симметрий. Характерной чертой уравнений, описывающих биологические объекты, является нелинейность. Сложность изучения нелинейных уравнений связана с тем, что не существует общих рецептов их решения. Симметрия позволяет находить частные, так называемые инвариантные решения. Инвариантные решения являются промежуточными асимптотиками и содержат достаточно богатую информацию о поведении общего решения. Симметрия означает упорядоченность частей целого. Упорядоченность симметричного объекта позволяет "сжать" информацию о его устройстве. Для изучения симметричного объекта необходимо выделить блоки разных уровней и выяснить правила их повторяемости. В математическом описании блоками являются инварианты, а закон их повторяемости определяется теми преобразованиями, относительно которых инварианты сохраняются.

Например, показано, что одной из важнейших характеристик структурной организации молекул белков является их симметричность. Она проявляется и на уровне доменной организации белковых молекул (Blundell *et al*, 1996) и на уровне их первичной структуры (Шпаков, 2000), обсуждается также связь

структурной симметрии и функции белков (Goodsell *et. al*, 2000), исследуются симметрия и энергетический ландшафт биомолекул (Wolynes, 1996). Ведется поиск симметрии в нуклеотидных последовательностях (Zhang, 1997), отмечается, что открытие внутренней симметрии зеркального типа в нуклеотидной последовательности является принципиально новым достижением в молекулярной биологии нуклеиновых кислот (Шпаков, 2001). Обсуждается роль симметрии в органической эволюции (Bellido, 1996).

Одним из эффективных инструментов поиска локальной симметрии является аппарат группового анализа. (Ибрагимов, 1983). Кратко, суть его заключается в следующем.

Рассмотрим преобразование $\{T_a\}$

$$z' = f(z, a), \quad (1.2.1)$$

при помощи которого точка $z = (z^1, \dots, z^N, a)$ евклидова пространства R^N переводится в новое положение $z' = (z'^1, \dots, z'^N, a)$ в том же пространстве R^N , координаты z^j и z'^j точек z и z' относятся к одной и той же системе координат, a -вещественный параметр, непрерывно изменяющийся в данном интервале $\Delta \subset R$. Каждому частному значению параметра a соответствует конкретное преобразование семейства. Если преобразования (1.2.1) имеет следующие свойства:

- 1) $T_0 = I$ (или $T_{a_0} = I$) (существование единицы);
- 2) $T_a^{-1} = T_{a^{-1}}$ (существование обратного элемента);
- 3) $T_b T_a = T_{\varphi(a,b)}$ (1.2.2),

где функция $\varphi(a,b)$ считается достаточное число раз дифференцируемой, то они образуют однопараметрическую группу.

Если преобразования (1.2.1) образуют группу и свойство (1.2.2) имеет вид $T_b T_a = T_{a+b}$, или $f(f(z,a), b) = f(z, a+b)$ (1.2.3.), то по теореме Ли функция $f(z,a)$ полностью однозначно определяется двумя членами разложения в ряд Тейлора по параметру a в окрестности $a=0$, то есть

$$z' = z + \zeta(z)a + o(a), \quad (1.2.4)$$

где $\zeta(z) = \left. \frac{\partial f(za)}{\partial a} \right|_{a=0}$.

Доказано, что если функция $f(z, a)$ удовлетворяет групповому свойству (1.2.3.) и имеет разложение (1.2.4), то она является решением обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка (уравнения Ли) с начальным условием:

$$\frac{df}{da} = \zeta(f), \quad f|_{a=0} = z$$

Функция $F(z)$ называется инвариантом группы преобразований (1.2.4), если для всех допустимых z, a

$$F(f(z, a)) = F(z).$$

Доказано, что функция $F(z)$ является инвариантом тогда и только тогда, когда она удовлетворяет уравнению

$$\zeta^i(z) \frac{\partial F(z)}{\partial z^i} = 0 \quad (1.2.5)$$

Если ввести в рассмотрение дифференциальный оператор

$$X = \zeta^i(z) \frac{\partial}{\partial z^i},$$

то критерий инвариантности (1.2.5) запишется в виде $XF = 0$.

Оператор X называется инфинитезимальным оператором группы преобразований (1.2.4) (Ибрагимов, 1983).

В настоящее время многие исследователи считают, что симметрия и теория групп являются тем мощнейшим инструментом, который позволит изучить глубинные основы как живой, так и неживой природы (Розен, 1969; Урманцев, 1974; Derome, 1977; Петухов, 1981).

Таким образом, основной вопрос заключается в выборе подходящей феноменологической модели для исследования взаимосвязи структуры и функции систем, возникших эволюционным путем.

1.3 Сети как способ описания сложных систем.

Любая функция биологической системы реализуется какой-либо материальной структурой. Что же понимать под структурой в контексте функционирования? В терминах функциональных отношений выявлению механизма соответствует разложение (декомпозиция) исходной функции $F(x)$ на более простые, базовые функции, обозначим их как $\{g_i\}$. Например, все многообразие биохимических реакций можно описать суперпозицией 26 базовых химических реакций (Мецлер, 1980а), а сложная обработка сигналов в нервной системе животных обеспечивается ансамблями нейронов с ограниченным набором типов функционирования. Декомпозицию, в общем виде, можно записать:

$$Y = F(x) \Rightarrow Y = g_i(\{\alpha_{ij}g_j(\alpha_{jk}g_k(\{\dots x\}))\}, \dots, \alpha_{ik}g_k(\{\dots\})) \quad (1.3.1)$$

За элементы системы принимается некоторый набор подсистем $\{S_i\}$, реализующих базовые функции $\{g_i\}$. Коэффициенты связи $\{\alpha_{ij}\}$ описывают взаимодействие (отношения) между элементами структуры. Следовательно, когда определены базовые функции $\{g_i\}$ и реализующие их подсистемы $\{S_i\}$, то структура биологической системы задается набором $\{S_i\}$ и множеством коэффициентов связи $\{\alpha_{ij}\}$. Базовые функции могут включать в себя операции интегрирования, дифференцирования или временной задержки. В этом случае в модельной системе возникают внутренние переменные, что позволяет описывать биологические системы, для которых свойственно реагирование на временные паттерны.

В последнее время в передовых научных журналах (Nature, Science, PNAS) публикуется большое количество работ, в которых развивается подход к исследованию сложных систем, основанный на представлении этих систем в виде сетей. Проводиться сравнительный топологический анализ свойств сетей различной природы: метаболических путей, белок-белковых взаимодействий, пищевых цепей экосистем, энергетических систем, Интернета и др. (Strogatz, 2001; Sanjay, Sandeep, 2001; Jeong *et.al.*, 2001; Albert *et.al.*, 2001; Amaral *et all*, 2000; Barbasi, 1999). Обнаружен ряд свойств, общих для этих сетей, что говорит

о потенциально широкой применимости сетевой модели, включая моделирование структурно-функциональных отношений.

Действительно, при изучении реальной системы ее описание всегда останавливается на некотором уровне детализации, когда за элементы системы принимается некоторый набор подсистем сходного уровня сложности (Мармарелис и Мармарелис, 1981). Следовательно, если определены подсистемы, то структура биологической системы может быть задана множеством коэффициентов связи между этими подсистемами. Коэффициенты связи описывают взаимодействие между элементами структуры. Компактной формой записи набора коэффициентов связи является матрица. В этом случае степень сходства структур можно оценивать через сходство описывающих их матриц.

Важно подчеркнуть, что процедура декомпозиции соответствует сетевому описанию. Действительно, сеть характеризуется набором узлов и коэффициентами связи между узлами, которые характеризуют силу влияния одного узла на другой. Таким образом, в сетевом описании $\{S_i\}$ - это узлы сети, а $\{\alpha_{ij}\}$ - это коэффициенты связи между узлами. Сетевое описание очень широко используется, в частности, в различных областях биологии. На рис.1.3.1 приведена схема биотического круговорота через основные звенья упрощенной экосистемы (Печуркин, 1988).

Эта схема соответствует сетевому описанию. Звенья экосистемы соответствуют узлам сети, а стрелки указывают влияние звеньев друг на друга. Подобные схемы в биологии встречаются очень часто, например, схема путей развития эритроцитов и лимфоцитов из стволовых клеток крови, схема действия стероидных гормонов (Газарян, Белоусов, 1983).

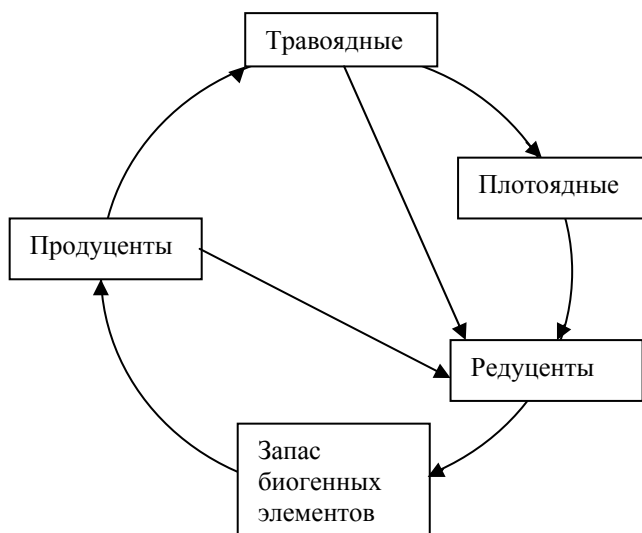


Рис.1.2.1 Схема биотического круговорота через основные звенья упрощенной экосистемы.

Часто изучение сложных экосистем основывается на классической модели Лоттка-Вольтерра:

$$\frac{dN_i}{dt} = N_i \left(e_i - \sum_{j=1}^s \alpha_{ij} N_j(t) \right), \quad (1.3.2)$$

где $\{N_i\}$; ($i=1, \dots, s$) численность каждого вида, e_i - коэффициент размножения, α_{ij} - константы, отражающие влияние видов друг на друга. Соле с соавторами (Sole *et.all.*, 1999) использует эту модель для случая большого числа видов, подчеркивая ее сетевой характер.

Математически сетевое описание всегда предполагает наличие в уравнении члена, описывающего влияние узлов друг на друга. Такие члены встречаются во многих математических моделях, хотя в них не всегда явно говорится о сетевом описании. Например, в настоящее время считается, что химическая формула соединения в принципе содержит всю информацию о любых его свойствах, но для этого необходимо установить корреляционное соотношение структура-свойство. При установлении этого соотношения для какого-либо свойства P , записывается соотношение

$$P = \sum P_{ii} + \sum \sum P_{ij}, \quad (1.3.3)$$

где P_{ii} - однофрагментный вклад, соответствующий i -му фрагменту молекулы, P_{ij} - двухфрагментный вклад, отвечающий поправке на взаимодействие i -го и j -го фрагментов. (Голованов и др., 1998). Поскольку есть фрагменты - узлы и их взаимодействия, то это представление тоже соответствует сетевому описанию.

В литературе представлена интересная попытка разделения формальным образом структуры и функции сетей обработки информации. В полученном математическом выражении разделены роли, которые играют структура сети, данная через свои связи, и ее функция, представленная набором операторов, связанных с элементами. (Von Foerster *et al*, 1968). Это исходно перспективное направление исследований применимо в полной мере к сетям с линейными операторами и для некоторых частных видов так называемых неоднородных операторов. К сожалению, этот подход практически неприменим к сетям общего вида.

Таким образом, достаточно универсальным описанием биологических систем является сетевое описание, однако поскольку нас интересует структурно-функциональные отношения систем, возникших эволюционным путем, то необходима модель, которая формирует структуру для выполнения данной функции в процессе, в определенном смысле, похожем на эволюционный процесс.

Анализ существующих формальных моделей показывает, что наиболее адекватными для целей данного исследования являются сети из формальных нейронов, так называемые нейросети.

1.4 Нейронные сети.

Развитие теории и практики нейронных сетей дает в руки исследователей инструмент моделирования с богатыми возможностями (Hopfield, 1982; Rumelhart, Hinton, Williams, 1986; Kohonen, 1982; Grossberg, 1988). Показано, что нейронные сети могут обеспечить сколь угодно точное приближение любой непрерывной функции многих переменных (Горбань, 1998). Причем

конкретный вид переходной характеристики нейрона не имеет существенного значения, необходимое условие - она должна быть нелинейной.

Нейронные сети - это сети, состоящие из связанных между собой простых элементов - формальных нейронов. Схема формального нейрона представлена на рис.1.4.1 (Горбань, 1998).

Адаптивный сумматор вычисляет скалярное произведение вектора входного сигнала x на вектор параметров α . Нелинейный преобразователь сигнала получает скалярный входной сигнал x и переводит его в $f(x)$. Точка ветвления получает скалярный входной сигнал x и передает его всем своим выходам. Линейная связь - синапс отдельно от сумматоров не встречается, но часто бывает удобно выделить этот элемент. Он умножает входной сигнал x на "вес синапса" α .

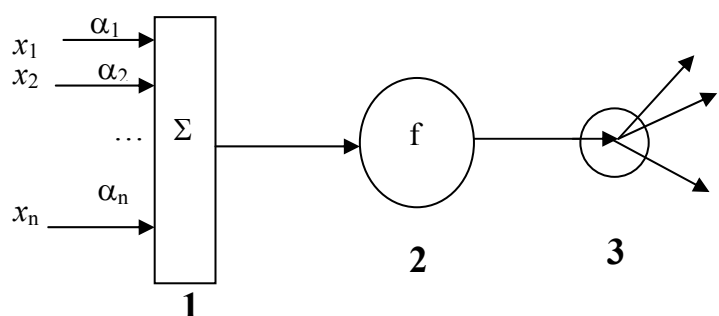


Рис.1.4.1 Схема формального нейрона 1 - адаптивный сумматор, 2 - нелинейный преобразователь (переходная характеристика нейрона), 3- точка ветвления.

Выделяют две базовые архитектуры нейронных сетей - слоистые и полносвязные.

Слоистые сети - это сети, в которых нейроны расположены в несколько слоев. Нейроны первого слоя получают входные сигналы, преобразуют их и через точки ветвления передают нейронам второго слоя. Затем срабатывает второй слой и так далее.

Полносвязные сети - это сети, в которых каждый нейрон передает свой выходной сигнал всем остальным нейронам, включая самого себя. Если

функция активации нейронов f одна и та же для всех нейронов, то сеть называется однородной. Если полносвязная сеть функционирует до получения ответа заданное число тактов k , то ее можно представить как частный случай k -слойной сети, все слои которой одинаковы и каждый из них соответствует такту функционирования полносвязной сети. Существенное различие между этими архитектурами возникает тогда, когда число тактов функционирования заранее не ограничено.

На рисунке 1.4.2 в качестве примера приведена схема полносвязной нейросети из трех нейронов.

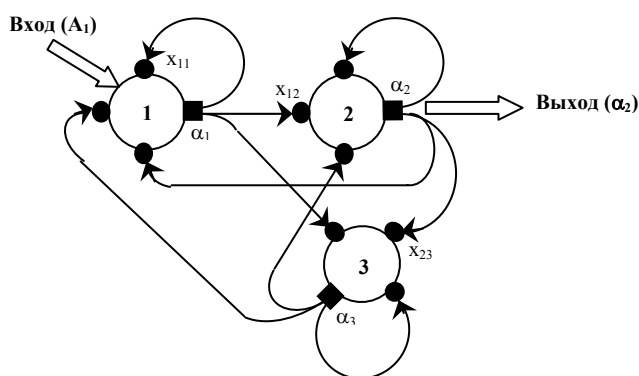


Рис.1.4.2 – входной нейрон; 2 – выходной нейрон; 3 – ассоциативный нейрон, который не связан непосредственно с входом и выходом.

Функционирование нейросети полностью определяется матрицей коэффициентов связи и ею же полностью описывается ее структура. На рис.1.4.2 для простоты буквами x с индексами обозначены только некоторые весовые коэффициенты. Элемент матрицы, стоящий в i -ой строке и j -ом столбце показывает величину и характер влияния на i -й нейрон j -го нейрона. Функционирование нейросети описывается выражениями:

$$\alpha_i^{n+1} = f(\rho_i^n), \quad \rho_i^n = \sum_j x_{ij} \alpha_j^n + A_i^n \quad (1.4.1)$$

где x_{ij} - матрица весовых коэффициентов, A_i^n - входные сигналы, α_i^n – выходной сигнал i -го нейрона в n -ый момент времени.

Довольно часто используется переходная характеристика $f(\rho_i^n)$ вида:

$$f(\rho_i^n) = \frac{\rho_i^n}{a + |\rho_i^n|}, \quad (1.4.2)$$

где a – константа, определяющая крутизну переходной характеристики нейрона.

Качество функционирования нейросети может оцениваться, например, по формуле:

$$H(\alpha_{out}^n, \delta_{out}^n) = \frac{1}{2} \sum_{out} (\alpha_{out}^n - \delta_{out}^n)^2 \quad (1.4.3)$$

где α_{out}^n - сигнал на выходных нейронах в момент времени n , δ_{out}^n - требуемый от сети в момент времени n сигнал.

Идея о потенциальной возможности сопоставления нейросетей с природными объектами (Stubbs, 1991) опирается на то, что нейросети представляют собой системы кооперативно взаимодействующих простых элементов, и это взаимодействие порождает новые свойства, которыми отдельный элемент не обладает, что характерно для любой системы.

К тому же в литературе отмечается невозпроизводимость экспериментальных данных, полученных на нейросетях (Partridge, Yates, 1996). Аналогичная ситуация наблюдается и в реальных биологических системах. То есть структуры нейросетей, обученные выполнению одной и той же функции, различны подобно тому, как различны структуры биосистем, выполняющих одну и ту же функцию.

Еще раз подчеркнем, что достоинством нейросетей как феноменологических моделей является то, что нейросети, с одной стороны, могут обеспечить нетривиальное поведение (функцию), а с другой стороны, их структура является полностью прозрачной для исследователя, что практически никогда не достижимо при работе с реальными биологическими системами. Поскольку данная работа направлена на исследование свойств структурно-функционального соответствия эволюционирующих систем, то процесс

обучения нейросетей и его сопоставление с процессом эволюции требует отдельного рассмотрения.

1.5. Эволюционный процесс как поиск экстремума функции приспособленности.

Под эволюционным процессом будет пониматься изменение структуры биологической системы в соответствии с некоторым функциональным критерием оптимальности (Эйген 1973, Forst *et al.*, 1995; Schuster, 1996). По современным представлениям в основе эволюции лежат микромутационные процессы и процесс эволюции можно рассматривать как плавное движение по ландшафту целевой функции приспособленности (Niklas, 1994, Huynen *et al.*, 1996; Schuster, 1996).

В общем случае процесс эволюции можно рассматривать как поиск экстремума целевой функции. В самом общем виде функционирующая система может быть описана системой из N уравнений (для простоты время здесь не учитывается, но это не меняет сути изложенного):

$$\Phi_i(\alpha_j, A_k, \beta_m) = 0 \quad (1.5.1)$$

где α_j - переменные, описывающие состояние системы и ее реакцию на внешние воздействия A_k ; β_m - параметры структуры, определяющие функционирование системы.

При заданных внешних воздействиях A_k и параметрах структуры β_m состояние биосистемы и ее реакция определяются однозначно. В процессе эволюции отбираются системы с такими значениями параметров структуры, которые уменьшают значение целевой функции приспособленности $H(\alpha_j)$. При этом непосредственному переходу к идеальной приспособленности (равенству 0 целевой функции) препятствуют ограничения, свойственные любой материальной системе. Эти ограничения выражены через уравнения (1.5.1). К этим ограничениям нужно добавить ограничения, вытекающие из природы параметров структуры β_m (например, любой реальный параметр ограничен по

величине). Задача поиска экстремума при наличии ограничений может быть решена с помощью метода множителей Лагранжа (μ_i) через введение производящей функции:

$$W = H(\alpha_j) + \sum_i \mu_i \Phi_i(\alpha_j, A_k, \beta_m). \quad (1.5.2)$$

Процессы эволюции и адаптации могут быть описаны как поиск экстремума функции (1.5.2). В качестве уравнений связи Φ_i могут использоваться алгебраические, разностные и дифференциальные уравнения, что показано, в ряде публикаций (Барцев, Охонин, 1986; Барцев, Гилев, Охонин, 1989). Если целевая функция приспособленности какой-либо функционирующей системы выражена явно, то из формулы (1.5.2) выводится супервизорный алгоритм адаптации ее структуры (Барцев, Гилев, Охонин, 1989), известный в нейросетевых приложениях как Back-Propagation, но применимый к любым системам с формальным описанием поведения (функции).

Аргументом в пользу феноменологической эквивалентности систем, описываемых формулой (1.5.2), служит теорема о «бесплатных завтраках» (No Free Lunch - NFL) (Wolpert, Macready, 1995). Согласно этой теореме эффективности любых двух алгоритмов поиска экстремума в среднем (по всем возможным целевым функциям) идентичны. Из этой теоремы следует, что существование живых существ, ни в каком смысле не является индикатором эффективности естественного отбора. Это, в свою очередь, означает, что любая система, меняющая свою структуру в соответствии с некоторым принципом оптимальности, может служить моделью биологической эволюции (Печуркин 1982, Theodoridis 1996; Reidys, Stadler, 2001).

Аргументом в пользу большой значимости аналогий и феноменологических моделей является общая теория систем в том виде, как она развивается Урманцевым (Урманцев, 1968, 1974, 1978). Согласно этой теории, каждый объект живой и неживой природы входит в какие-то множества. В каждом из таких множеств есть определенное число элементов, подчиняющихся определенным законам композиции. Даже из этого факта следует, что любой

объект одного множества должен в каком-то отношении соответствовать тому или иному объекту другого множества.

Проведенный анализ литературы позволяет сформулировать **цель работы**: на примере простых эволюционно возникших систем, в роли которых выступают нейронные сети, оценить сходство структур, выполняющих одинаковые и разные функции.

Для этого требуется решить следующие задачи:

1. Разработать пакет программ для генерации и исследования нейросетевых моделей в контексте эволюции их структуры и функции.
2. Провести вычислительные эксперименты с ансамблями нейронных сетей, для получения достаточного для статистической обработки количества данных.
3. Провести сравнительный анализ нейросетей, выполняющих одну и ту же и различные функции при помощи различных статистических и теоретических инструментов.
4. Оценить применимость выводов, полученных на нейросетевых моделях, к реальным биологическим системам.

ГЛАВА 2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ.

2.1. Алгоритмическое обеспечение генерации нейросетевых модельных объектов с заданной функцией.

Поскольку целью работы является оценка сходства структур нейросетей, выполняющих одинаковые и разные функции, для достижения этой цели необходимо решить следующие задачи:

1. Разработать пакет программ для генерации и исследования нейросетевых моделей.

2. Провести вычислительные эксперименты с нейросетевыми моделями, которые включают следующие этапы:

- создание набора "родительских" (не выполняющих никакой функции и играющих роль начальных состояний) нейросетей с некоррелирующими матрицами весовых коэффициентов;
- при помощи обучения "родительских" нейросетей создать набор экземпляров нейросетей, выполняющих предельно простые функции, причем, отдельный экземпляр обученной нейросети будем называть нейросетевым модельным объектом (НМО).
- для выявления общих свойств и получения материала для сравнительного анализа создать нейросети с различным числом нейронов, использовать различные алгоритмы обучения и различные переходные характеристики нейронов.
- при помощи различных статистических и теоретических инструментов провести сравнительный анализ структур нейросетей, выполняющих одну и ту же, и различные функции.

В качестве нейросетевых модельных объектов (НМО) использовались полносвязанные (каждый нейрон связан с каждым) нейросети, работающие в дискретном времени в режиме непрерывного функционирования, когда после

генерации выходных сигналов сеть не приводится в неактивное состояние, а продолжает функционировать с учетом вновь поступающей информации. (Барцев, Охонин, 1992).

Использование нейросетей в данном исследовании опирается на аналогию процессов формирования (обучения) нейросетей и процессов эволюционного развития реальных биологических систем, которая заключается в следующем: 1) эволюция организмов и формирование нейросетей в процессе обучения происходят в соответствии с критерием оптимальности, который для организмов задается естественным отбором, а для нейросетей алгоритмом обучения; 2) эволюция живых систем и формирование нейросетей данного типа происходит через малые изменения (мутации) элементов структуры; 3) биологические структуры подвергаются отбору, находясь в потоке событий, имеющем, как регулярную, так и стохастическую компоненту, что также воспроизведено в процессе формирования нейросетей.

В работе использовались два вида переходной характеристики $f(\rho_i^n)$:

$$f(\rho_i^n) = \frac{\rho_i^n}{a + |\rho_i^n|}, \quad (2.1.1)$$

$$f(\rho_i^n) = \sin(a \cdot \rho_i^n), \quad (2.1.2)$$

где a – константа, определяющая крутизну переходной характеристики нейрона (2.1.1) или ее частоту (2.1.2). Различные переходные характеристики позволяют рассматривать системы, имеющие различную "элементную базу". Конкретный вид переходной характеристики не имеет существенного значения. Основное требование, которое к ней предъявляется - нелинейность (Горбань, 1998).

В работе нейросети обучались абстрактным функциям. Эти простейшие функции заключаются в том, что нейросеть должна реагировать только на определенный вид сигнала из непрерывного квазислучайного входного потока различных сигналов.

Принципиально важным является не то, имеют или не имеют выбранные функции аналоги в реальных системах, а то, что это предельно простые

функции, дающие надежду на проведение хоть какого-то формального анализа. В конечном счете, все теоретические модели представляют собой набор математических соотношений, которые принципиально не отличаются от абстрактных функций, выполнению которых обучались нейросети. Можно было бы моделировать процесс распознавания ферментом реального субстрата, подавая на вход нейросети, например, формальное описание конфигурации электронных оболочек субстрата, а на выходе требовать реакции, соответствующей конформационным перестройкам в активном центре фермента (как ее представляет исследователь). Нет принципиальных, а во многих случаях и технических запретов на моделирование с помощью нейросетей сложных функций, осуществляемых реальными системами. Но из дальнейшего изложения будет видно, что при подходе к моделированию, предполагающем обязательную имитацию какой-либо реальной функции, поставленная в работе цель (оценка сходства структур, выполняющих одинаковые и различные функции) была бы практически недостижима.

Для выбранных в работе предельно простых функций требуется два входных нейрона, для которых входные сигналы A_i^n не равны нулю. Два других нейрона являются выходными, с них снимался сигнал, т.е. α^n этих нейронов считаются выходом сети в целом. Остальные нейроны являются внутренними и играют роль ассоциативных элементов.

Качество функционирования нейросети оценивалось по формуле:

$$H(\alpha_{out}^n, \delta_{out}^n) = \frac{1}{2} \sum_{out} (\alpha_{out}^n - \delta_{out}^n)^2 \quad (2.1.3)$$

где α_{out}^n - сигнал на выходных нейронах в момент времени n , δ_{out}^n - требуемый от сети в момент времени n сигнал. Все НМО обучались до состояния, когда значения целевой функции (2.1.3) были приблизительно равны для нейросетей одинакового объема и максимально близки к нулю.

Для обучения нейросетей использовались два алгоритма. Использование различных алгоритмов позволяет оценить влияние вида алгоритма обучения на структуры нейросетей, выполняющих одну и ту же функцию. Один из них это

Алгоритм Двойственного Функционирования (АДФ) (Bartsev, Okhonin, 1991; Барцев, Охонин, 1992). Процедура обучения, выведенная с помощью этого алгоритма, в литературе приводится для переходной характеристики, заданной соотношением 2.1.1. Для переходной характеристики, заданной соотношением 2.1.2 с помощью АДФ выведем уравнение, описывающее процесс обучения.

Имеем:

$$\rho_i^k = \sum_j X_{ij} \alpha_j^k + A_i^k \quad \alpha_i^{k+1} = \sin(a \rho_i^k) \quad \text{или} \\ \psi_i^k = \alpha_i^{k+1} - \sin(a \rho_i^k) = 0, \quad (2.1.4),$$

где X_{ij} - элементы матрицы весовых коэффициентов, A_i^k - входные сигналы, α_i^k - выходной сигнал i -го нейрона в k -ый момент времени, причем $0 \leq k \leq p$ ($i=1,2,\dots,n$), a - параметр, характеризующий частоту переходной характеристики.

В соответствии с АДФ запишем функцию Лагранжа:

$$W = H(\alpha_i^k) + \sum_{k=0}^p \sum_i \mu_i^k \psi_i^k, \quad (2.1.5)$$

где функционирование начинается при $k=0$ и заканчивается при $k=p$.

Дифференцируя, (2.1.5) получаем:

$$\frac{\partial W}{\partial \alpha_j^k} = \frac{\partial H}{\partial \alpha_j^k} + \mu_j^{k-1} - \sum_i \mu_i^k \cos(a \rho_i^k) a X_{ij},$$

$$\text{Обозначим} \quad \Delta_i^k = \mu_i^k a \cos(a \rho_i^k), \quad (2.1.6)$$

тогда имеем

$$\frac{\partial H}{\partial \alpha_j^k} + \mu_j^{k-1} - \sum_i \Delta_i^k X_{ij} = 0, \quad (2.1.7)$$

тогда

$$\mu_j^{k-1} = \sum_i \Delta_i^k X_{ij} - \frac{\partial H}{\partial \alpha_j^k},$$

получаем требуемую формулу

$$\Delta_i^{k-1} = \left(\sum_i \Delta_i^k X_{ij} - \frac{\partial H}{\partial \alpha_j^k} \right) a \cos(a \rho_i^{k-1}) \quad (2.1.8).$$

Правило модификации весов связей имеет следующий вид:

$$X_{ij}^{m+1} = X_{ij}^m + \frac{dX_{ij}^m}{dt} \Delta t, \quad (2.1.9)$$

$$\frac{dX_{ij}^m}{dt} = - \left(\sum_k \Delta_i^k \alpha_j^k \right)_m, \quad (2.1.10)$$

где Δt - шаг приращения весов связей; m - дискретные моменты времени, в которые происходит модификация весов связей.

Формула (2.1.8) описывает алгоритм двойственного функционирования для случая, когда переходная характеристика имеет синусоидальный вид.

Второй алгоритм, используемый в работе, - алгоритм случайного поиска, который подобен случайным аминокислотным заменам в молекуле белка с последующим отбором наиболее эффективного варианта. В соответствии с этим алгоритмом случайно выбранному весовому коэффициенту дается небольшое по величине случайное приращение. Запоминаются только те изменения, которые улучшают функционирование.

Практически это осуществляется следующим образом: генерируется три одинаковых нейросети, две из них получают одинаковые по величине, но противоположные по знаку приращения на один и тот же синапс. Величина приращения и синапс, на который подается это приращение, выбираются случайным образом. Осуществляется 100 циклов функционирования и выбирается нейросеть с лучшим качеством функционирования, то есть с минимальным рассогласованием между требуемым и актуальным выходным сигналом. Эта нейросеть остается, а две другие уничтожаются. Затем с этой нейросети делается две копии и повторяется описанная выше процедура. Описанная схема повторяется до тех пор, пока качество функционирования не достигнет заданного значения.

На вход нейросети, как в процессе обучения, так и в процессе функционирования, подавалась непрерывная, квазислучайная

последовательность, состоящая из сигналов: “пауза” - (00), А - (10), В - (01) и С - (11), где числа в скобках обозначают наличие - (1), или отсутствие - (0) сигнала на соответствующих входных нейронах. Случайными параметрами последовательности были: вид сигнала в данный момент времени и длительность паузы между сигналами. Согласно обучающему паттерну нейросеть должна выдавать на выходе единичный сигнал, если на вход поступает "правильный" сигнал, и выдавать на выходе ноль при поступлении любого другого сигнала. В этом заключались функции НМО.

Функции могут различаться количеством тактов времени, предоставляемых нейросети для обработки входного сигнала (3 или 4). Поэтому функции нейросети обозначались следующим образом: А3, А4, С3, С4. Тогда, например, реализация нейросетью функции А3 означает, что нейросеть реагирует только на сигнал вида (10), выдавая через три такта единицу на выходных нейронах, и "молчит" во всех остальных случаях. Условное изображение типичных входных последовательностей сигналов и требуемых ответов нейросетей с функциями А3 и С4 приведено на Рис.2.1.2.

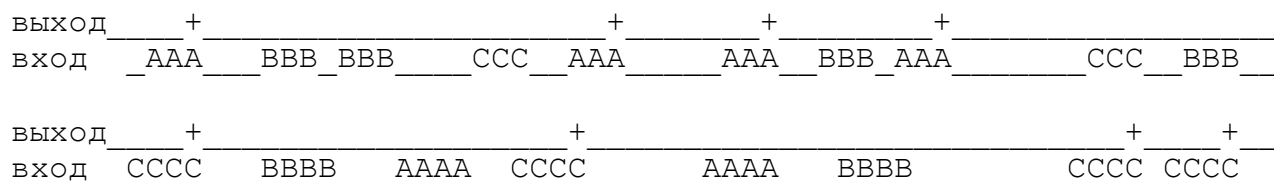


Рис.2.1.1. Фрагменты входной и выходной последовательностей для функций А3 и С4. Знак "+" в выходной последовательности обозначает "правильное" срабатывание НМО.

Несмотря на простоту, подобные последовательности подходят для имитации широкого класса процессов в биологических системах. Например, реальным аналогом такого функционирования может служить процесс ферментативного катализа. В растворе, в случайные моменты времени активный центр фермента вступает во взаимодействие с различными молекулами, присутствующими в растворе. Благодаря своей специфичности, фермент реагирует только на определенные молекулы – молекулы субстрата.

Функционирование фермента включает стадии распознавания конкретного субстрата и преобразования (отображения) его в продукт. Аналогом другого рода является реагирование организма на определенный фактор среды, или реакция экосистемы на внешние воздействия – поток биогенов, дожди, освещенность и т.п.

Поскольку, как уже отмечалось, предпочтительно работать с предельно простыми НМО, то необходимо определить минимальное число нейронов, при котором нейросеть способна качественно выполнять указанные функции.

Для обучения поставленным задачам необходимо два входных и два выходных нейрона, поэтому минимальный объем нейросетей, которые могли использоваться в работе, равен четырем. Однако, как показали вычислительные эксперименты, минимальное число нейронов, обеспечивающее качественное выполнение данных функций равно 6. На рис.2.1.2 и 2.1.3 представлены результаты, показывающие качество функционирования обученных выполнению указанных задач нейросетей в зависимости от числа нейронов.

Как следует из этих рисунков, для качественного выполнения соответствующих функций требуются нейросети с числом нейронов не менее 6. Пятинейронные сети способны обучаться выполнению соответствующих функций, но с довольно низким качеством.

Исходя из этого, в данной работе использовались нейросети с числом нейронов 5-8 и 10.

Начальные веса связей нейросетей задавались генератором квазислучайных чисел. Численные значения весов связей были равномерно распределены в интервале ± 0.025 .

Матрицы весов связей “родительских”, не обученных выполнению никакой функции, НМО не коррелировали друг с другом.

Поскольку нейросеть не в состоянии выдавать точные значения 0 и 1, то выбираются интервалы при попадании выходных значений в которые ответ принимается либо за нулевой, (область а на рис. 2.1.4), либо за единицу, (область б на рис. 2.1.4). Кроме того, между этими интервалами существует

"запрещенная зона" ($\Delta\dot{w}$ на рис.2.1.4), если ответ нейросети попадает в эту область, то считается ошибочным.

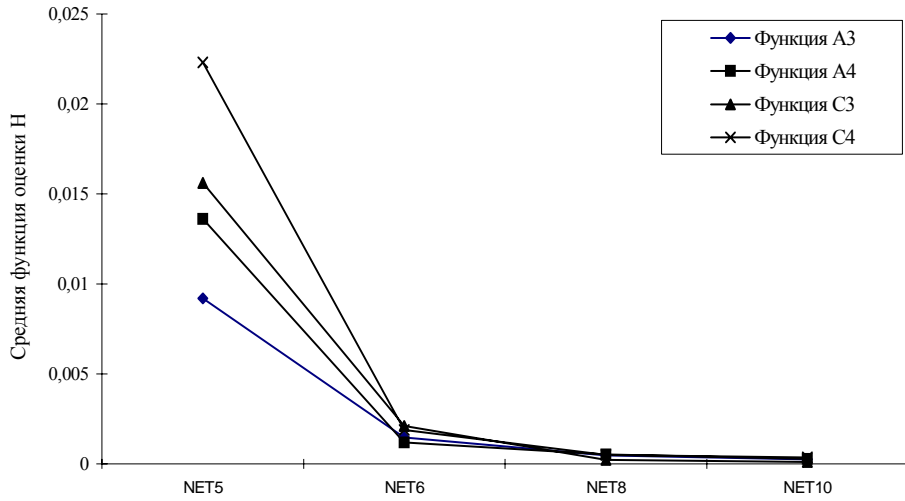


Рис.2.1.2 Зависимость качества функционирования от числа нейронов для сигмоидальной переходной характеристики (алгоритм АДФ).

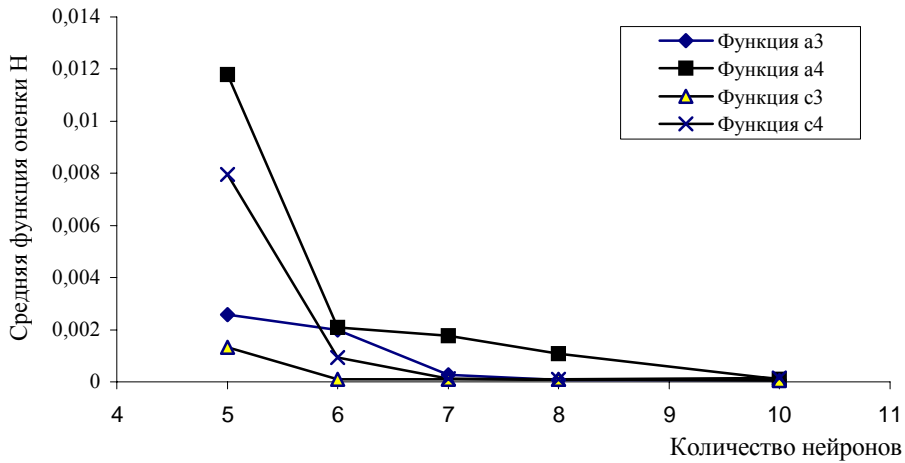


Рис.2.1.3 Зависимость качества функционирования от числа нейронов для синусоидальной переходной характеристики (алгоритм АДФ).

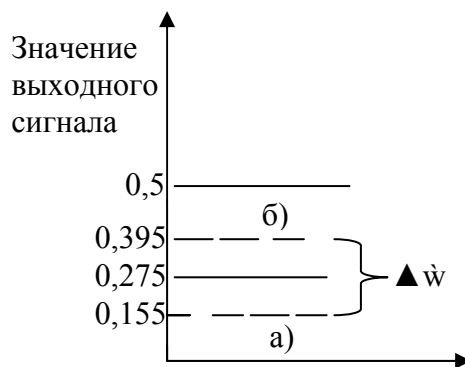


Рис.2.1.4 Интервалы значений выходного сигнала нейросети.

Границы указанных интервалов выбирались следующим образом: 6 нейронные НМО, обученные до заданного уровня значения целевой функции, запускались на функционирование; для каждой нейросети измерялись нижний и верхний уровни сигналов и среднеквадратичные отклонения этих сигналов по ансамблю имеющихся НМО; за ширину интервала принималось среднее арифметическое $\pm 3\sigma$. Такой выбор интервала сигналов обеспечивал устойчивое функционирование 6 нейронных НМО и, тем более, НМО с большим количеством нейронов.

2.2 Стандартные методы оценки сходства структур НМО.

Для начального сравнения структур НМО использовались традиционные статистические методы: корреляционный анализ и сравнение распределений весовых коэффициентов НМО с различными функциями по критерию χ^2 (Худсон, 1967; Глотов и др., 1982; Лакин, 1980; Хан, Шапиро, 1975, Мандель 1988).

Поскольку структура НМО задается матрицей весовых коэффициентов, то использовались так же числа, характеризующие матрицу: собственные значения, следы и детерминанты (Хорн, Джонсон, 1989).

В физике, биофизике и ряде других областей для описания систем используется фазовое пространство, когда каждой существенной переменной

системы ставится в соответствие одна из координат фазового пространства. Тогда состояние системы можно представить положением точки в фазовом пространстве. В качестве существенных переменных, описывающих НМО, можно взять весовые коэффициенты, следовательно, размерность фазового пространства, которое в данном случае следует назвать параметрическим, будет соответствовать числу весовых коэффициентов и, например, для 6-нейронной сети их будет 36. Тогда структуре НМО будет соответствовать точка в пространстве параметров, а процесс обучения НМО, имитирующий эволюционный процесс, будет отображаться движением этой точки в этом пространстве.

В то же время, возможные траектории обучения (эволюционные траектории) задаются ландшафтом функции приспособленности (2.1.3), вложенном в пространство параметров структуры. Структуры НМО, полученные в результате обучения, располагаются в точках пространства параметров, соответствующих минимальным значениям целевой функции (или точкам с максимальной приспособленностью). Следовательно, введя метрику в это пространство, можно оценивать степень сходства между структурами НМО по расстоянию между точками, соответствующими этим структурам. Поскольку, какие-либо ограничения или предпочтения отсутствовали, то в данной работе сходство между структурами НМО оценивалось с помощью обычного евклидова расстояния, которое вычислялось по формуле:

$$D = \sqrt{\frac{\sum_i (x_{ij} - y_{ij})^2}{n^2}},$$

где x_{ij} и y_{ij} - соответствующие веса связей сравниваемых матриц, n - число нейронов.

2.3 Методы поиска локальной и дискретной симметрий.

Поскольку целью работы являлся поиск закономерностей, связывающих структуры с выполняемой ими функцией, то есть поиск функциональных инвариантов, то необходимы были методы нахождения локальной и дискретной

симметрии.

Поиск локальной симметрии осуществлялся через определение вида инфинитезимального оператора и инварианта группы преобразований в соответствии с описанием, приведенном в обзоре литературы.

Помимо непрерывной симметрии, могут существовать дискретные симметрии, т.е. инварианты относительно дискретных преобразований. Следовательно, задача состоит в поиске инвариантов, соответствующих каким-то из этих симметрий. Еще раз подчеркнем, что найденные преобразования не должны нарушать функционирование НМО. То есть, в общем виде, задача заключается в поиске функциональных инвариантов структуры.

2.4. Контрастирование НМО.

Как отмечалось выше, минимальный объем нейросети, необходимый для качественного обучения выбранным в работе функциям, равен шести нейронам, то есть 36 весовым коэффициентам. Однако важен ответ на вопрос о нахождении минимальной структуры, необходимой не для обучения, а для качественного функционирования. Чтобы решить эту задачу, проводилась процедура контрастирования НМО (Горбань, 1990). Для этого из матрицы весовых коэффициентов НМО, обученного выполнению определенной функции, исключались наименее значимые весовые коэффициенты и нейросеть, полученная таким образом, доучивалась до исходного качества функционирования. Процесс контрастирования сходен с процессом избавления от лишних элементов структуры, например, редукцией органов движения, центральной нервной системы и т.д. у плоских и круглых паразитических червей.

2.5. Получение структур нейросетей, сформированных под действием "мутационного давления."

Для обеспечения достаточного разнообразия структур НМО некоторые НМО обучались при постоянных возмущениях весовых коэффициентов. В реальных биологических структурах этому соответствует внешнее мутационное

давление. Для моделирования такого давления использовалось несколько способов.

В первом случае при обучении НМО случайным образом выбирался нейрон и модифицировались значения всех синапсов этого нейрона на определенную долю от величины синапса. Причем, если значение синапса было по абсолютной величине меньше 0.7, то величина и знак изменения были случайными, если значение синапсов по абсолютной величине было больше 0.7, то величина синапсов уменьшалась на определенную постоянную долю их величины.

Во втором случае использовалось такое изменение, когда величина выбранного случайным образом синапса уменьшалась на определенную постоянную величину.

В третьем случае использовалось такое изменение, когда величина синапсов, выбранных случайным образом, уменьшается пропорционально их величине.

В четвертом случае случайным образом выбирается синапс и его значение изменяется на случайную величину, знак изменения тоже случаен. Нейросети, полученные в результате обучения под действием мутационного давления, осуществляемого описанными выше способами, назывались селективными.

2.6. Обозначения нейросетей, используемые в работе.

В дальнейшем исходные "родительские" нейросети называются INIT. Например, имя INIT61 означает, что это родительская 6-ти нейронная сеть под номером 1.

Нейросети, с сигмоидальной переходной характеристикой, обучавшиеся при помощи алгоритма двойственного функционирования, называются NET. Например, имя NET623, означает, что это третий экземпляр 6-ти нейронной сети, полученной из "родительской" нейросети под номером 2. Условия обучения следующие: доля положительных (тех, на который нейросеть должно

реагировать) сигналов в общем потоке - 0,5; доля тактов, приходящаяся на паузы - 0,5; шаг приращения синапсов при модификации - 0,001.

Для получения необходимого разнообразия НМО условия обучения варьировались. Менялись следующие параметры: доля сигнала, запускающего реакцию НМО, доля пауз, шаг изменения весов синапсов. В приложении в таблице П.1 приведены значения параметров, характеризующих условия обучения. Большая часть таблиц и рисунков вынесена в приложение для того, чтобы не загромождать основной текст. Таблицы и рисунки, помещенные в приложение, в тексте обозначены буквой П. и порядковым номером.

Нейросети, с сигмоидальной переходной характеристикой, обученные при помощи "мутационного" алгоритма называются R. Каждая "родительская" нейросеть обучалась при помощи этого алгоритма по три раза, поэтому имя R631, означает, что это 6-ти нейронная сеть, полученная при помощи обучения "мутационным" алгоритмом "родительской" нейросети под номером 3 в результате первого обучения.

Нейросети с синусоидальной переходной характеристикой называются Ns.

2.7. Описание программного пакета, используемого в работе.

Для обучения нейросетей использовались программы, написанные на языке Turbo Pascal 6.0. Подобных программ было три. В первой программе для обучения использовался алгоритм АДФ, и нейросети имели сигмоидальную переходную характеристику. Во второй программе использовала алгоритм АДФ и синусоидальная переходная характеристика. В третьей программе использовался "мутационный" алгоритм обучения и сигмоидальная переходная характеристика.

Все эти программы позволяли задавать следующие параметры НМО:

- число нейронов, т.е. выбрать число нейронов, которое будет содержать нейросеть, подлежащая обучению;

- вид сигнала, на который нейросеть должна реагировать, данный параметр позволяет задать вид сигнала (А, В, или С), на который нейросеть будет учиться реагировать;
- длительность сигналов в тактах позволяет выбрать число тактов (3 или 4), после которого нейросеть должна выдавать сигнал на выходных нейронах, вид сигнала и длительность сигналов в тактах задают функцию, которой обучаются нейросети;
- шаг приращения синапсов позволяет задать величину изменения синапсов нейросети, которая происходит в процессе обучения;
- доля сигнала, позволяет установить долю сигнала, на который нейросеть должна научиться реагировать, в общем потоке сигналов;
- доля паузы позволяет менять долю пауз в общем потоке сигналов. Эти параметры позволяют задавать и изменять условия обучения нейросетей.

После того как соответствующие параметры НМО выбраны, появлялось меню, содержащее следующие пункты:

Выполнить (повторить)
Инициализация нейросети
Запись карты весов
Просмотр карты весов
Изменение параметров
Функционирование
Выход

При выборе пункта "Инициализация нейросети" появлялось вложенное меню:

Начальные синапсы: R - случайные

F -из файла.

Нажатие клавиши "R" позволяет генерировать родительские нейросети, путем установления случайной величины весовых коэффициентов. Затем "родительская" нейросеть сохраняется, т.е. записывается в файл при выборе

пункта меню "Запись карты весов". Затем при выборе пункта меню "Выполнить (повторить)" нейросеть обучается выполнению соответствующей функции. При обучении на экране в рабочем окне отражались сигналы, подаваемые на вход нейросети и ответы, которые нейросеть выдает, т.е фактически то, что представлено на рисунке 2.1.1. При обучении вычисляется скользящее среднее, по пяти тактам обучения, значение целевой функции. Обучение заканчивается, если величина целевой функции меньше или равна 0.0005, при этом на экране отражается число шагов обучения, за которое достигнуто такое значение целевой функции. Программа останавливается и в том случае, если число тактов обучения равно 3000, но необходимое качество обучения не достигнуто. В этом случае можно повторно выбрать пункт "Выполнить (повторить)" и процесс обучения продолжится. Матрица весовых коэффициентов обученной нейросети так же записывается в файл при помощи пункта меню "Запись карты весов".

Пункт меню "Функционирование" позволяет проверить насколько устойчиво работает обученная нейросеть. В этом случае на вход нейросети подается непрерывная квазислучайная последовательность сигналов и нейросеть должна реагировать на выбранный сигнал, но процесс модификации синапсов отсутствует.

Пункт меню "Просмотр карты весов" позволяет посмотреть величины весовых коэффициентов соответствующей нейросети, что позволяет контролировать величину синапсов, которые по абсолютной величине не должны превышать 1.

Пункт "Изменение параметров" позволяет изменять шаг приращения синапсов, долю положительного сигнала и долю пауз в общем потоке сигналов. Если после выбора пункта меню "Инициализация нейросети", нажимается клавиша "F", то появляется каталог, в котором записаны как "родительские" так и обученные нейросети.

Для имитации "мутационного" давления в пункте меню "Изменение параметров" можно задать следующие параметры воздействия на НМО:

Длительность паузы между мутациями

Амплитуда мутаций

Это позволяет менять частоту воздействия, т.е. число тактов обучения, через которые будут проводиться воздействия и силу такого воздействия. Значения выбирались таким образом, чтобы частота и сила воздействия были максимальными, но процесс обучения был возможен.

Для вычисления евклидова расстояния в пространстве параметров нейросетей и поиска симметрий использовалась программа, рабочее окно которой представлено на рисунке 2.5.1. Программа написана в среде Delphi.

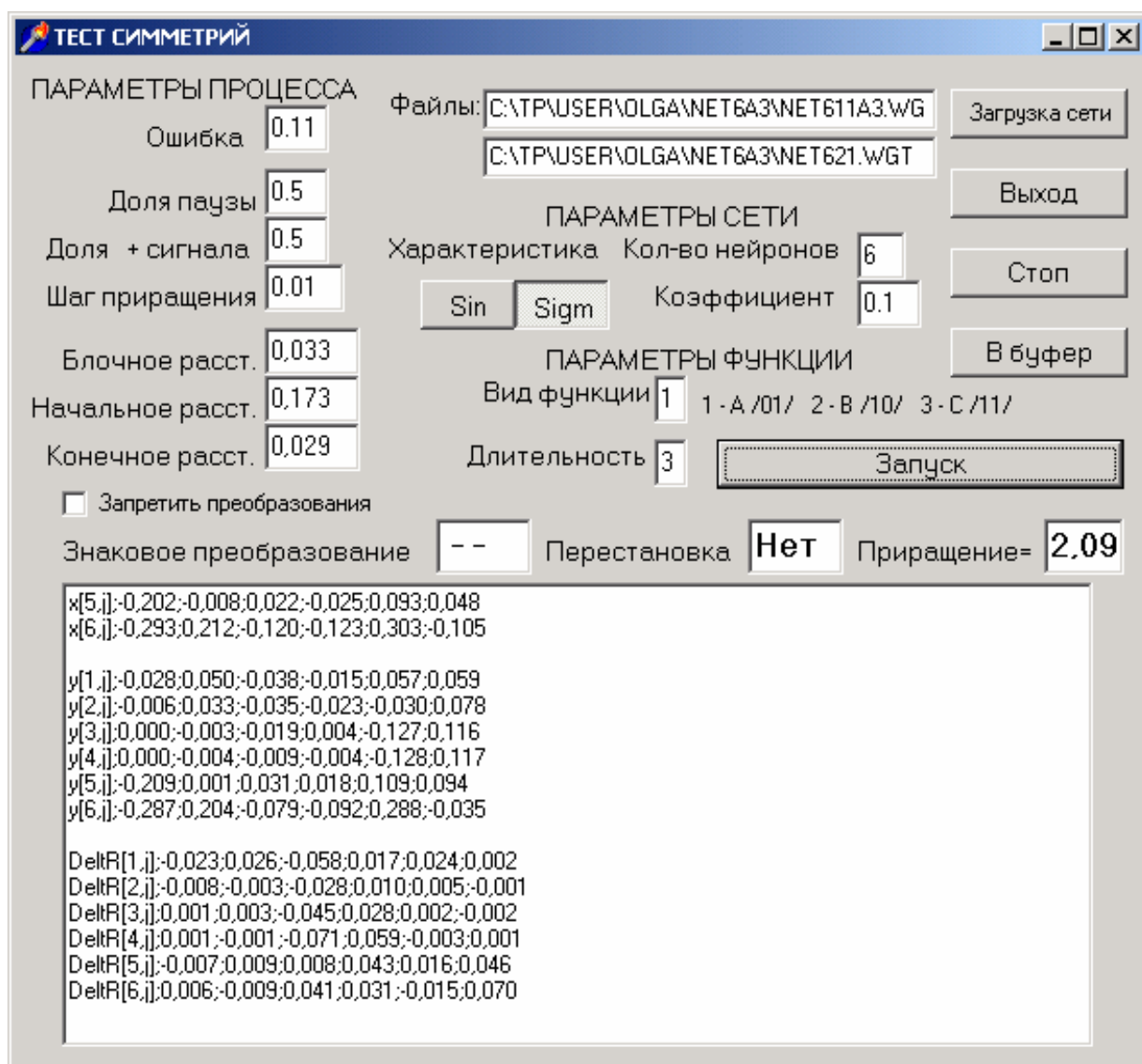


Рис.2.5.1. Рабочее окно программы для вычисления евклидова расстояния между нейросетями в пространстве параметров и выполнения дискретных и непрерывного преобразования.

Программа позволяет выбирать объем сравниваемых нейросетей, их переходную характеристику, вид функции, которым обучены нейросети. При загрузке НМО программа вычисляет начальное евклидово расстояние между нейросетями. Это значение отражается в окошке "Начальное расстояние". При нажатии клавиши "запуск" осуществляются дискретные преобразования. Путем простого перебора выбираются такие преобразования, которые минимизируют значение евклидова расстояния между НМО. Результат тех дискретных преобразований, которые дали минимальное значение евклидова расстояния, отражается в окошках "Знаковое преобразование" и "Перестановка". Первый знак в окошке "Знаковое преобразование" относится ко всем синапсам пятого нейрона, второй знак к синапсам шестого нейрона и т.д. Если стоит знак плюс, то это значит, что знаки не менялись. Если стоит минус, то у всех синапсов (кроме синапса, отражающего влияние самого на себя) соответствующего нейрона знаки изменились на противоположные. В окошке "Перестановка" появляется "да", если перестановка выполнялась и "нет" в противном случае.

Далее выполняется непрерывное преобразование параллельного переноса, и в окошке "приращение" отражалось значение λ , если $\lambda \geq 1$, то структура одной нейросети, переходит в структуру другой нейросети. В окошке "Ошибка" устанавливается допустимый уровень ошибочных ответов. Этот уровень выбирается минимально возможным для двух данных НМО.

Для получения НМО с минимальной структурой, т.е. для выполнения процедуры контрастирования, использовалась программа, написанная в среде Delphi, рабочее окно которой представлено на рисунке 2.5.2.

Как видно из рабочего окна, программа позволяет выбирать объем нейросети, тип переходной характеристики, вид функции, которой НМО обучен. В окошке "Допустимый % ошибок" задается максимально допустимый процент ошибки функционирования. Максимальное число синапсов, которые программе разрешено приравнять нулю, задается в окне "разрешено занулить",

в окне "кол.-во синапсов" показано сколько не равных нулю синапсов осталось в матрице весовых коэффициентов.

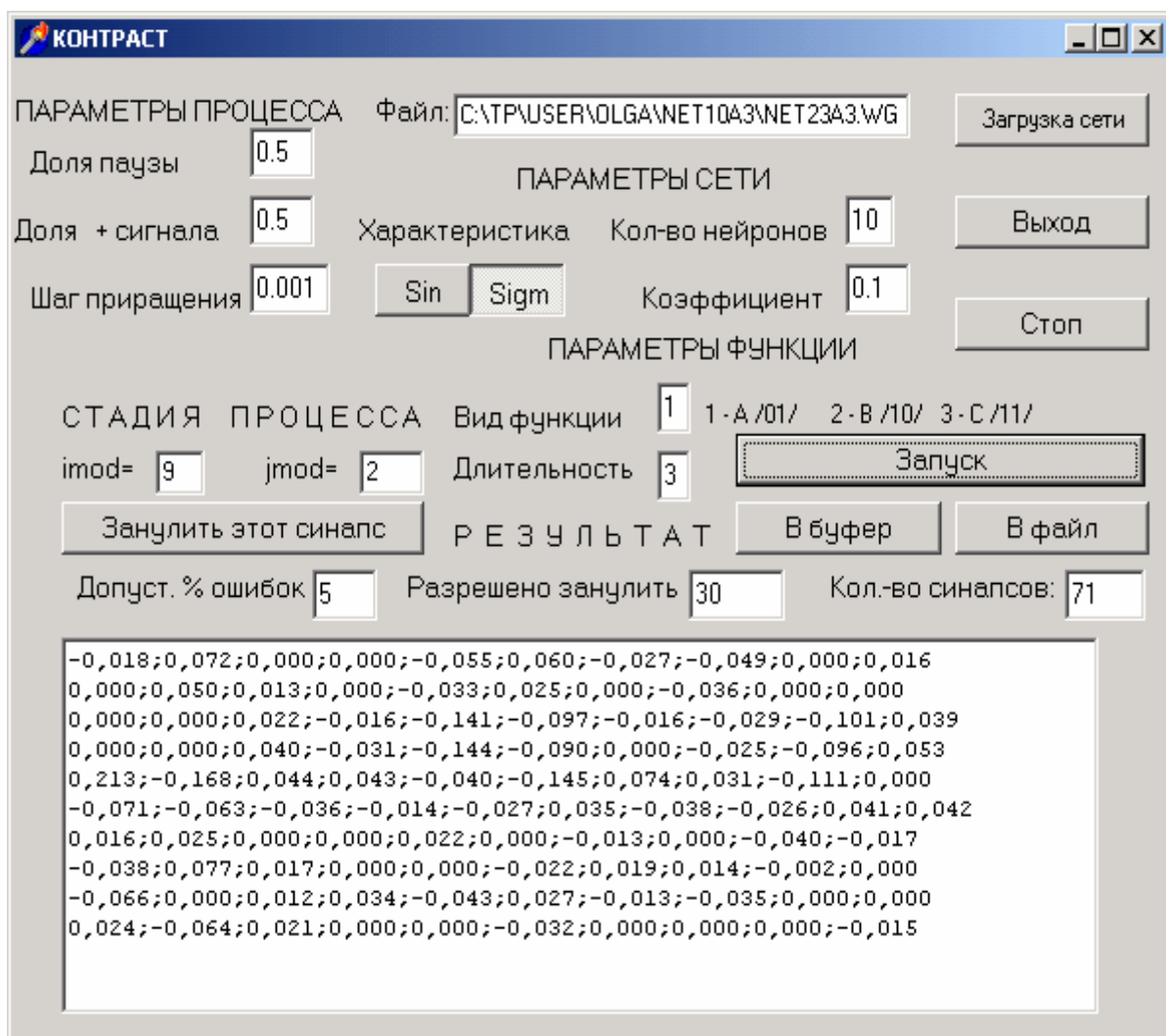


Рис.2.5.2. Рабочее окно программы, осуществляющей процедуру контрастирования.

Если при данном проценте ошибок функционирования не удастся больше уменьшить число синапсов, то полученная нейросеть помещается в файл и доучивается при помощи обучающей программы до нужного уровня целевой функции. Затем НМО присваивается новое имя, и он снова загружается для продолжения процесса контрастирования. Программа позволяет так же приравнять нулю выбранные синапсы вручную. Процесс контрастирования прекращается, если больше не удастся без потери качества функционирования уменьшить число синапсов.

ГЛАВА 3. РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПО СРАВНЕНИЮ СТРУКТУР НМО.

В данной главе представлены результаты вычислительных экспериментов по сравнению структур НМО, выполняющих одинаковые и различные функции.

3.1 Результаты сравнения структур НМО при помощи статистических и алгебраических методов.

Несмотря на то, что структура нейросетей "прозрачна" вопрос о том, как оценивать степень сходства различных НМО не является простым. Ниже, в качестве примера, приведены матрицы весовых коэффициентов одной из "родительских" 6-нейронных нейросетей (INIT62) и двух НМО, полученных из нее путем обучения выполнению функции АЗ (алгоритм АДФ, сигмоидальная переходная характеристика нейронов).

$$\text{INIT62} = \begin{pmatrix} -0,005 & -0,011 & 0,008 & -0,013 & -0,003 & 0,017 \\ -0,016 & 0,006 & 0,008 & -0,002 & -0,022 & -0,015 \\ -0,020 & -0,012 & -0,015 & -0,014 & -0,007 & -0,013 \\ -0,004 & -0,017 & 0,024 & -0,015 & 0,001 & -0,008 \\ -0,008 & -0,002 & 0,007 & -0,023 & -0,001 & 0,000 \\ 0,023 & 0,014 & 0,002 & -0,011 & 0,001 & -0,025 \end{pmatrix}$$

$$\text{NET621A3} = \begin{pmatrix} -0,028 & 0,050 & -0,038 & -0,015 & -0,057 & -0,055 \\ -0,006 & 0,033 & -0,035 & -0,023 & 0,030 & -0,078 \\ 0,000 & -0,003 & -0,019 & 0,004 & 0,127 & -0,116 \\ 0,000 & -0,004 & -0,009 & -0,004 & 0,128 & -0,117 \\ 0,209 & -0,001 & -0,031 & -0,018 & 0,109 & 0,094 \\ 0,287 & -0,204 & 0,079 & 0,092 & 0,288 & -0,034 \end{pmatrix}$$

$$\text{NET623A3} = \begin{pmatrix} -0,003 & -0,130 & -0,019 & 0,038 & -0,007 & 0,006 \\ 0,007 & -0,066 & 0,005 & 0,018 & 0,049 & -0,039 \\ 0,001 & -0,003 & -0,013 & -0,001 & 0,174 & -0,152 \\ 0,001 & -0,003 & -0,004 & -0,010 & 0,174 & -0,152 \\ 0,260 & -0,004 & -0,053 & -0,040 & -0,018 & 0,050 \\ 0,428 & -0,161 & -0,007 & 0,006 & 0,089 & -0,018 \end{pmatrix}$$

При первоначальном рассмотрении в полученных матрицах весовых коэффициентов не усматривается никаких закономерностей. На рис.3.1.1.схематически представлены результаты вычислительных экспериментов по обучению "родительских" нейросетей выполнению определенной функции, например, АЗ.

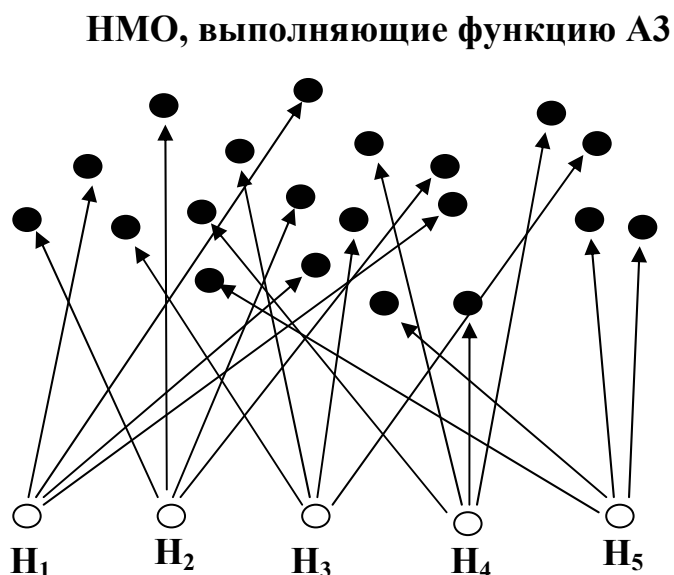


Рис. 3.1.1. Начальное представление результатов обучения ансамбля НМО. Светлые круги обозначают "родительские" нейросети, темные - нейросети, обученные выполнению одной и той же функции.

На первом этапе исследования проводилось сравнение структур НМО при помощи вычисления коэффициентов корреляции матриц, представляющих структуру НМО.

В таблицах П2-П5 Приложения приведены значения коэффициентов корреляции для нейросетей различного объема, выполняющих одинаковые и различные функции. Обобщенные результаты сравнения коэффициентов корреляции матриц весовых коэффициентов НМО представлены в Таблице 3.1.1 Приведенные результаты показывают, что при количестве нейронов больше пяти достоверные различия в структуре матриц весовых коэффициентов у НМО с различными функциями не наблюдаются.

Таблица 3.1.1 Результаты корреляционного анализа НМО.

Доля пар с $r_{\alpha} > r_{\text{крит}} (\alpha=5\%)$.	NET10	NET8	NET6	NET5
Во всей совокупности.	0,207	0,260	0,123	0,200
В группе ИМО с одной функцией.	0,125	0,325	0,225	0,375
В группе ИМО с разными функциями.	0,108	0,242	0,108	0,200
Фактическое значение коэффициента Стьюдента при сравнении долей ($t_{st}=2.02$).	0,295	1,034	1,86	2,24

При уменьшении числа подстраиваемых параметров (весовых коэффициентов) начинает обнаруживаться “портретное” сходство структур. Но как видно из таблицы, доля пятинейронных НМО с одинаковой функцией и коэффициентом корреляции, превышающем критическое значение, невелика (37.5% против 20.0% для НМО с разными функциями).

В таблице приложения П.6 – П.10. приведены значения коэффициентов корреляции, полученных при обучении “родительских” нейросетей INIT51-INIT55 при различных условиях обучения.

Анализ данных таблиц приложения П.11. - П.14 показывает, что для пятинейронных сетей существует, по крайней мере, три портретно различных структуры, выполняющих соответствующую функцию. Однако подобная процедура, визуального сравнения матриц весовых коэффициентов нейросетей, имеющих значительные коэффициенты корреляции, проведенная для НМО с числом нейронов больше пяти, не позволила выделить у них схожие структуры.

Следующим этапом исследования было сравнение распределений весовых коэффициентов. Предполагалось, что нейросети, одного объема, выполняющие одинаковую функцию могут иметь характерные распределения весовых коэффициентов (би- или полимодальность, заметную асимметрию и т.д.),

которые бы позволили по виду этого распределения определять структуры, выполняющие определенную функцию.

В приложении на рисунках П.1.-П.5 представлены распределения весов синапсов НМО с различными функциями. Не смотря на то, что по критерию χ^2 различия достоверны для функций А3 и С4, характерных особенностей (асимметрия, эксцесс, би- или полимодальность) по которым можно отнести распределения к определенной функции не наблюдается.

Следующим этапом было сравнение показателей, характеризующих матрицу весовых коэффициентов: собственных значений, следов и детерминантов для НМО одинакового объема, выполняющих одну и ту же функцию. Результаты этих вычислений собственных значений некоторых НМО, выполняющих функции А3 и С4 представлены в приложении в таблицах П15-П23.

Как следует из анализа результатов этих вычислений, указанные методы не позволяют выделить что-либо общее в матрицах, соответствующих НМО, выполняющих одинаковые функции и отличающее их от матриц НМО, выполняющих другие функции.

Таким образом, проведенные исследования показали, что, использованные стандартные методы (вычисление коэффициентов корреляции между матрицами весовых коэффициентов НМО, сравнение распределений их весов синапсов, сравнение показателей, характеризующих матрицу (собственных значений, следов и детерминантов)) не позволяют адекватно оценить степень сходства структур НМО, выполняющих одинаковые и разные функции.

3.2 Оценки сходства структур НМО, полученные вычислением евклидова расстояния.

В физике, биофизике и ряде других областей для описания систем используется фазовое пространство, когда каждой существенной переменной системы ставится в соответствие одна из координат фазового пространства. Тогда состояние системы можно представить положением точки в фазовом

пространстве. В данном случае, в качестве существенных переменных, описывающих НМО, можно взять весовые коэффициенты. Тогда число измерений пространства параметров будет соответствовать числу весовых коэффициентов и для 6-нейронной сети их будет 36. В этом случае структуре НМО будет соответствовать точка в пространстве параметров, а процесс обучения НМО, имитирующий эволюционный процесс, будет отображаться движением этой точки в этом пространстве.

Структуры НМО, полученные в результате обучения, располагаются в точках пространства параметров, соответствующих минимальным значениям целевой функции (или точкам с максимальной приспособленностью). Следовательно, введя метрику в это пространство, можно оценивать степень сходства между структурами НМО по расстоянию между точками, соответствующими этим структурам. В данной работе сходство между структурами НМО оценивалось с помощью обычного евклидова расстояния.

Для получения общей "картины" близости структур были построены гистограммы парных расстояний между НМО, выполняющими одну и ту же функцию. Для примера в таблицах приложения П24-П33 приведена часть результатов вычисления парных расстояний для НМО, выполняющих одинаковые и различные функции.

Гистограммы распределений расстояний 6-ти нейронных НМО представлены на рис.3.2.1-3.2.4. Некоторые гистограмма для НМО другого объема представлены на рисунках 3.2.5. - 3.2.9. Из рисунков видно, что парные расстояния между нейросетями распределились по двум четко разделенным группам. НМО, образующие первую группу (А) имеют "близкие" структуры, а НМО, образующие вторую группу (В), имеют "далекие" структуры.

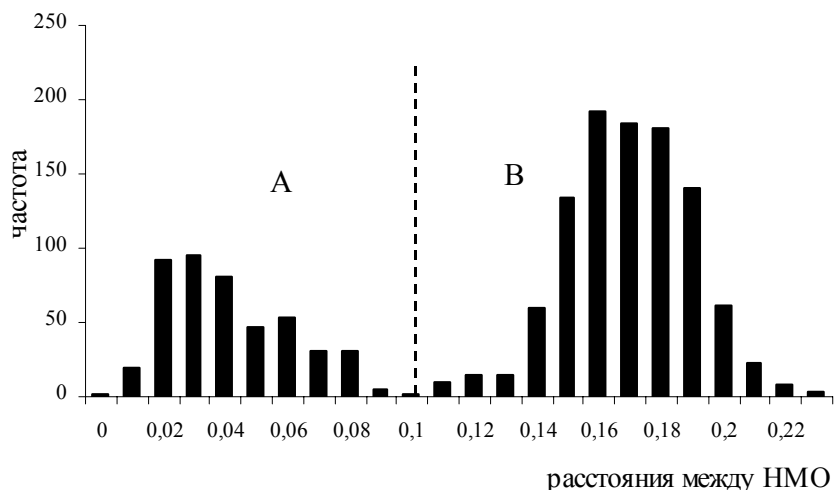


Рис.3.2.1 Гистограмма парных расстояний 6-ти нейронных НМО, выполняющих функцию АЗ (алгоритм АДФ, сигмоидальная переходная характеристика.). Общее число пар, по которым построена гистограмма равно 1845.

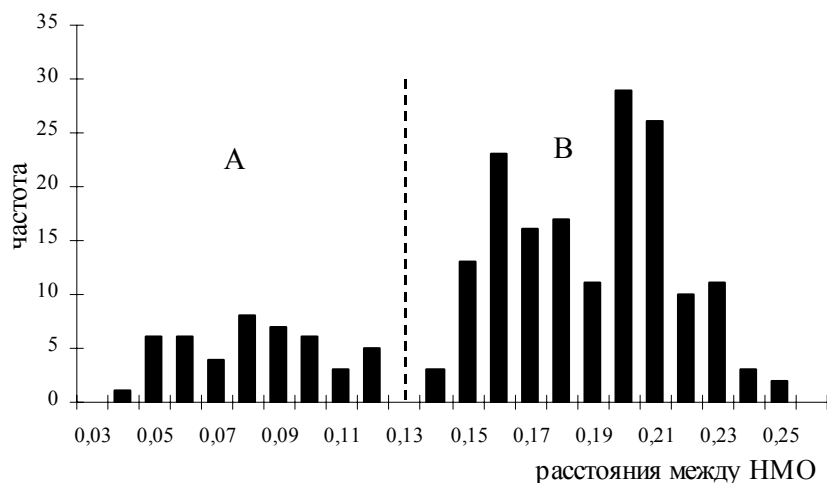


Рис.3.2.2 Гистограмма парных расстояний 6-ти нейронных НМО, выполняющих функцию АЗ ("мутационный" алгоритм, сигмоидальная переходная характеристика). Общее число пар, по которым построена гистограмма равно 210.

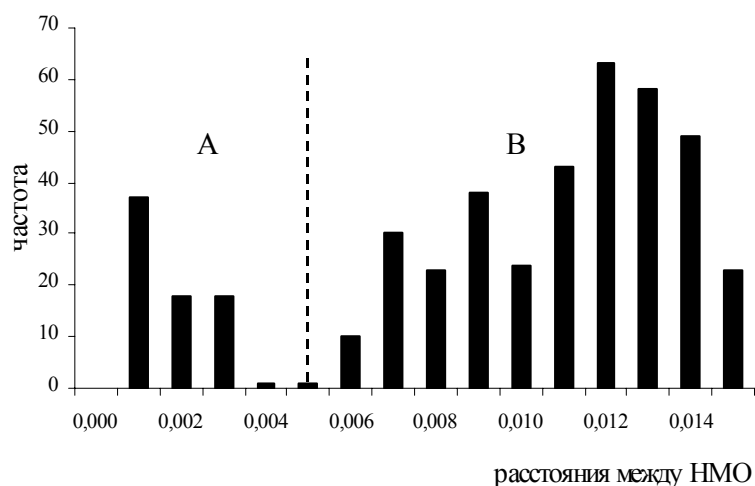


Рис.3.2.3 Гистограмма парных расстояний 6-ти нейронных НМО, выполняющих функцию А3 (алгоритм АДФ, синусоидальная переходная характеристика). Общее число пар, по которым построена гистограмма равно 436.

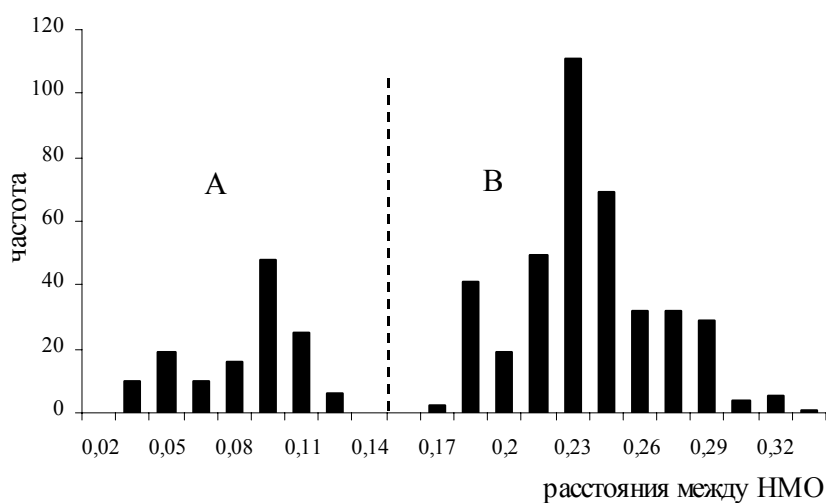


Рис.3.2.4 Гистограмма парных расстояний 6-ти нейронных НМО, выполняющих функцию С4 (алгоритм АДФ, сигмоидальная переходная характеристика). Общее число пар, по которым построена гистограмма равно 528.

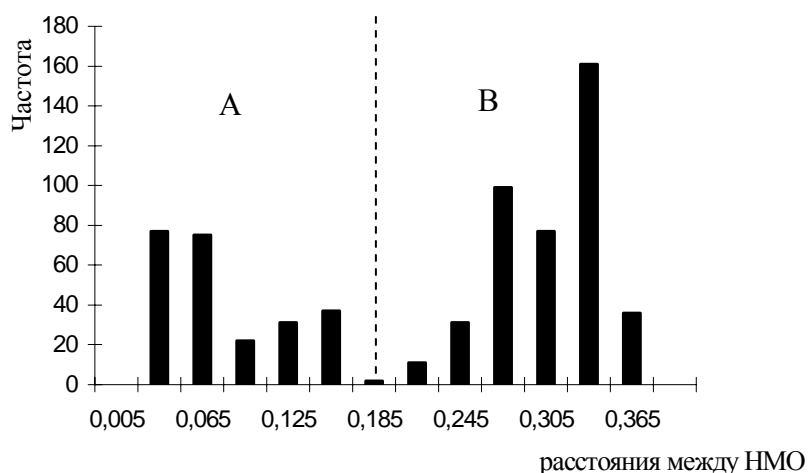


Рис. 3.2.5. Гистограмма парных расстояний 5-ти нейронных НМО, выполняющих функцию АЗ (алгоритм АДФ, сигмоидальная переходная характеристика). Общее число пар, по которым построена гистограмма равно 666.

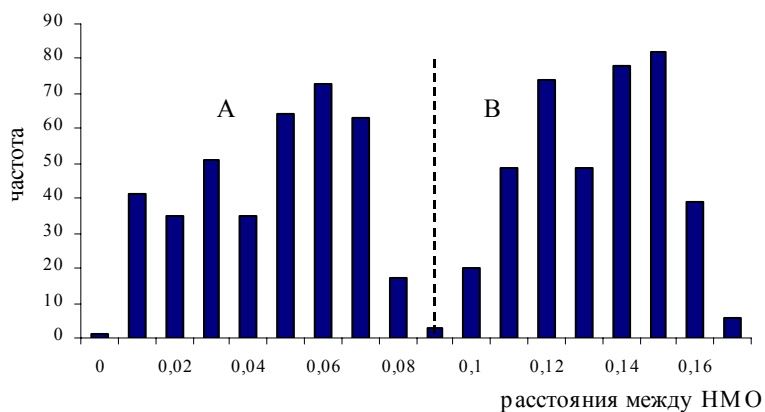


Рис.3.2.6. Гистограмма парных расстояний 7 нейронных НМО (функция АЗ, АДФ, сигмоидальная переходная характеристика). Общее число пар, по которым построена гистограмма равно 780.

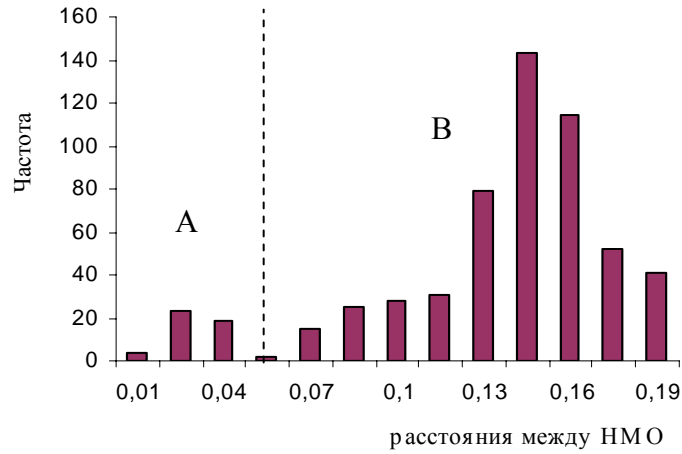


Рис.3.2.7. Гистограмма парных расстояний 7-ми нейронных НМО, выполняющих функцию С4 (алгоритм АДФ, сигмоидальная переходная характеристика). Общее число пар, по которым построена гистограмма равно 707.

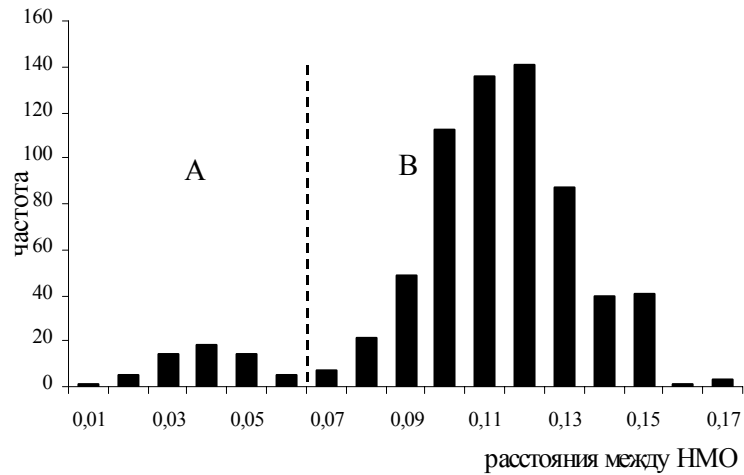


Рис.3.2.8 Гистограмма парных расстояний 8-ми нейронных НМО, выполняющих функции С4 (алгоритм АДФ, сигмоидальная переходная характеристика). Общее число пар, по которым построена гистограмма равно 698.

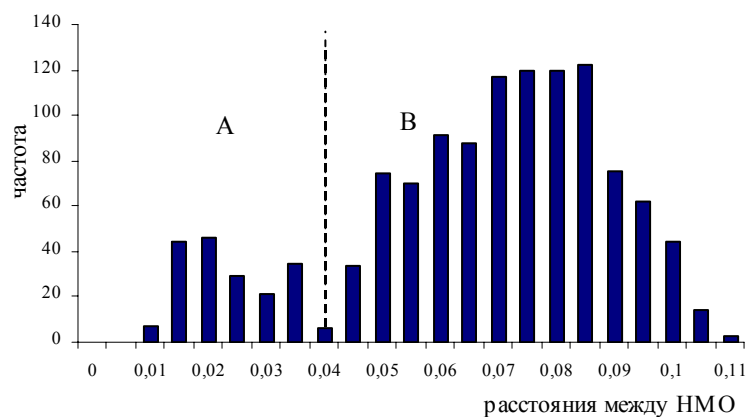


Рис.3.2.9. Гистограмма парных расстояний 10-ти нейронных НМО, выполняющих функцию АЗ (алгоритм АДФ, сигмоидальная переходная характеристика). Общее число пар, по которым построена гистограмма равно 1224.

Как видно из рисунков, бимодальный характер распределения расстояний между НМО является устойчивым свойством и не зависит от выполняемой функции, обучающего алгоритма, числа нейронов и типа переходной характеристики нейрона. Такая устойчивость указывает на наличие некоторого механизма, формирующего распределение данного типа. Этот механизм должен быть связан со свойствами параметрического пространства нейросетевых структур. Из рисунка 3.2.10. можно видеть, что бимодальность распределений является следствием того, что в фазовом пространстве нейросетевые структуры распределены не диффузно, а образуют скопления, кластеры.

Следовательно, введение евклидова расстояния между структурами НМО, выполняющими одинаковую функцию, позволило структурировать данные вычислительных экспериментов, что схематически представлено на рис.3.2.11.

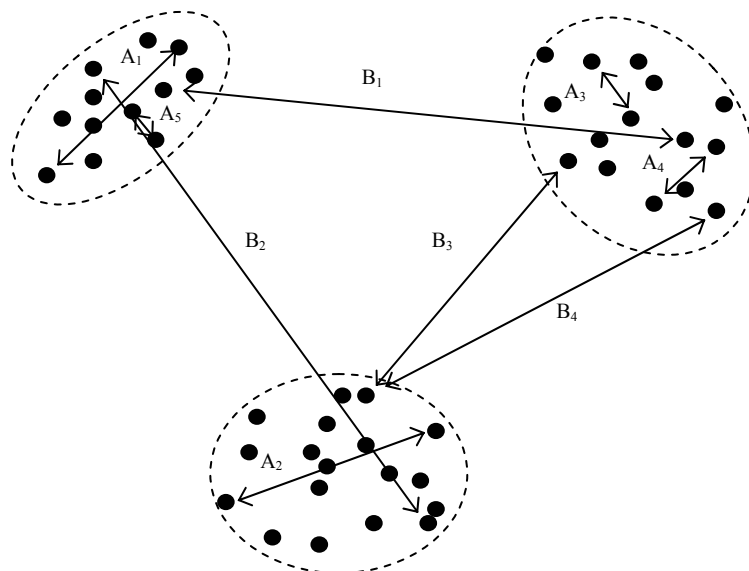


Рис.3.2.10 Условная схема распределения расстояний между нейросетевыми модельными объектами, соответствующая полученным гистограммам. На рисунке буквами А с индексами обозначены расстояния, между структурами, относящимися к одному кластеру, соответственно В – к разным кластерам.

Кластеры из НМО, выполняющих функцию А3

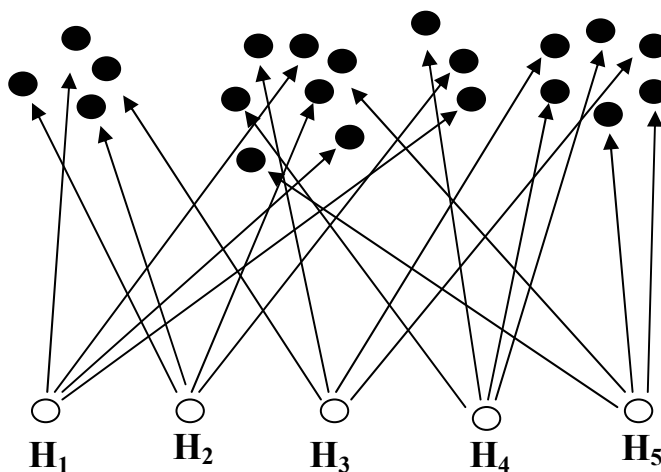


Рис.3.2.11 Представленность результатов обучения ансамбля НМО после введения евклидовой метрики.

Для того чтобы оценить степень схожести структур, выполняющих разные

функции, были построены гистограммы парных расстояний между НМО, выполняющими различные функции. На рис.3.2.7 приведена одна из таких гистограмм.

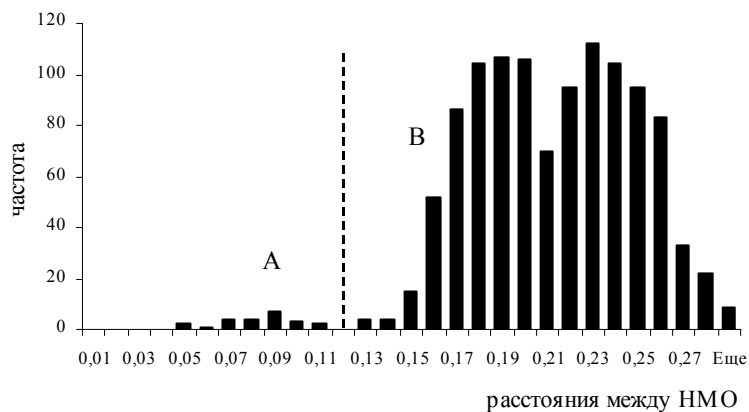


Рис. 3.2.12 Гистограммы парных расстояний 6-ти нейронных НМО, выполняющих различные функции А3 и С4 (алгоритм АДФ, сигмоидальная переходная характеристика). Общее число пар, по которым построена гистограмма равно 1124.

Из рисунка 3.2.12. видно, что распределение расстояний между НМО, реализующими разные функции (в данном случае, А3 и С4) тоже имеет бимодальный характер, не смотря на то, что первый пик менее выражен. Это говорит о том, что структуры нейросетей, выполняющих разные функции, могут различаться в меньшей степени, чем структуры НМО с одинаковыми функциями (рис.3.2.1 - 3.2.9). Следовательно, пространство весовых коэффициентов НМО плотно заполнено структурами, соответствующими различным функциям.

Результаты и выводы главы.

1. Даже при минимальном размере нейросетей равном 5 нейронам, при котором они еще выполняют данные функции (но с очень низким качеством), формируются НМО с различными структурами межнейронных связей, то есть одну и ту же функцию выполняют различные структуры.

2. Структуры НМО с одинаковым числом нейронов, выполняющие одинаковые функции, образуют в пространстве параметров скопления или кластеры.
3. Расстояния в пространстве параметров между НМО, выполняющими различные функции, могут быть меньше, чем внутрикластерные расстояния между НМО, выполняющими одну и ту же функцию, то есть структуры НМО, выполняющих одну и ту же функцию, могут различаться более чем структуры НМО, выполняющих разные функции. При этом пространство параметров плотно заполнено функциональными структурами.

ГЛАВА 4. ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ МЕХАНИЗМОВ ФОРМИРОВАНИЯ КЛАСТЕРОВ.

В предыдущей главе показано, что структуры, НМО, выполняющих определенные функции, распределены не диффузно, а образуют в пространстве параметров скопления, кластеры. Существование кластеров является устойчивым феноменом, так как не зависит от числа нейронов, вида переходной характеристики, функции, которой обучались НМО, и вида обучающего алгоритма. Это ставит вопрос о механизмах формирования кластеров.

Поскольку кластеры сформированы из уже обученных нейросетей, выполняющих определенную функцию с одинаковым качеством, то в нашем распоряжении имеется уникальная информация – набор эквивалентных эволюционных исходов в среде со стохастической компонентой. Тогда распределение нейросетей в пространстве параметров соответствует распределению конечных точек эволюционных траекторий и указывает на свойства ландшафта целевой функции в области ее минимальных значений.

Так как качество функционирования всех НМО одинаково, то существование кластеров можно интерпретировать как проявление некоторых симметрий, сохраняющих инвариант (функцию) при определенных преобразованиях, соответствующих перемещениям в параметрическом пространстве. Опираясь на аналогию с нейтральными мутациями по Кимуре (Кимура, 1985; Kimura, 1991), когда происходит мутационный дрейф структуры макромолекулы с полным сохранением ее функции, можно предположить, что отдельный кластер есть проявление некоторой локальной симметрии уравнений, описывающих функционирование нейросети (2.1.1). Эта симметрия связана с непрерывными пространственными перемещениями. Тогда существование разных кластеров можно объяснить проявлением некоторой дискретной симметрии.

4.1 Локальная симметрия структур НМО, выполняющих одинаковые функции.

Для выявления локальной симметрии используется инфинитезимальный оператор группы Ли непрерывных преобразований (Ибрагимов, 1983) вида $X = s_{ij}(\{x_{km}\}) \frac{\partial}{\partial x_{ij}}$, где $s_{ij}(\{x_{km}\})$ – некоторая функция от весовых коэффициентов НМО. Критерий инвариантности системы уравнений $\Phi_i(x) = 0$ относительно группы, задаваемой инфинитезимальным оператором, имеет следующий вид:

$$X\Phi_i(x)|_M = 0, \quad i=1, \dots, N \quad (4.1.1)$$

где M – гиперповерхность, задаваемая системой уравнений $\Phi_i(x) = 0$, N – количество уравнений.

Уравнения (2.1.1-2.1.3), описывающие функционирование полносвязной нейросети легко привести к неявному виду:

$$\Phi_i^n(\{\alpha_j^n\}, \alpha_i^{n+1}, \{A_i^n\}, \{x_{ij}\}) \equiv \alpha_i^{n+1} - f(\rho_i^n) = 0, \quad (4.1.2)$$

$$\text{где } \rho_i^n = \sum_j x_{ij} \alpha_j^n + A_i^n, \text{ а } f(\rho_i^n) = \frac{\rho_i^n}{a + |\rho_i^n|} \text{ или } f(\rho_i^n) = \sin(a \cdot \rho_i^n).$$

Однако поиск инвариантов в уравнениях, описывающих неограниченное по времени функционирование представляется весьма громоздким. На ограниченных временных интервалах, когда длительное последствие событий отсутствует, полносвязная нейросеть может быть представлена в виде слоистой сети. В этом случае квазислучайную последовательность событий, поступающих на вход нейросети в разные моменты времени можно заменить набором обучающих паттернов (в следующей главе не рисунке 5.1.2. представлена полносвязная сеть, выполняющая функцию АЗ в виде слоистой сети). Тогда функционирование слоистой сети можно описать системой уравнений:

$$\begin{cases} \sum_{k=1}^N x_{jk} A_k^r = 0 \\ \sum_{j=1}^N x_{ij} f\left(\sum_{k=1}^N x_{jk} A_k^r\right) - O_i^r = 0 \\ \sum_{i=1}^N x_{mi} f\left(\sum_{j=1}^N x_{ij} f\left(\sum_{k=1}^N x_{jk} A_k^r\right)\right) = 0 \end{cases}, \quad (4.1.3)$$

где O_i^r - требуемый выходной сигнал нейросети в ответ на A_k^r входной сигнал; $f()$ - переходная функция нейрона; N - количество нейронов; r - номер входного паттерна [в нашем случае их четыре: “пауза” - (00), А - (10), В - (01) и С - (11)].

В результате применения инфинитезимального оператора к системе (4.1.3) получается система уравнений:

$$\begin{cases} \sum_{k=1}^N s_{jk} A_k^r = 0 \\ \sum_{j=1}^N \left[s_{ij} B_j^r + x_{ij} C_j^r \sum_{k=1}^N s_{jk} A_k^r \right] = 0 \\ \sum_{j=1}^N s_{ij} D_j^r + \sum_{j=1}^N x_{ij} F_j^r \left[\sum_{k=1}^N s_{jk} B_k^r + \sum_{k=1}^N x_{jk} C_k^r \sum_{m=1}^N s_{km} A_m^r \right] = 0 \end{cases} \quad (4.1.4)$$

где $D_i^r = f\left(\sum_{k=1}^N x_{ik} B_k^r\right)$, $F_i^r = f'\left(\sum_{k=1}^N x_{ik} B_k^r\right)$, $B_i^r = f\left(\sum_{j=1}^N x_{ij} A_j^r\right)$, $C_i^r = f'\left(\sum_{j=1}^N x_{ij} A_j^r\right)$.

Анализ этой системы показал, что она имеет решение относительно неизвестных s_{ij} , которые для данной системы являются не функциями от весовых коэффициентов $\{x_{km}\}$ а просто константами. Эти константы задают однопараметрическое семейство локальных преобразований вида $x_{ij}^* = x_{ij} + s_{ij} \lambda$, (λ - параметр) соответствующих переносу параллельно пространственной прямой, задаваемой коэффициентами s_{ij} . При этом преобразовании сохраняются инварианты: $J_m = s_{kl} x_{ij} + s_{ij} x_{kl}$, которые можно назвать локальными функциональными инвариантами структуры НМО.

Поскольку число переменных (x_{ij}) превышает число уравнений системы (4.1.4), то существует бесконечное множество направлений в многомерном пространстве параметров (x_{ij}) вдоль которых возможен перенос. Однако, эти направления не равнозначны, вдоль одних перенос возможен на расстояния близкие к величине кластера, а вдоль других на очень малые расстояния. Очевидно, это связано с неровностями ландшафта, по которому происходит движение.

4.2 Дискретная симметрия. Число кластеров, формируемых структурами НМО.

Помимо непрерывной симметрии, обеспечивающей распределенность кластера, были обнаружены дискретные симметрии, способствующие формированию различных кластеров. Одна из этих симметрий связана со сменой знака:

$$x_{ij}^* = x_{ij} (-1)^{\delta_{Ri} + \delta_{Rj}}, \quad (4.2.1)$$

где δ_{ij} – символ Кронекера, R – номер любого ассоциативного нейрона. При данном преобразовании функциональным инвариантом нейросети является величина:

$$J_i = x_{ki} f\left(\sum_j x_{ij} \alpha_j\right). \quad (4.2.2)$$

Количество структур НМО, создаваемых знаковым преобразованием равно 2^K , где K – число ассоциативных нейронов (к которым только применимо данное преобразование). Эта симметрия обусловлена нечетностью переходной характеристики нейрона.

Второе дискретное преобразование это перестановка t -го и m -го нейронов:

$$x_{it} \leftrightarrow x_{im}, \quad x_{tj} \leftrightarrow x_{mj} \quad (4.2.3)$$

При данном преобразовании сохраняется величина

$$J_{im} = \left[x_{it} f\left(\sum_j x_{tj} \alpha_j\right), x_{im} f\left(\sum_j x_{mj} \alpha_j\right) \right] \quad (4.2.4).$$

Количество разных структур НМО, формируемых этим преобразованием равно числу подстановок, то есть $K!$, где K – число ассоциативных нейронов в случае рассмотрения функции АЗ.

Для этих двух видов дискретных симметрий можно точно определить количество кластеров, которые могут существовать в пространстве параметров структуры НМО, выполняющих функцию АЗ. Поскольку эти симметрии независимы, то общее число разных кластеров, образуемых НМО равно $2^K K!$. Согласно этой формуле, количество кластеров для 6 нейронных НМО, выполняющих функцию АЗ равно 8, так как у них всего два ассоциативных нейрона. Образование кластеров для 6 нейронных НМО поясняет рис.4.2.1.

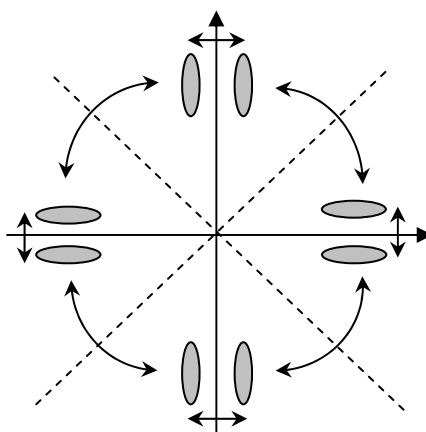


Рис.4.2.1. Схема образования кластеров для 6-ти нейронных НМО. Отражения относительно осей координат соответствуют смене знака, а отражения относительно биссектрис – перестановке.

Для 7 нейронных НМО число кластеров равно 48, для 8 нейронных – 384, для 10 нейронных – 46080. Отсюда следует, что если бы в качестве объекта исследования была выбрана модель, сложность которой хоть сколько-нибудь соответствовала бы сложности реальной системы (а для этого потребовалось бы значительно больше 10 нейронов) никаких закономерностей выявить просто бы не удалось. Использование минимальных (для обеспечения функционирования данного уровня примитивности) нейросетей, состоящих из 6 нейронов

позволило систематизировать экспериментальный материал и обнаружить приведенные выше симметрии.

Следует заметить, что число кластеров зависит от вида функции, которую выполняют соответствующие НМО. Например, для функций $S3$ и $S4$ количество кластеров будет больше, из-за того, что для этих функций на вход нейросети подаются две единицы и на выходе требуется тоже две единицы и в этом частном случае допускается перестановка не только ассоциативных, но и входных и выходных нейронов.

Результаты и выводы главы.

1. Показано, что существуют локальные (непрерывные) преобразования структур НМО, сохраняющие его функцию, что связано с существованием функциональных инвариантов структуры, локальная функциональная симметрия обеспечивает распределенность кластера.
2. Показано, что существование кластеров связано с двумя типами функциональных симметрий структур НМО это: смена знака весовых коэффициентов и перестановка ассоциативных нейронов.
3. Для этих видов дискретных функциональных симметрий точно определено число кластеров, которые могут формироваться в пространстве параметров структур НМО.

ГЛАВА 5. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ПРОВЕРКА ЭКВИВАЛЕНТНОСТИ СТРУКТУР НМО, ВЫПОЛНЯЮЩИХ ОДИНАКОВЫЕ ФУНКЦИИ.

5.1 Применение симметричных преобразований к НМО, выполняющим одну и ту же функцию.

Существование функциональных симметрий указывает на то, что существуют структуры, которые с точностью до соответствующих преобразований эквивалентны, неразличимы. Естественен вопрос: "Существуют ли структуры НМО, выполняющих одинаковые функции, но не эквивалентные в указанном смысле." Были проведены вычислительные эксперименты, в которых к структурам НМО применялись сначала дискретные преобразования в количестве необходимом для перевода их в один кластер, а затем выполнялось локальное преобразование, непрерывно (с сохранением функционирования) переводящее одну нейросеть в другую.

В четвертой главе показано, что инфинитезимальное преобразование в данном случае представляет собой параллельный перенос: $x_{ij}^* = x_{ij} + s_{ij}\lambda$, где s_{ij} - коэффициент задающий пространственную прямую, λ - параметр, соответствующий величине параллельного переноса. Это позволило использовать данное преобразование для сравнения различных нейросетей. В этом случае за s_{ij} можно выбрать значение $s_{ij} = x_{ij}^* - x_{ij}$, где x_{ij} и x_{ij}^* - матрицы весовых коэффициентов двух сравниваемых нейросетей, $0 \leq \lambda \leq 1$, причем, значение $\lambda=0$ соответствует одной нейросети, $\lambda=1$ - другой нейросети. Изменяя λ малыми шагами, и оценивая функционирование полученной нейросети на каждом таком шаге, можно проверить непрерывность перехода структуры одного НМО в структуру другого. Возможность такого перехода не гарантирована априорно, поскольку, как уже было сказано, ландшафт пространства параметров очень "изрезан", с чем и связана локальность данного преобразования. На Рисунке 5.1.1 для иллюстрации приведен трехмерный

разрез многомерного пространства весовых коэффициентов НМО N621A3, дающий представление о свойствах этого ландшафта.

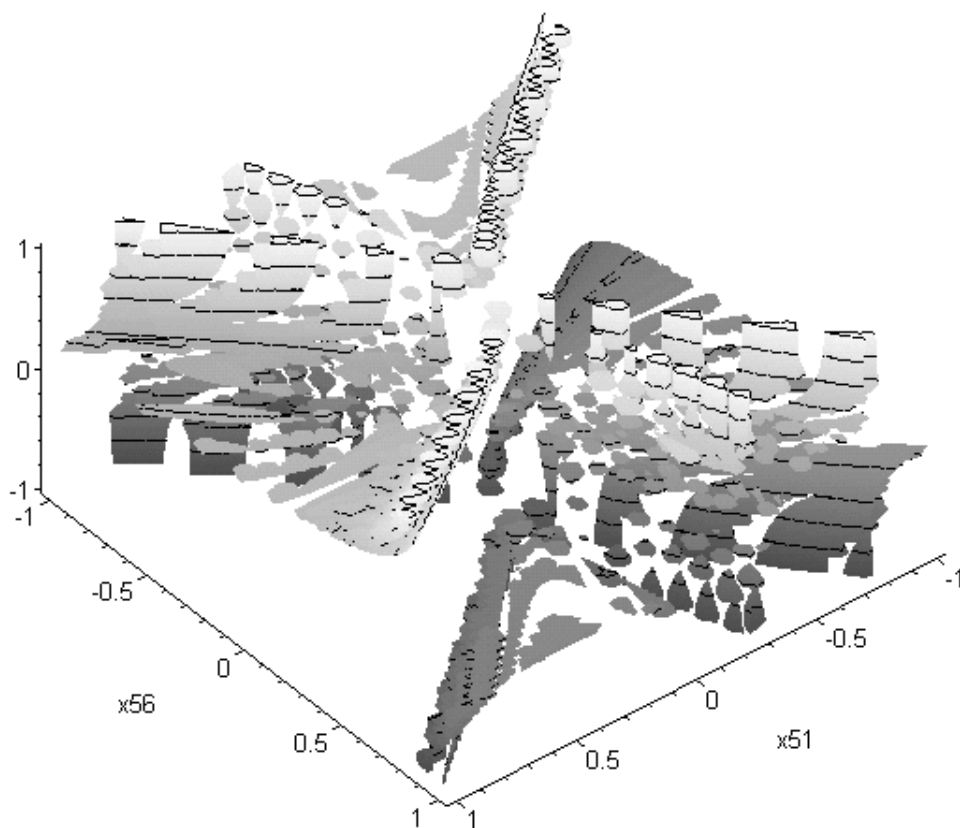


Рисунок 5.1.1 Трехмерный разрез многомерного пространства весовых коэффициентов НМО Net 621A3. Вид разреза 36-мерной гиперповерхности функционирования НМО N621A3 по весовым коэффициентам x_{51} , x_{56} , x_{65} .

Рисунок получен при решении системы уравнений 4.1.3.

Для НМО N621A3 представление полностью связанной нейросети в виде слоистой имеет вид, представленный на рисунке 5.1.2. Связи взяты из матрицы весовых коэффициентов обученного НМО N621A3. Эта нейросеть выбрана потому, что имеет наиболее простую матрицу весовых коэффициентов, так как величина синапса x_{25} близка к нулю и это позволило получить решение в аналитическом

виде. На рисунке представлен только сигнал на выходе третьего нейрона, поскольку для четвертого нейрона все аналогично.

Система уравнений, описывающая сигнал нейросети в третьем слое имеет вид:

$$\left. \begin{aligned} a &= x_{35}f(x_{51} \cdot A) + x_{36}f(x_{61} \cdot A + x_{62} \cdot A) \\ b &= x_{35}f(x_{51} \cdot B) + x_{36}f(x_{61} \cdot B + x_{62} \cdot A) \\ c &= x_{35}f(x_{51} \cdot A) + x_{36}f(x_{61} \cdot A + x_{62} \cdot B) \\ d &= x_{35}f(x_{51} \cdot B) + x_{36}f(x_{61} \cdot B + x_{62} \cdot B), \end{aligned} \right\} (5.1.1.)$$

где $a = 0,027$; $b = 0,007$; $c = 0,1$; $d = 0,033$. Значения этих величин получены из нейросети Net621A3. $A = f(0,05) = 0,33$; $B = f(0,5) = 0,83$.

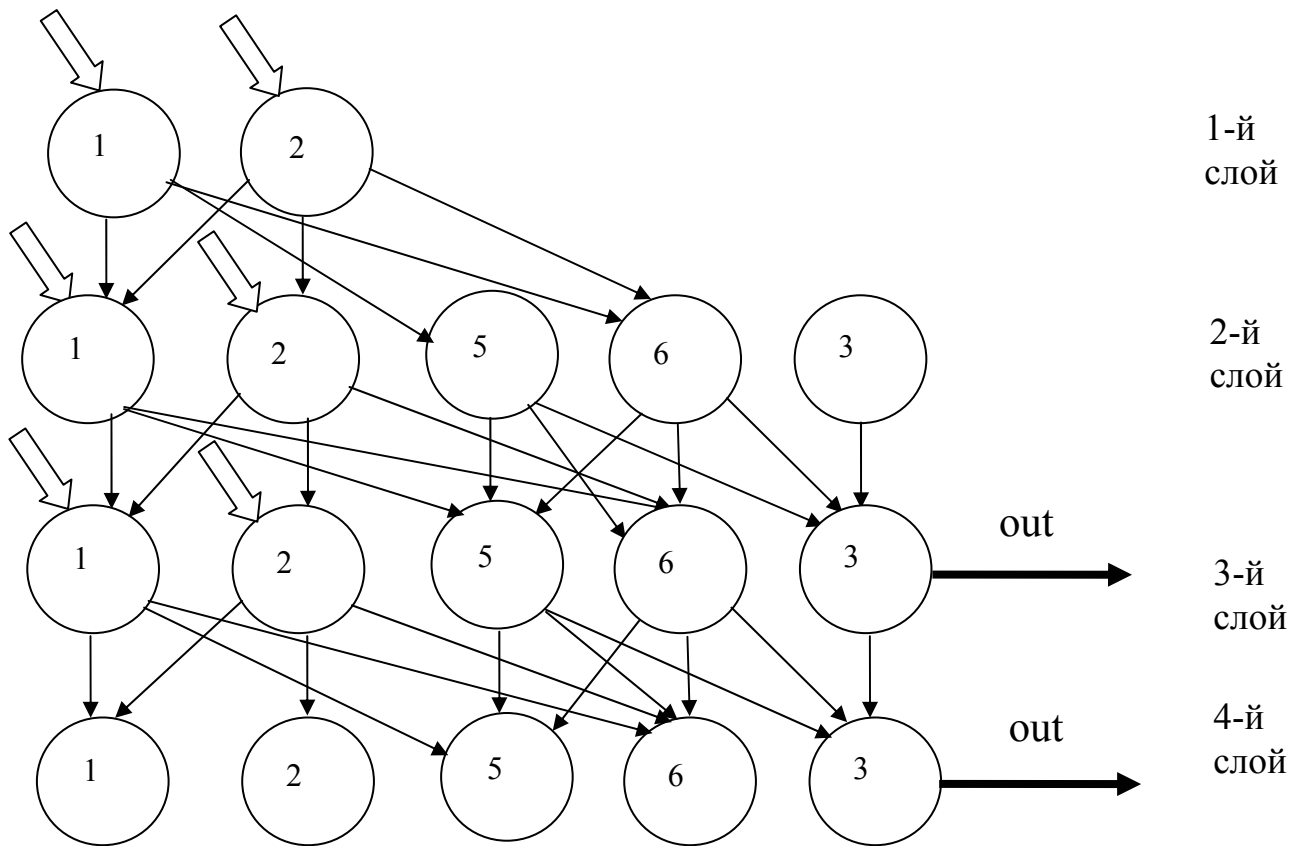


Рис.5.1.2 Представление полносвязной нейросети N621A3 в виде слоистой. (Полые стрелки соответствуют подаваемому входному сигналу, тонкие стрелки отражают веса связей между нейронами, величина которых отлична от нуля, отсутствие стрелок - значение соответствующих синапсов близко к нулю).

Система уравнений, описывающая состояние нейросети в четвертом слое, имеет вид:

$$\begin{aligned}
 as &= x_{33}a + x_{35}f(x_{51} \cdot f(fr(A) + x_{11} \cdot A + x_{12} \cdot A) + x_{55}f(x_{51} \cdot A) + x_{56}f(x_{61} \cdot A + x_{62} \cdot A)) + \\
 &x_{36}f(x_{61} \cdot f(fr(A) + x_{11} \cdot A + x_{12} \cdot A) + x_{62}f(fr(A) + x_{22} \cdot A) + x_{65}f(x_{51} \cdot A) + x_{66}f(x_{61} \cdot A + x_{62} \cdot A)) \\
 bs &= x_{33}b + x_{35}f(x_{51} \cdot f(fr(B) + x_{11} \cdot B + x_{12} \cdot A) + x_{55}f(x_{51} \cdot B) + x_{56}f(x_{61} \cdot B + x_{62} \cdot A)) + \\
 &x_{36}f(x_{61} \cdot f(fr(B) + x_{11} \cdot B + x_{12} \cdot A) + x_{62}f(fr(A) + x_{22} \cdot A) + x_{65}f(x_{51} \cdot B) + x_{66}f(x_{61} \cdot B + x_{62} \cdot A)) \\
 cs &= x_{33}c + x_{35}f(x_{51} \cdot f(fr(A) + x_{11} \cdot A + x_{12} \cdot B) + x_{55}f(x_{51} \cdot A) + x_{56}f(x_{61} \cdot A + x_{62} \cdot B)) + \\
 &x_{36}f(x_{61} \cdot f(fr(A) + x_{11} \cdot A + x_{12} \cdot B) + x_{62}f(fr(B) + x_{22} \cdot B) + x_{65}f(x_{51} \cdot A) + x_{66}f(x_{61} \cdot A + x_{62} \cdot B)) \\
 ds &= x_{33}d + x_{35}f(x_{51} \cdot f(fr(B) + x_{11} \cdot B + x_{12} \cdot B) + x_{55}f(x_{51} \cdot B) + x_{56}f(x_{61} \cdot B + x_{62} \cdot B)) + \\
 &x_{36}f(x_{61} \cdot f(fr(B) + x_{11} \cdot B + x_{12} \cdot B) + x_{62}f(fr(B) + x_{22} \cdot B) + x_{65}f(x_{51} \cdot B) + x_{66}f(x_{61} \cdot B + x_{62} \cdot B))
 \end{aligned} \tag{5.1.2}$$

где $as=-0.009$; $bs=0.001$; $cs=-0.036$; $ds=-0.004$. Эти значения получены при рассмотрении функционирования НМО N621A3.

Решая обе системы уравнений совместно, получаем следующее уравнение:

$$\begin{aligned}
 &(-cs \cdot d \cdot f(x_{55}f(Ax_{51}) + x_{56}f(A(x_{61} + x_{62}))) + x_{51}f(A(x_{11} + x_{12}) + fr(A))) \cdot f(x_{65}f(Bx_{51}) + x_{66}f(Bx_{61} + \\
 &Ax_{62}) + x_{62}f(Ax_{22} + fr(A)) + x_{61}f(Bx_{11} + Ax_{12} + fr(B))) - as \cdot c \cdot f(x_{65}f(Bx_{51}) + x_{66}f(Bx_{61} + Ax_{62}) + \\
 &x_{62}f(Ax_{22} + fr(A)) + x_{61}f(Bx_{11} + Ax_{12} + fr(B))) \cdot f(x_{55}f(Bx_{51}) + x_{56}f(B(x_{61} + x_{62}))) + x_{51}f(B(x_{11} + \\
 &x_{12}) + fr(B))) + as \cdot c \cdot f(x_{65}f(Bx_{51}) + x_{66}f(Bx_{61} + Ax_{62}) + x_{62}f(Ax_{22} + fr(A)) + x_{61}f(Bx_{11} + Ax_{12} + \\
 &fr(B))) \cdot f(x_{55}f(Bx_{51}) + x_{56}f(B(x_{61} + x_{62}))) + x_{51}f(B(x_{11} + x_{12}) + fr(B))) \cdot f(x_{65}f(Ax_{51}) + \\
 &x_{66}f(Ax_{61} + Bx_{62}) + x_{61}f(Ax_{11} + Bx_{12} + fr(A)) + x_{62}f(Bx_{22} + fr(B))) - a \cdot bs \cdot f(x_{55}f(Bx_{51}) + \\
 &x_{56}f(B(x_{61} + x_{62}))) + x_{51}f(B(x_{11} + x_{12}) + fr(B))) \cdot f(x_{65}f(Ax_{51}) + x_{66}f(Ax_{61} + Bx_{62}) + x_{61}f(Ax_{11} + \\
 &Bx_{12} + fr(A)) + x_{62}f(Bx_{22} + fr(B))) - ((bs \cdot c - b \cdot cs)f(x_{55}f(Ax_{51}) + x_{56}f(A(x_{61} + x_{62}))) + x_{51}f(A(x_{11} + \\
 &x_{12}) + fr(A))) + (-as \cdot c + a \cdot cs)f(x_{55}f(Bx_{51}) + x_{56}f(Bx_{61} + Ax_{62}) + x_{51}f(Bx_{11} + Ax_{12} + fr(B))) \cdot \\
 &f(x_{65}f(Bx_{51}) + x_{66}f(B(x_{61} + x_{62}))) + x_{61}f(B(x_{11} + x_{12}) + fr(B)) + x_{62}f(Bx_{22} + fr(B))) + \\
 &f(x_{55}f(Ax_{51}) + x_{56}f(Ax_{61} + Bx_{62}) + x_{51}f(Ax_{11} + Bx_{12} + fr(A))) \cdot (-bs \cdot d \cdot f(x_{65}f(Ax_{51}) + x_{66}f(A(x_{61} + \\
 &x_{62}))) + x_{61}f(A(x_{11} + x_{12}) + fr(A)) + x_{62}f(Ax_{22} + fr(A))) + as \cdot d \cdot f(x_{65}f(Bx_{51}) + x_{66}f(Bx_{61} + Ax_{62}) + \\
 &x_{62}f(Ax_{22} + fr(A)) + x_{61}f(Bx_{11} + Ax_{12} + fr(B))) + (-as \cdot b + a \cdot bs)f(x_{65}f(Bx_{51}) + x_{66}f(B(x_{61} + x_{62}))) + \\
 &x_{61}f(B(x_{11} + x_{12}) + fr(B)) + x_{62}f(Bx_{22} + fr(B)))) / (cf(x_{65}f(Ax_{51}) + x_{66}f(A(x_{61} + x_{62}))) + x_{61}f(A(x_{11} + \\
 &x_{12}) + fr(A)) + x_{62}f(Ax_{22} + fr(A))) \cdot f(x_{55}f(Bx_{51}) + x_{56}f(Bx_{61} + Ax_{62}) + x_{51}f(Bx_{11} + Ax_{12} + fr(B))) - \\
 &cf(x_{55}f(Ax_{51}) + x_{56}f(A(x_{61} + x_{62}))) + x_{51}f(A(x_{11} + x_{12}) + fr(A))) \cdot f(x_{65}f(Bx_{51}) + x_{66}f(Bx_{51} + Ax_{62}) + \\
 &x_{62}f(Ax_{22} + fr(A)) + x_{61}f(Bx_{11} + Ax_{12} + fr(B))) + f(x_{55}f(Ax_{51}) + x_{56}f(Ax_{61} + Bx_{62}) + x_{51}f(Ax_{11} + \\
 &Bx_{12} + fr(A))) \cdot (+bf(x_{65}f(Ax_{51}) + x_{66}f(A(x_{61} + x_{62}))) + x_{61}f(A(x_{11} + x_{12}) + fr(A)) + x_{62}f(Ax_{22} + \\
 &fr(A))) + af(x_{65}f(Bx_{51}) + x_{66}f(Bx_{61} + Ax_{62}) + x_{62}f(Ax_{22} + fr(A)) + x_{61}f(Bx_{11} + Ax_{12} + fr(B))) + \\
 &(bf(x_{55}f(Ax_{51}) + x_{56}f(A(x_{61} + x_{62}))) + x_{51}f(A(x_{11} + x_{12}) + fr(A))) - af(x_{55}f(Bx_{51}) + x_{56}f(Bx_{61} + \\
 &Ax_{62}) + x_{51}f(Bx_{11} + Ax_{12} + fr(B)))) \cdot f(x_{65}f(Ax_{51}) + x_{66}f(Ax_{61} + Bx_{62}) + x_{61}f(Ax_{11} + Bx_{12} + fr(A)) + \\
 &x_{62}f(Bx_{22} + fr(B))) = ds
 \end{aligned}$$

Трехмерный разрез которого и представлен на рис. 5.1.1.

Из-за сложности ландшафта качество функционирования НМО в процессе изменения λ от 0 до 1 может ухудшаться, что проявляется в появлении ошибочных ответов НМО. Процент ошибочных ответов характеризует степень отклонения хорды, соединяющей точки, соответствующие структурам выбранных НМО, от поверхности наилучшего функционирования, выраженной системой (4.1.3). Необученной нейросети соответствует процент ошибочных ответов равный 50%.

В приложении в таблицах П34-П39 представлены результаты вычислительных экспериментов применения непрерывных преобразований к НМО, относящимся к одному кластеру. Рассмотрены пять кластеров, которые формируются структурами, полученными при обучении 6-ти нейронных НМО выполнению функции АЗ (сигмоидальная переходная характеристика, алгоритм АДФ). Из таблиц видно, что применение непрерывных преобразований к структурам, относящимся к одному кластеру, позволяет перевести их друг в друга.

Далее в таблицах П40-П43 представлены результаты вычислительных экспериментов по переводу структур НМО, относящихся к разным кластерам при помощи как дискретных, так и непрерывных преобразований. Для 6 нейронных НМО, выполняющих функцию АЗ, в качестве "базового" произвольным образом был выбран НМО Net 613АЗ. Как следует из анализа таблиц, процент ошибочных ответов может меняться в зависимости от маршрута, по которому происходит переход одной нейросети в другую. Из анализа так же следует, что не всегда возможно непосредственное преобразование одной нейросетевой структуры в другую. Это является прямым указанием на то, что ландшафт поверхности функционирования "извилист и изрезан".

В таблицах П44-П49 приложения показаны результаты перевода в структуру "базового" НМО N613 структур, выполняющих функцию АЗ, но обученных при помощи "мутационного" алгоритма и алгоритма АДФ, когда во время обучения НМО подвергались "мутационному" давлению.

На рисунке 5.1.3 представлена общая схема переводов всех структур, выполняющих функцию АЗ и имеющих сигмоидальную переходную характеристику, в структуру "базового" НМО Net 613А3. Маршрут перехода выбран таким образом, чтобы максимальное число ошибочных ответов НМО не превышало 15%, а среднее значение ошибочных ответов равно 11%.

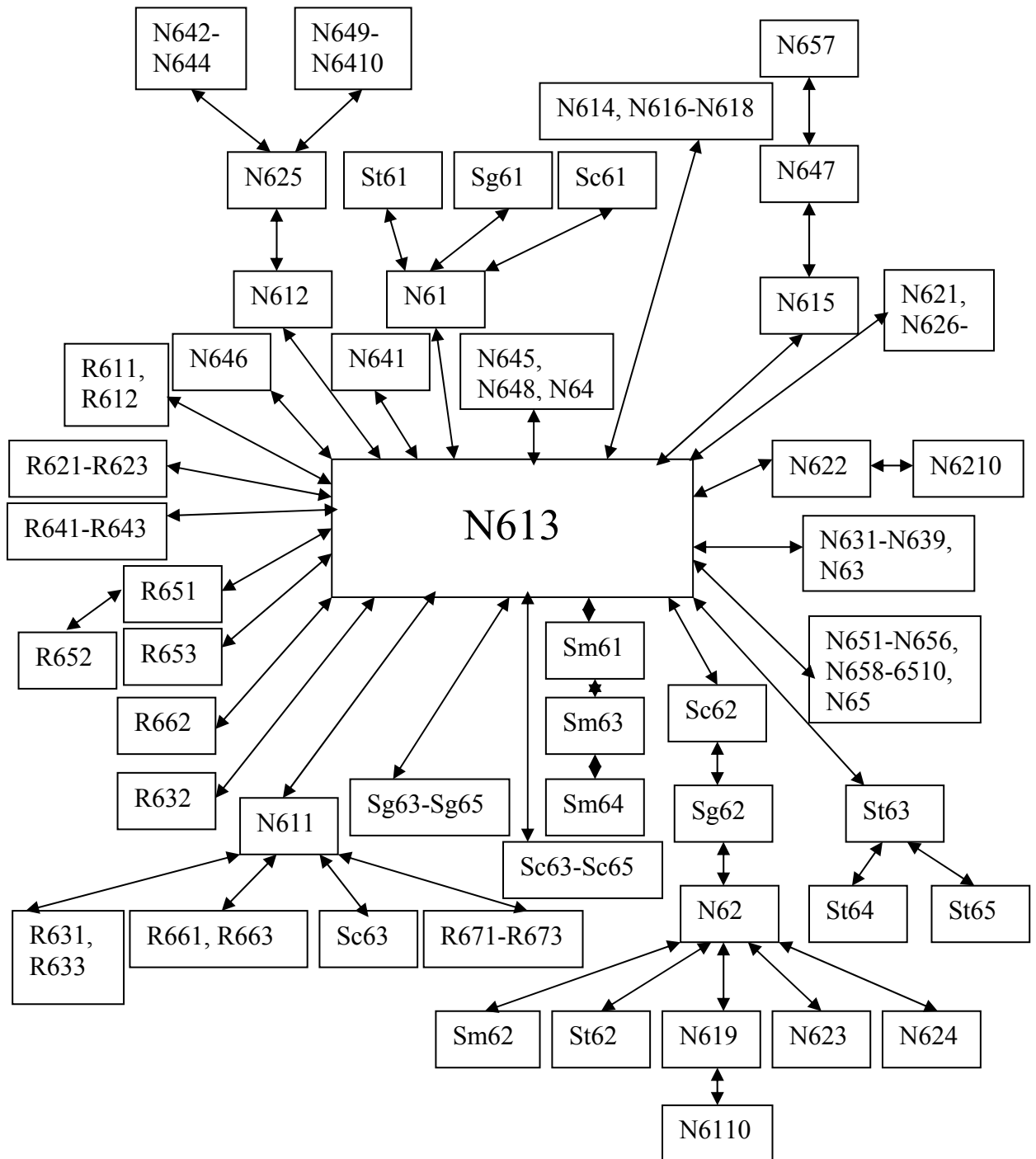


Рис.5.1.3. Схема переходов структур НМО, выполняющих функцию АЗ в структуру "базового" НМО.

Подобные вычислительные эксперименты были проведены и для НМО, обученных выполнению функции С4. Таблицы перевода структур представлены в приложении (Таблицы П50-П52). В данном случае за структуру "базового" НМО произвольным образом выбрана структура НМО Net 621С4.

Общая схема перевода всех структур, выполняющих функцию С4 в структуру "базового" НМО представлена на рис. 5.1.4

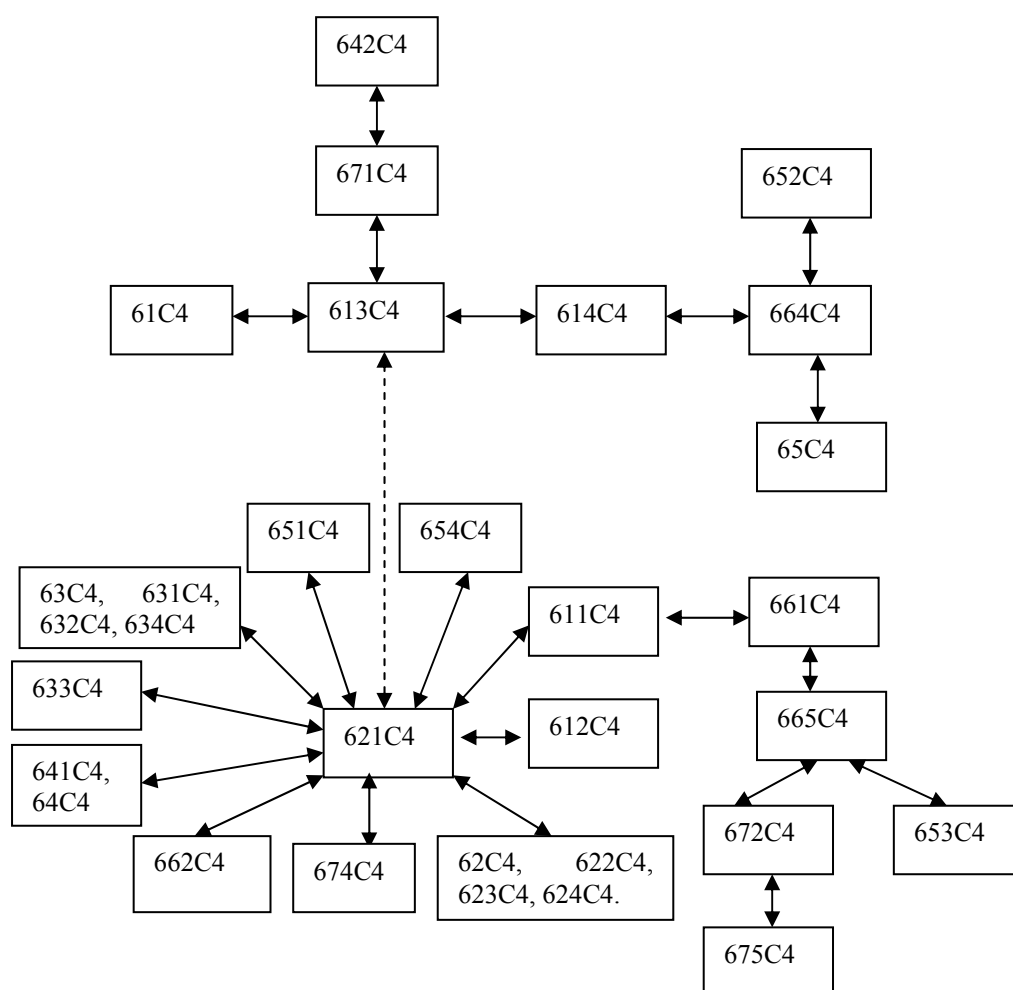


Рис.5.14 Переход структур 6-ти нейронных НМО, выполняющих функцию С4 в структуру "базового" НМО Net 621С4.

Маршрут переходов выбран таким образом, что максимальная ошибка не превышает 20%, а средняя равна 12%. Максимальная ошибка в данном случае выше, чем при переходе структур, выполняющих функцию А3 в структуру "базового" НМО. Это объясняется тем, что число структур, обученных

выполнению функции С4 меньше, чем число структур, обученных выполнению функции А3. Кроме того функция С4 более сложна для нейросети, что должно проявляться в большей неровности гиперповерхности функционирования. Следовательно возможности выбора оптимального маршрута в случае перевода структур, выполняющих функцию С4, в структуру НМО Net 621С4 ограничены.

На рисунке 5.1.4 НМО Net 621С4 и Net 613С4 соединены пунктирной стрелкой. Это означает, что для перевода структур НМО друг в друга недостаточно преобразований ассоциативных нейронов. Для перевода структуры НМО Net 613С4 в Net 613С4 необходима перестановка входных нейронов. Существование этого преобразования объясняется тем, что поступающий сигнал реагирования симметричен. Аналогом может быть симметрия активного центра фермента катализирующего симметричный субстрат. Однако вследствие негрубости такой возможности преобразование входных сигналов в работе специально не рассматривается.

Таким образом, из результатов вычислительных экспериментов следует, что различные структуры, выполняющие одну и ту же функцию, но сформированные независимо друг от друга по индивидуальным траекториям при помощи конечного числа преобразований сводятся к одной структуре.

Возникает вопрос: связана ли эта возможность перевода структур друг в друга с тем, что НМО выполняют одну и ту же функцию и возможны ли такие переходы структур друг в друга для НМО, выполняющих разные функции? Для этого, описанные выше преобразования были применены к структурам НМО, выполняющим различные функции А3 и С4. Примеры применения преобразований к структурам НМО, выполняющим функции А3 и С4, приведены в приложении в таблицах П53-П55. Оказалось, что для некоторых пар НМО применение дискретных преобразований позволяло получить расстояния меньше размера кластера, т.е. точки в пространстве параметров, соответствующие этим структурам могут находиться очень близко друг от друга, но структуры, выполняющие различные функции не сводятся друг к

другу. Отсюда следует вывод, что пространство весовых коэффициентов НМО имеет сложное устройство, оно плотно заполнено различными функциями. На основании результатов сведения структур НМО друг к другу и вида трехмерного разреза гиперповерхности функционирования (Рис.5.1.1) на рис.5.1.5 условно показана структура пространства параметров, соответствующая кластеру функционирующих НМО.

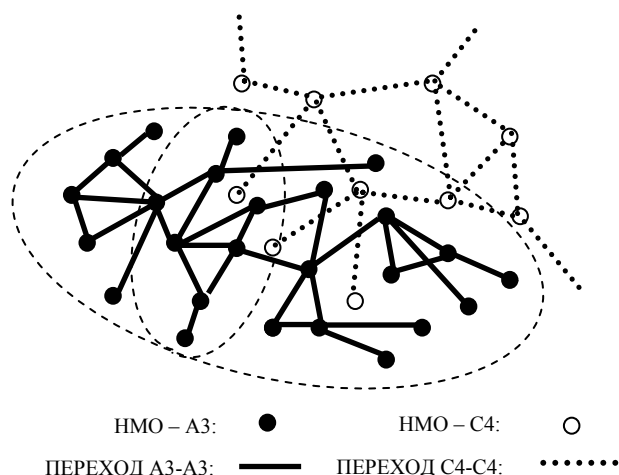


Рис.5.1.5 Схематическое изображение фрагмента структуры пространства весовых коэффициентов НМО, выполняющих функции А3 и С4.

Область пространства параметров, соответствующая структуре НМО, выполняющих данную функцию (т.е. кластер), представляет собой связную систему "кратовых нор", внутри которых качество функционирования остается постоянным. "Кратовые норы", соответствующие структурам, выполняющим разные функции, могут переплетаться, то есть может происходить совмещение кластеров без их соприкосновения.

Обнаруженная сложная структура пространства структурных параметров: кластеры и их взаимопроникновение, отражающее плотность этого пространства, аналогична свойствам "пространства последовательностей" вторичных структур РНК. (Huynen *et. al.*, 1996; Fontana, Shuster, 1998b; Shuster, 1996.)

Полученные результаты позволяют сделать следующий вывод: сходство функционирующих структур в пространстве весовых коэффициентов,

выраженное расстоянием между ними, не отражает сходства функций, которые этими структурами реализуются.

Выявленные функциональные инварианты структуры отвечают на вопрос о том, что же сохраняется в структуре нейросети, обеспечивая ее функционирование. Однако количество инвариантов даже простейшей нейросети еще очень велико и возникает вопрос о минимальном наборе инвариантов, обеспечивающих сохранение функции. Очевидно, что для этого нужно получить и исследовать минимальную функционирующую структуру нейросети.

5.2 Анализ минимальных структур, обеспечивающих выполнение данной функции.

Для получения НМО с минимальной структурой уже обученные до заданного качества функционирования нейросети были подвергнуты процедуре контрастирования, описанной во второй главе. Процесс контрастирования сходен с процессом избавления от лишних структур, например, редукцией органов движения, центральной нервной системы и т.д. у плоских и круглых паразитических червей.

Минимальное количество синапсов, которое удалось получить для НМО, выполняющих функцию АЗ равно 11. Причем, это справедливо как для 6 нейронных, так и для 10 нейронных НМО. На рис. 5.2.1 представлены матрицы таких минимальных контрастированных НМО.

$$\text{NET612к=} \begin{pmatrix} 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 \\ 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 \\ 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & -0,113 & 0,099 \\ 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & -0,113 & 0,099 \\ -0,401 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 \\ -0,798 & 0,389 & -0,229 & -0,212 & 0,218 & -0,217 \end{pmatrix}$$

$$\text{NET611к=} \begin{pmatrix} 0,000 & 0,206 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 \\ 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,213 \\ 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & -0,077 & 0,061 \\ 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & -0,077 & 0,061 \\ -0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,412 & 0,035 \\ -0,710 & 0,589 & -0,000 & -0,000 & 0,775 & -0,000 \end{pmatrix}$$

$$\text{NET1031A3к} = \begin{pmatrix} 0,000 & 0,246 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 \\ 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & -0,386 \\ 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,062 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,077 \\ 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,062 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,077 \\ 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 \\ -0,623 & 0,563 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & -0,742 \\ 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 \\ 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 \\ 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 \\ 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & -0,042 & 0,000 & 0,000 & 0,000 & 0,450 \end{pmatrix}$$

Рис. 5.2.1 Результаты контрастирования 6 и 10 нейронных НМО, выполняющих функцию АЗ (АДФ, сигмоидальная переходная характеристика).

Следует отметить, что такое количество синапсов достаточно для качественного функционирования НМО, но не достаточно для обучения. Многочисленные попытки обучить нейросети, имеющие данное количество синапсов, величина которых задавалась генератором квазислучайных чисел, соответствующим функциям, окончились неудачей даже при сохранении знаковой структуры весовых коэффициентов обученного НМО. Таким образом, речь идет именно о минимальной *функционирующей* структуре.

Оказалось, что контрастированную НМО можно свести к обычным "полным" НМО и обратно с помощью тех же трех преобразований. Нужно, однако, заметить, что контрастированные НМО непосредственно друг в друга переходить не могут, т.е., например, НМО Net 612A3к при помощи описанных выше преобразований не переводится в НМО Net 611A3к, переход возможен только через их "полные" нативные прототипы.

Если из матрицы контрастированного НМО Net 1031A3 исключить недействующие нейроны, то есть содержащие только нули строки и столбцы с одинаковыми номерами, то получится матрица размером 6×6. Можно видеть, что перестановка ассоциативных нейронов и перемена знака у одного из них приводит к матрице почти совпадающая с матрицей контрастированного НМО Net 611A3 (см. рис.5.2.1). Затем непрерывное преобразование легко сводит одну матрицу к другой. Полученный результат иллюстрируется схемой цепочки переходов, представленной на рис.5.2.2.

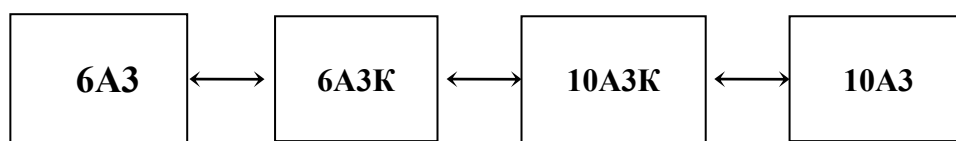


Рис.5.2.2 Цепочка обратимых переходов от нативных 6 нейронных структур к 10 нейронным через редукцию структуры (контрастирование).

Результаты перевода структур контрастированных НМО друг в друга представлены в приложении в таблице П56.

Следовательно, с помощью конечной комбинации простых преобразований, нейросети, выполняющие одну и ту же функцию и состоящие из разного числа нейронов могут быть сведены друг к другу. То есть, обнаруженные симметрии структуры НМО относительно функции, позволяют рассматривать все нейросети, выполняющие данную функцию как одну и ту же нейросеть. Это означает, что любые параметры структуры нейросетей, которые ассоциируются с функцией, например, сложность, должны считаться идентичными вне зависимости от числа нейронов, но при условии сходства переходных характеристик нейронов, то есть при идентичной природе элементов систем. Важно подчеркнуть, что это одна и та же нейросеть относительно функционирования. Другие показатели, естественно, могут различаться.

Результаты и выводы главы.

1. Показано, что с помощью комбинации трех типов преобразований: смены знака, перестановки нейронов и параллельного переноса в многомерном пространстве относительно пространственной прямой можно осуществить перевод структуры любой нейросети в структуру другой нейросети, выполняющей ту же функцию, при условии, что нейросети имеют одинаковый объем и переходную характеристику.
2. Это же справедливо и для нейросетей разного объема при использовании процедуры контрастирования.

3. Показано, что пространство весовых коэффициентов НМО имеет сложное строение, оно плотно заполнено различными функциями.
4. Сходство функционирующих структур в пространстве весовых коэффициентов, выраженное расстояниями между ними, не отражает сходства функций, которые реализуются этими структурами.

ГЛАВА 6. АНАЛОГИИ МЕЖДУ СВОЙСТВАМИ НМО И ДРУГИМИ СИСТЕМАМИ, ВОЗНИКШИМИ ЭВОЛЮЦИОННЫМ ПУТЕМ.

НМО в данной работе являлись моделями для изучения отношений между структурой и функцией систем, возникших эволюционным путем. Исходя из этого, некоторые выводы, относительно свойств нейронных сетей, могут быть перенесены на реальные системы в той мере, в какой они соответствуют сетевому описанию. По крайней мере, эти выводы могут иметь вид предположений или гипотез о свойствах реальных систем. Для этого важно выделить те свойства, которые являются общими для широкого класса систем или допускают ясную интерпретацию или прямую аналогию. Рассмотрим аналогии между обнаруженными в вычислительных экспериментах свойствами НМО и свойствами других эволюционно возникших систем.

1. Из результатов вычислительных экспериментов, рассмотренных в третьей главе, следует, что одну и ту же функцию с одинаковым качеством могут выполнять различные структуры НМО. Этот результат соответствует данным по абиогенному синтезу (Фокс, 1996), где макромолекулы, с совершенно различными структурами, имеют одинаковую ферментативную активность. Это так же согласуется с данными о том, что структурно не родственные ферменты катализируют реакцию с использованием молекулярного кислорода и множество различных ферментов, осуществляют гидролиз пептидной связи (Уайт, 1981). Близкий результат получен в работах по вычислительному моделированию формирования вторичных структур РНК (Fontana, Schuster, 1998a; Fontana, Schuster, 1998b; Schuster, 1996). В этих работах, первоначально проводившихся на реальных последовательностях РНК, изучались отображения нуклеотидной последовательности в фенотип (первичной структуры во вторичную). Затем аналогичные исследования проводились при использовании вычислительной модели мутационного процесса РНК длиной 70 нуклеотидов. На компьютере моделируется

сворачивание РНК во вторичную структуру, которая и считается фенотипом. За наиболее "приспособленную" вторичную структуру произвольно выбрана одна из возможных конфигураций. На этой компьютерной модели получены данные о неоднозначном соответствии фенотипа генотипу (функции структуре), то есть различные первичные структуры образовывали одинаковые вторичные структуры.

2. В третьей главе так же показано, что в пространстве параметров, структуры, выполняющие соответствующие функции, расположены не диффузно, а образуют скопления или кластеры, причем кластеры, сформированные структурами, выполняющими разные функции, могут проникать друг в друга, то есть пространство параметров плотно заполнено функционирующими структурами. Обнаруженная сложная структура пространства структурных параметров (кластеры и их взаимопроникновение, отражающее плотность этого пространства) аналогична свойствам "пространства последовательностей" вторичных структур РНК (Huynen *et al.*, 1996; Fontana, Schuster, 1998b; Schuster, 1996). В этом пространстве обнаружены скопления одинаковых вторичных структур РНК, и это пространство к тому же плотно заполнено разными вторичными структурами
3. В работе показано, что существуют структурные преобразования, которые не влияют на способность к выполнению данной функции. Наличие функциональных симметрий нейросетевых структур означает, что не величины отдельных весовых коэффициентов, а сохранение их определенного соотношения – функциональных инвариантов – обеспечивает выполнение данной функции. Это соответствует концепции "коварионов", предложенной Фитчем (Fitch, 1971), и результатам экспериментов по аминокислотным заменам, представленным в работе Яновского с соавторами (Yanofsky *et al.*, 1964).
4. Сохранение функции при преобразованиях перестановки нейронов в эволюционном плане соответствует специфическому расхождению

индивидуальных траекторий организмов в фило- или онтогенезе. Специфичность проявляется в том, что пара элементов системы начинают выполнять функцию другого, обмениваются функциями. Такое преобразование можно назвать сменой предназначения. Наверное, наиболее яркой аналогией смены предназначения является существование двух главных ветвей животного мира – первичноротых и вторичноротых животных (Газарян, Белоусов, 1983).

Обнаружение функциональных инвариантов структуры нейросети порождает еще одну важную аналогию. Обученные нейросети выполняют соответствующую функцию с одинаковым качеством. Естественно возникает вопрос, а существуют ли у этих структур какие-то различия с точки зрения эволюционных возможностей.

Для того чтобы ответить на этот вопрос проводились вычислительные эксперименты, в которых НМО, обученные выполнению одной функции, обучались выполнению другой функции. Переучивание каждой нейросети выполнялось по три раза. В том случае, если нейросеть не обучалась выполнению функции за число шагов равное 3000, считалось, что НМО не переобучилась. Рассмотрим результаты переучивания 6-ти нейронных НМО реализующих функцию А3, выполнению функции С4. Например, из 39 НМО, по одному разу переобучились две нейросети (Net 629 $n=1479$ и Net 62 $n=1487$), а Net 624 переобучилась все три раза: $n_1=176$, $n_2=153$, $n_3=178$, где n - число шагов, за которое произошло переучивание НМО. Таким образом, среди НМО, не различающихся по качеству функционирования, наблюдается резкая дисперсия свойств. При этом близость между структурами НМО не влечет за собой сходства в отношении их свойств. Например, при переучивании тех же НМО выполнению функции С3, нейросети Net 621 и Net 631, расположенные в пространстве параметров достаточно близко друг от друга демонстрируют резко различающиеся результаты: Net 621 $n_1=2146$, $n_2=2167$, $n_3=2131$; Net 631 $n_1=282$, $n_2=263$, $n_3=254$. Таким образом, различия между структурами не мешают выполнению основной функции, но обеспечивают дисперсию свойств,

что может являться существенным преимуществом при изменении условий, в которых функционирует система.

Обнаруженная дисперсия обучаемости НМО, расположенных в разных местах одного и того же кластера, соответствует теоретическим положениям теории нейтральности (Кимура, 1985; Kimura, 1991), представлениям о механизмах ароморфоза (Романовский и др., 1984) и результатам экспериментов по сворачиванию РНК (Huynen *et al.*, 1996; Stadler *et al.*, 2000; Schuster, 1996), которые выявили существование нейтральных сетей в пространстве последовательностей РНК.

Обнаруженные аналогии в свойствах НМО и реальных систем не могут служить основанием механического распространения полученных результатов на эти системы. Эти результаты имеют скорее эвристическое значение. Однако они дают основания сформулировать ряд предположений об общих свойствах биосистем.

1. В пространстве параметров структуры, выполняющие одну и ту же функцию, группируются в обособленные кластеры, внутри которых одна структура может быть трансформирована в другую путем непрерывного изменения параметров структуры.
2. Многовариантность функционирующих структур систем эволюционного происхождения означает, что способов реализации функции под названием жизнь может быть множество.
3. Если функция различных биологических систем одна и та же, то при сходстве элементного состава выбор подходящей симметрии позволит решить проблему сопоставления и воспроизводимости результатов, полученных на разных экспериментальных системах.
4. Учет функциональных симметрий структуры систем, возникших эволюционным путем, позволяет расширить понятие эквивалентности эволюционных исходов.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ.

1. Разработан пакет программ для формирования и исследования ансамблей нейросетевых модельных объектов (НМО), выступающих в качестве феноменологической модели эволюционных исходов.
2. Обучение нейросетей выполнению одной и той же функции приводит к формированию различных структур, даже при сходстве структурных элементов, начальных условий, критериев отбора и параметров внешней среды.
3. Расстояние между структурами нейросетевых модельных объектов, в пространстве параметров не отражает сходства функций, которые эти структуры выполняют. Системы, выполняющие одну и ту же функцию, могут различаться по структуре в той же степени, что и системы, реализующие разные функции.
4. Структуры нейросетевых модельных объектов, выполняющие определенную функцию, распределены в пространстве параметров не диффузно, а образуют скопления или кластеры. Это явление наблюдалось для всех исследованных нейросетей.
5. Существование кластеров обусловлено наличием трех типов симметрий структуры нейросетевых модельных объектов относительно преобразований, сохраняющих функционирование НМО.
6. С помощью одного непрерывного и двух дискретных преобразований, соответствующих обнаруженным функциональным симметриям, структура любого НМО, выполняющего данную функцию, может быть трансформирована в структуру другого НМО с той же функцией.
7. Существование функционального инварианта структуры нейросети, сохраняющегося при обнаруженных преобразованиях, означает эквивалентность исходов процесса обучения вне зависимости от конкретной траектории его реализации.

8. Аналогии между обнаруженными свойствами НМО и свойствами других эволюционно возникших систем допускают, по крайней мере, эвристическое расширение полученных в работе результатов и позволяют рассматривать вышеприведенные выводы как гипотезы о свойствах структурно-функциональных отношений в реальных биологических системах.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ.

Полученные на НМО результаты выходят за рамки нейросетевого моделирования и могут использоваться двояко. С одной стороны, некоторые выводы относительно свойств нейронных сетей могут быть перенесены на реальные системы в той мере, в какой они соответствуют сетевому описанию. По крайней мере, эти выводы могут иметь вид предположений или гипотез о свойствах реальных систем. Об этом говорилось в шестой главе работы, где и сформулированы выводы-гипотезы. С другой стороны, из данной работы можно выделить своего рода алгоритм (пусть и эвристический), позволяющий понижать видимое разнообразие наблюдаемых биологических систем.

В работе показано, что структуры систем, состоящих из элементов одной природы и, выполняющих одну и ту же функцию, в принципе, сводимы к одной структуре. Вопрос в том, как от принципиальной возможности перейти к конкретной процедуре уменьшения разнообразия экспериментальных данных. На данном этапе исследований можно говорить только о проекте такой процедуры, некотором эвристическом алгоритме. Но даже эвристический алгоритм требует априорного обоснования его применимости. Алгоритм является формальной процедурой и это означает, что его можно применять к системам с подходящим этой процедуре формальным описанием.

Это описание должно органично включать структуру, функцию и принцип оптимальности, тесно связанный с понятием целесообразности биологической системы и ее эволюции (Волькенштейн, 1975; Блюменфельд, 1977). Под эволюционным процессом будет пониматься изменение структуры биологической системы в соответствии с некоторым функциональным критерием оптимальности (Forst *et al.*, 1995; Schuster, 1996). По современным представлениям в основе эволюции лежат мутационные процессы и процесс эволюции можно рассматривать как плавное движение по ландшафту

целевой функции приспособленности (Niklas, 1994, Huynen *et al.*, 1996; Schuster, 1996).

То есть первый шаг алгоритма редукции сложности заключается в построении сетевого описания исследуемого класса систем.

Затем к выбранному формальному описанию системы с заданной функцией применяется известная процедура отыскания локальной группы преобразований (Ибрагимов, 1983), позволяющая непрерывным образом сводить одну функционирующую структуру к другой.

Знание вида инфинитезимального преобразования позволяет малыми шагами выделить подмножества сводимых друг к другу структур, выполняющих одну и ту же функцию.

Если выделяется несколько таких подмножеств, то с помощью сравнительного анализа отыскиваются дискретные симметрии относительно преобразований, переводящих эти подмножества в одно. В ряде случаев дискретные симметрии можно определить по виду формального описания ансамбля исследуемых биосистем. Уже есть примеры отыскания групп преобразований, то есть нахождения некоторого порядка в разнообразии данных для генетических последовательностей и макромолекул (Bellido, 1996; Blundell, Srinivasan, 1996; Zhang, 1997; Sankoff, Blanchette, 1999; Goodsell, Olson, 2000).

Отыскание системы преобразований, сводящих огромное разнообразие, например экосистем, к ограниченному набору типов дало бы возможность объединения существующих разрозненных наблюдений природных экосистем в большие блоки, обеспечивающие высокую степень достоверности, что важно для построения адекватных моделей и надежного прогноза динамики этих систем.

ЛИТЕРАТУРА

1. Барцев С.И., Гилев С.Е., Охонин В.А. Принцип двойственности в организации адаптивных сетей обработки информации. В кн. Динамика химических и биологических систем. Новосибирск: Наука, 1989, с.6-55.
2. Барцев С.И., Охонин В.А. Адаптивные сети обработки информации. Препринт Ин-т физики СО АН СССР, №59Б, Красноярск, 1986, 20 с.
3. Барцев С.И., Охонин В.А. Адаптивные сети, функционирующие в непрерывном режиме. В кн. Эволюционное моделирование и кинетика. Новосибирск: Наука, 1992, с. 24- 30.
4. Бернал Дж.Д. Молекулярная структура, биохимическая функция и эволюция. В кн: Теоретическая и математическая биологии. М.: Мир, 1968, с.110-151.
5. Блюменфельд Л.А. Проблемы биологической физики. М.: Наука, 1977, 336 с.
6. Вейль Г. Симметрия. М.: Наука, 1969, 191с.
7. Волькенштейн М.В. Молекулярная биофизика. М.: Наука, 1975, 616 с.
8. Волькенштейн М.В. Общая биофизика. М.: Наука, 1978, 590 с.
9. Газарян К.Г., Белоусов Л.В. Биология индивидуального развития животных. М.: Высшая школа, 1983, 287с.
10. Глотов И.В., Животинский Л.А., Хованов И.В. и др. Биометрия. Л.: изд-во ЛГУ, 1982, 264 с.
11. Голованов И. Б., Иваницкий Г. Р., Цыганкова И.Г. Простая форма корреляционного соотношения и физико-химический смысл входящих в него параметров. // ДАН, 1998, т.359, №2, с. 258-262.
12. Горбань А.Н. Обучение нейронных сетей. М.:СП ПараГраф, 1990, 159 с.
13. Горбань А.Н. Обобщенная аппроксимационная теорема и вычислительные возможности нейронных сетей. // Сиб. Журн. Вычисл. Математики. РАН Сиб. Отд-ние, Новосибирск, 1998, т.1, №1, с.11-24.
14. Ибрагимов Н.Х. Группы преобразований в математической физике. М.: Наука, 1983, 280 с.

15. Кастлер Г. Возникновение биологической организации. М.: Мир, 1967, с. 90.
16. Кимура М. Молекулярная эволюция: теория нейтральности. М.: Мир, 1985, 396 с.
17. Лакин Г.Ф. Биометрия М.: Высшая школа, 1980, 293 с.
18. Лима-де-Фариа А. Эволюция без отбора. Автоэволюция формы и функции. М.: Мир, 1991, 455с.
19. Любищев А.А. О критериях реальности в таксономии. В сб.: Информационные вопросы семиотики, лингвистики и автоматического перевода. М., ВИНТИ, 1971, вып.1, с. 67-82.
20. Мандель И.Д. Кластерный анализ М.: Финансы и статистика, 1988, 176с.
21. Мармарелис П., Мармарелис В. Анализ физиологических систем. М.: Мир, 1981, 480 с.
22. Мейен С.В. О соотношении номогенетического и тихогенетического аспекта эволюции. // Журнал общей биологии, 1974, т. XXXV, №3, сс.353-364.
23. Мейен С.В., Соколов Б.С., Шрейдер Ю.А. Классическая и неклассическая биология. Феномен Любищева. // Вестник АН СССР, 1977, №10, сс.112-125.
24. Мейен С.В. Основные аспекты типологии организмов. // Журнал общей биологии, 1978, т. XXXIX, №4, сс.495-509.
25. Мецлер Д. Биохимия. М.: Мир, т.2., 1980а, 606 с.
26. Мецлер Д. Биохимия. М.: Мир, т.3., 1980б, 488 с.
27. Моровиц Г. Исторический очерк. В кн.: Теоретическая и математическая биология. М.: Мир, 1968, с.34-48.
28. Николис Г., Пригожин И. Самоорганизация в неравновесных системах. М.: Мир, 1979, 512 с.
29. Охонин В.А. Вариационный принцип в теории адаптивных сетей. Красноярск, 1987, 18 с. (Препринт АН СССР. Сиб. Отделение. Ин-т физики; № 61Б).
30. Петухов С.В. Биомеханика, бионика и симметрия. М.: Наука, 1981, 240 с.
31. Печуркин Н.С. Энергетические аспекты развития надорганизменных систем. Новосибирск: Наука, 1982, 113с.

32. Печуркин Н.С. Энергия и жизнь. Н.: Наука, Сибирское отделение, 1988, 189 с.
33. Попов Е.М. Структурная организация белка. М.: Наука, т.3 из пятитомника "Проблема белка", 1997, 604 с.
34. Рашевский Н. Модели и математические принципы в биологии. В кн.: Теоретическая и математическая биология. М.: Мир, 1968, сс.48-66.
35. Розен Р. Принципы оптимальности в биологии. М.: Мир, 1969, 216 с.
36. Романовский Ю.М., Степанова Н.В., Чернавский Д.С. Математическая биофизика. М.: Наука, 1984, 304 с.
37. Уайт А., Хендлер Ф., Смит Э., Хилл Р., Леман И. Основы биохимии. М.: Мир, 1981, т.2, 617с.
38. Урманцев Ю.А. Поли - и изоморфизм в живой и неживой природе. // Вопросы философии, 1968, №12, с.77-88.
39. Урманцев Ю.А. Симметрия природы и природа симметрии. М.: Мысль, 1974, 229 с.
40. Урманцев Ю.А. Что может дать биологу представление как системы в системе объектов того же рода? // Журнал общей биологии, 1978, т.39, №5, с. 699-718.
41. Философский энциклопедический словарь. М.: Сов. энц., 1989, 603 с.
42. Фокс С. Происхождение предбиологических систем. М.: Мир, 1966, 362 с.
43. Фон Нейман Дж., закончено и отредактировано А. Бёрксом. Теория самовоспроизводящихся автоматов. М.: Мир, 1971, 382 с.
44. Хан Т., Шапиро С., Статистические модели в инженерных задачах, М.: Наука, 1975, 107 с.
45. Хорн Р., Джонсон Ч. Матричный анализ. М.: Мир. 1989, 655 с.
46. Худсон Д., Статистика для физиков., М.:Мир, 1967, 242 с.
47. Шпаков А.О. Внутренняя симметрия зеркального типа в нуклеотидных последовательностях генов, кодирующих различные классы белков. // ДАН, 2001, т.377, №2, с. 273-276.

- 48.Эйген М. Самоорганизация материи и эволюция биологических макромолекул М.: Мир, 1973, 216.
- 49.Albert R., Jeong H., Barabasi A. Error and attack tolerance of complex networks. // Nature, 2000,406, pp. 378-382.
- 50.Amaral L.A.N., Scala A., Barthelemy M., Stanley H.E. Classes of small-wold networks. // Proc. Natl. Acad. Sci., 2000, v.97, №21, pp.11149-11152.
- 51.Barabasi A.L., Reka A. Emergence of Scaling in Random Networks. // Science, 1999, v.286, pp. 509-512.
- 52.Bartsev S.I., Okhonin V.A., Variation principle and the algorithm of dual functioning: examples of applications, in "Neurocomputers and Attention", Manchester Univ. Press, 1991, pp.445-452.
- 53.Bartsev S.I., Okhonin V.A., Self-learning neural networks playing "Two coins", in "Neurocomputers and Attention", Manchester Univ. Press, 1991, pp.453-458.
- 54.Belido A.G. Symmetries Throughout organic evolution. // Proc. Natl. Acad. Sci., 1996, v.93, pp. 14229-14232.
- 55.Blundell T.L., Srinivasan N. Symmetries, stability, and Dynamics of multidomain and multicomponent protein systems. // Proc. Natl. Acad. Sci., 1996, v.93, pp. 14243-14248.
- 56.Derome J.R. Biological similarity and group theory. // J. Theor. Biol., 1977, v.65, №2, pp. 366-378.
- 57.Ermentrout G.B. and Edelstein-Keshet L. Cellular automata approaches to biological modeling.// Journal of Theoretical Biology, 160:97-133, 1993.
- 58.Fitch W.M. Rate of change of concomitantly variable codons. //J. Mol. Evol., 1971, v.2, P. 84-96.
- 59.Fontana W., Shuster P. Continuity in Evolution: jn the Nature of Transition. // Science, 1998a, v. 280, pp. 1454-1455.
- 60.Fontana W. and Shuster P. Shaping Space: The Possible and the Attainable in RNA Genotype-Phenotype Mapping. // J. Theor. Biol., 1998b, №194, pp. 491-515.

61. Forst C.V., Reidys C., Weber J. Evolutionary Dynamics and Optimization. // *Advances in Artificial Life*, v.929, pp.128-147, 1995.
62. Goodsell D.S., Olson A.J. Structural symmetry and protein function. // *Annu Rev. Biophys. Biomol. Struct.*, 2000, no. 29, pp. 105-153.
63. Grossberg S. Nonlinear neural networks: principles, mechanisms, and architectures. // *Neural Network*, v.4, 1988, pp. 17-61.
64. Hopfield J.J. Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities. // *Proc. Nat. Acad. Sci. USA*, v.79, 1982, pp.2554-2558.
65. Huynen M.A., Stadler P.F., Fontana W. Smoothness within ruggedness: The role of neutrality in adaptation. // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* v.93, pp.397-401, 1996.
66. Kimura M. Recent development of the neutral theory viewed from the Wrightian tradition of theoretical population genetics. // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 1991, v.88, pp. 5969-5973.
67. Kohonen T. Self-organized formation of topologically correct feature maps. // *Biol. Cybern.*, #43, 1982, pp.59-69.
68. Jeong H., Mason S.P., Barabasi A.L., Oltvai Z.N. Lethality and centrality in protein networks. // *Natura*, 2001, 411, pp. 41-42.
69. Jeong H., Tombor B., Albert R., Oltvai Z.N., Barabasi A.L. The large-scale organization of metabolic networks. // *Natura*, 2000, 407, pp.651-654.
70. Niklas K.J. Morphological evolution through complex domains of fitness. // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, v.91, pp. 6772-6779, 1994.
71. Partridge D., Yates W. B. Replicability of Neural Computing Experiments. // *Complex Systems* 1996, №10, pp. 257-281.
72. Reidys C. M., Stadler P. F. Combinatorial Landscapes. // Tech. report # 01-03-013, Santa Fe Institute, 2001, 42p.
73. Rumelhart D.E., Hinton G.E., Williams R.G. Learning representations by back-propagating errors. // *Nature*, v.323, 1986, pp.533-536.
74. Sanjay J. and Sandeep K. A model for the emergence of cooperation, interdependence, and structure in evolving networks. // *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 2001, v. 98, №2, pp. 543-547.

- 75.Sankoff D., Blanchette M. Phylogenetic Invariants for Genome Rearrangements.// J. Computational Biology, 1999, v. 6, №3/4, pp. 431-445.
- 76.Schuster P., How does Complexity Arise in Evolution? // Complexity, 1996, №2, pp.22-30.
- 77.Sipper M. Non-Uniform Cellular Automata: Evolution in Rule Space and Formation of Complex Structures. In R. A. Brooks and P. Maes, editors, *Artificial Life IV*, pages 394-399, Cambridge, Massachusetts, 1994. The MIT Press.
- 78.Sole R.V., Alonso D. and McKane A. Scaling in Multispecies Network Model Ecosystem. Tech. Report # 99-08-060, Santa Fe Institute, 1999, 11p.
- 79.Stadler B. M. R., Stadler P. F., Wagner G. P., Fontana W. The topology of the possible: Formal spaces underlying patterns of evolutionary change. Tech. Report # 00-12-070, Santa Fe Institute, 2000, 67p.
- 80.Strogatz S.H. Exploring complex networks. // Nature, 2001, v.410, pp. 268-276.
- 81.Stubbs D.F., Entropy and Neural Nets, in "Neurocomputers and Attention", Manchester Univ. Press, 1991, pp.685-694.
- 82.Stubbs D.F. Neurocomputers. // Computing, v.5, №3, 1988, pp.14-24.
- 83.Theodoridis G.C., Anne A., Stark L. On Evolutive Systems and The Initial of Structure and Function. // J. Theor. Biol., 1996, v.178, №1, pp. 61-88.
- 84.Turing A.M. The chemical basis of morphogenesis. // Phil. Trans. Roy. Soc. Of London, Ser. B, 237, 1952, pp.37-72.
- 85.Von Foerster H., Inselberg A., Weston P. Memory and Inductive Inference, Cybernetic Problems in Bionics. Breach Sci. Publ. New York-London-Paris, 1968, pp.31-68.
- 86.Wolfram S. Computational Theory of Cellular Automata. // Communications in Mathematical Physics, 1984a, v.96, pp.15-57.
- 87.Wolfram S., Cellular automata as models of complexity. // Nature, 1984b, v.311 pp.419-424.
- 88.Wolpert D. H., Macready W. G. No Free Lunch Theorems for Search. Santa Fe Institute repot, SFI-TR-95-02-010, 1996.

89. Wolynes P.G. Symmetry and the energy landscapes of biomolecules. // Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 1996, v.93, pp.14249-14255.
90. Yanofsky C., Horn V., Thorpe D., Protein structure relationships revealed by mutational analysis. // Science, 1964, v.146, pp. 1593-1594.
91. Zang C.T. A Symmetrical Theory of DNA Sequences and Its Applications. // J. Theor. Biol., 1997, v.187, №3, pp.297-306.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Параметры различных режимов обучения

Таблица П.1. Параметры различных режимов обучения.

№ режима обучения	доля паузы	доля + сигнала	шаг приращения
1	0.5	0.5	0.003
2	0.5	0.5	0.002
3	0.5	0.5	0.001
4	0.4	0.5	0.003
5	0.6	0.6	0.003
6	0.6	0.5	0.003
7	0.3	0.7	0.003
8	0.7	0.4	0.003
9	0.5	0.3	0.003
10	0.5	0.2	0.003

Значения коэффициентов корреляции НМО.

Таблица П.6. Значения коэффициентов корреляции 5 нейронных НМО, обученных выполнению функции АЗ, при различных условиях обучения от init51

	513	514	515	516	517	518	5110
511	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99	0,96	0,08
514			0,99	0,99	0,99	0,94	0,06
515				0,99	0,98	0,94	0,06
516					0,98	0,96	0,07
517						0,92	0,06
518							0,11

Таблица П.7. Значения коэффициентов корреляции 5 нейронных НМО, обученных выполнению функции АЗ, при различных условиях обучения от init52

	522	523	524	525	526	527	528	529	5210
521	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99	0,97	0,99	0,93
522		0,99	0,99	0,99	0,99	0,99	0,98	0,99	0,95
523			0,99	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99	0,95
524				0,99	0,99	0,99	0,97	0,99	0,93
525					0,99	0,99	0,99	0,99	0,95
526						0,99	0,99	0,99	0,96
527							0,96	0,99	0,94
528								0,96	0,96
529									0,95

Жирным шрифтом выделены значения коэффициентов корреляции, превышающие критические.

Таблица П.8. Значения коэффициентов корреляции 5 нейронных НМО, обученных выполнению функции АЗ, при различных условиях обучения от init53

	534	535	536	537
531	0,99	0,99	0,99	0,97
534		0,99	0,99	0,98
535			0,99	0,97
536				0,96

Таблица П.9. Значения коэффициентов корреляции 5-ти нейронных НМО, обученных выполнению функции АЗ, при различных условиях обучения от init 54.

№ сети	541	544	545	546	547	548	5410
INIT54	-0.06	-0.07	0.04	0.24	0.20	0.28	0.08
541		0.998	0.952	0.200	0.788	0.331	0.872
544			0.955	0.197	0.796	0.320	0.877
545				0.299	0.880	0.446	0.917
546					0.357	0.962	0.183
547						0.492	0.875
548							0.335

Таблица П.10. Значения коэффициентов корреляции 5 нейронных НМО, обученных выполнению функции АЗ, при различных условиях обучения от init55

	552	554	555	556	557	558	5510
551	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99	0,94	0,10
552		0,99	0,99	0,99	0,99	0,94	0,09
554			0,99	0,99	0,99	0,93	0,10
555				0,99	0,99	0,92	0,09
556					0,98	0,95	0,10
557						0,88	0,09
558							0,15

Из таблицы П.6. получаем, что нейросети образуют две группы. В первую группу попадают НМО 511, 513-518; во вторую - 5110. Из таблицы П.9. получаем, что нейросети образуют так же две группы. В первую группу попадают НМО 541, 544, 545, 547, 5410; во вторую - 546, 548. Из таблицы П.10. следует, что нейросети образуют так же две группы. В первую группу попадают НМО 551, 553-558; во вторую - 5510.

Затем сравнивалось “портретное” сходство структур, происходящих от различных “родительских” нейросетей. Из потомков каждой родительской нейросети выбиралось по одному представителю от различных групп. Результаты, полученные для 5-нейронных сетей, представлены в таблице П.11.

Таблица П.11. Значения коэффициентов корреляции для НМО различных групп.

	5110	521	531	541	546	551	5510
516	0.07	-0.3	0.991	0.14	0.83	0.989	0.09
5110		-0.63	0.054	-0.294	-0.098	0.07	0.992
521			-0.294	-0.015	-0.246	-0.275	-0.600
531				0.14	0.85	0.976	0.07
541					0.2	0.14	-0.306
546						0.818	-0.099
551							0.100

Выделив три портретно различных структуры у 5нейронных сетей, интересно сравнить их матрицы весов синапсов. Эти данные представлены в таблицах П.12., П.13, П.14.

Таблица П.12. Синапсы нейросети 521

0.134	0.216	-0.001	-0.013	<i>0.041</i>
0.154	-0.013	0.060	0.014	<i>0.093</i>
0.061	-0.003	0.001	-0.006	<i>0.076</i>
0.058	0.000	0.026	0.032	<i>0.076</i>
-0.555	0.405	-0.165	-0.157	-0.173

Таблица П.13. Синапсы нейросети 516

-0.046	-0.574	0.465	0.435	<i>-0.693</i>
-0.089	0.026	-0.002	0.013	<i>-0.135</i>
-0.046	0.020	-0.01	-0.012	<i>-0.048</i>
-0.046	0.019	-0.015	-0.007	<i>-0.049</i>
-0.082	-0.267	<i>0.114</i>	<i>0.122</i>	-0.104

Таблица П.14. Синапсы нейросети 541

-0.057	-0.595	0.425	0.466	<i>0.721</i>
-0.085	0.034	0.011	-0.020	<i>0.111</i>
-0.051	0.021	-0.101	0.085	<i>0.054</i>
-0.052	0.021	-0.023	0.009	<i>0.054</i>
0.082	0.273	<i>-0.060</i>	<i>-0.145</i>	-0.103

Жирным шрифтом обозначены величины, имеющие практически одинаковые значения, жирным курсивом обозначены величины практически одинаковые, но имеющие противоположные знаки, курсивом обозначены

величины имеющие близкие значения, но противоположные знаки в соответствующих местах, приведенных таблиц. Из анализа таблиц следует что, несмотря на некоторые портретные различия, структуры нейросетей 516 и 541 практически совпадают с точностью до знака. Структура нейросети 521 не имеет такого сходства.

Распределение синапсов НМО.

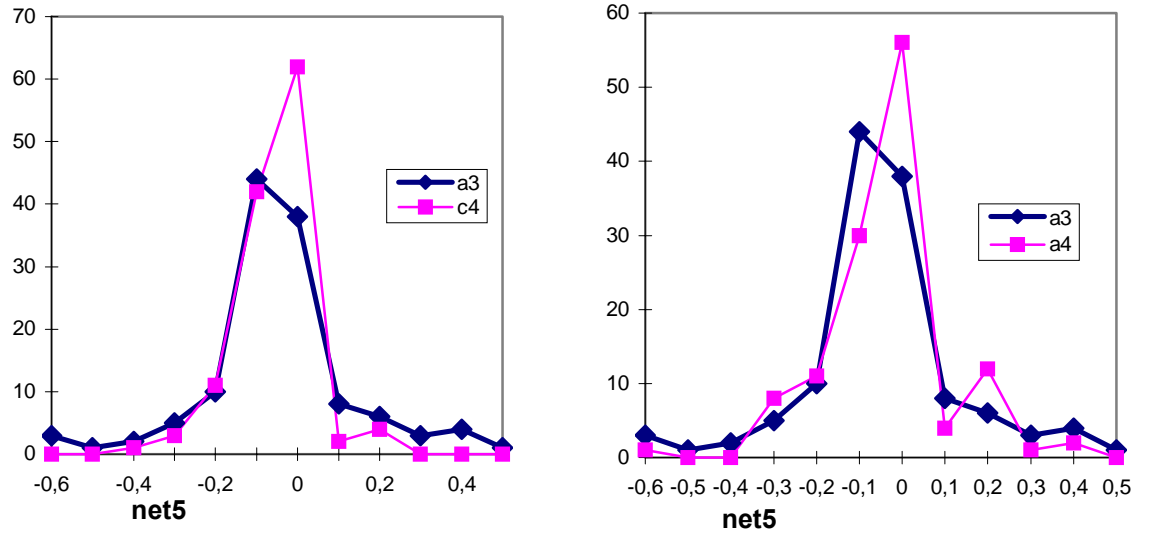


Рис. П.1. Распределение синапсов 5-ти нейронных НМО, выполняющих функции А3, А4, С4.

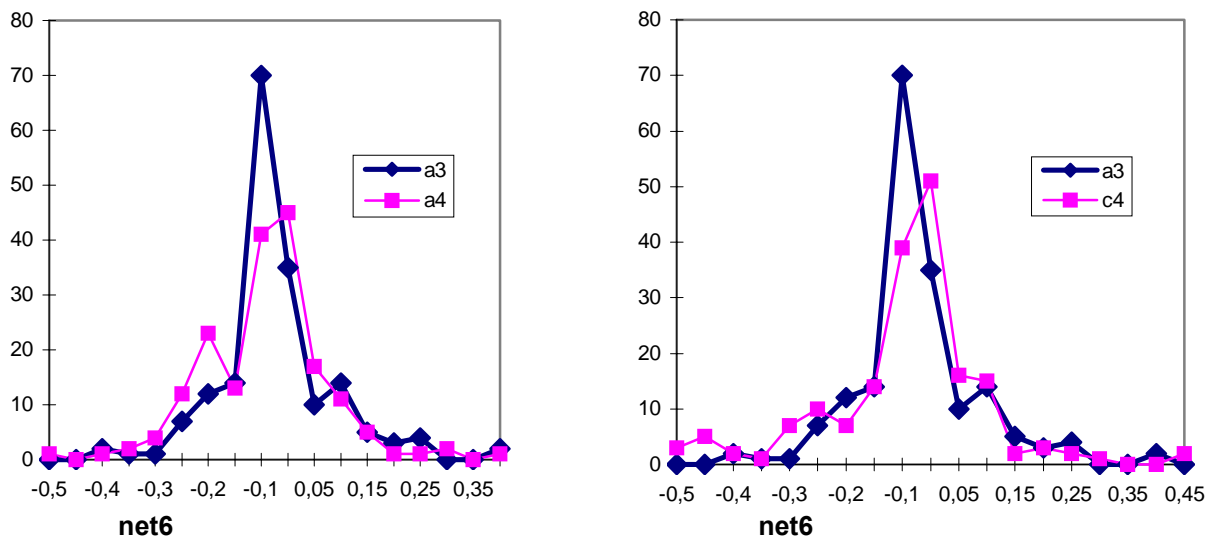


Рис.П.2. Распределение синапсов 6-ти нейронных НМО, выполняющих функции А3, А4, С4.

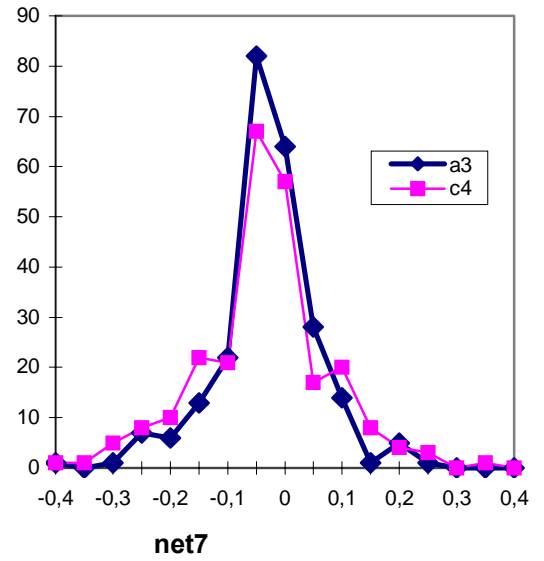
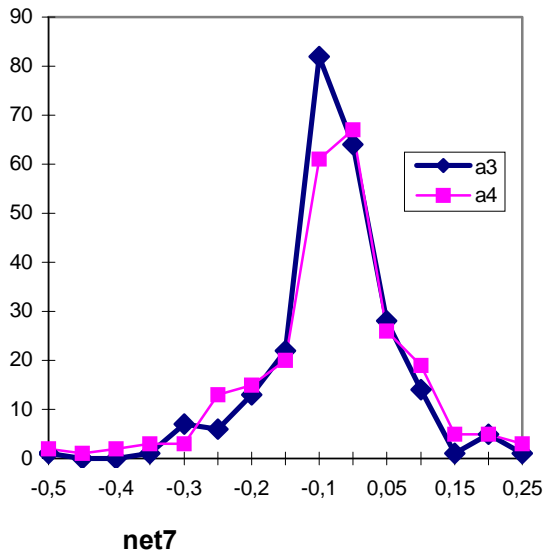


Рис. П.3. Распределение синапсов 7-ми нейронных НМО, выполняющих функции А3, А4, С4.

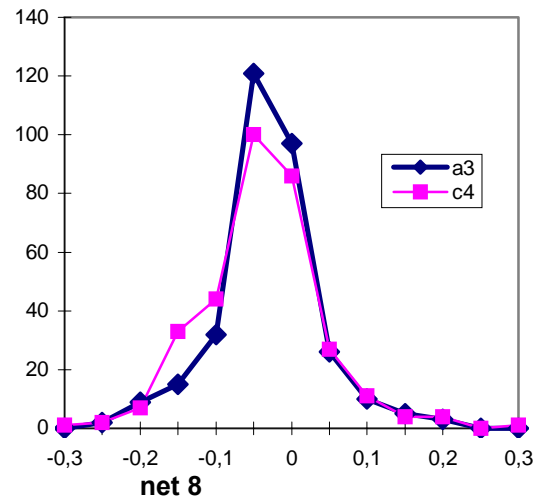
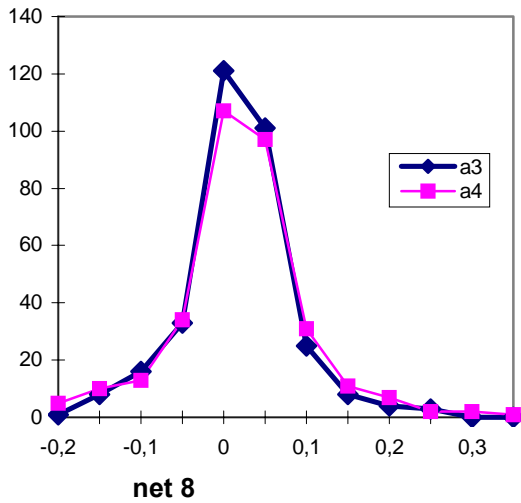


Рис. П.4. Распределение синапсов 8-ми нейронных НМО, выполняющих функции А3, А4, С4.

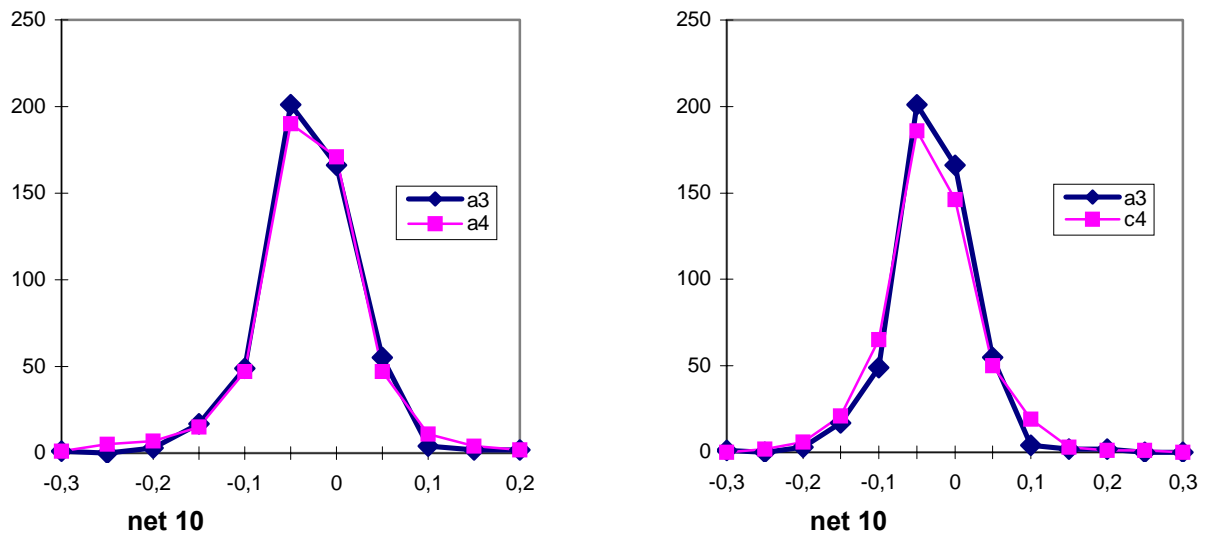


Рис.П.5. Распределение синапсов 10-ти нейронных НМО, выполняющих функции А3, А4, С4.

Сравнение матриц НМО.

В таблицах П15 - П20 приведены примеры нахождения собственных значений для матриц, соответствующих нейросетям, выполняющим одинаковые и разные функции (алгоритм АДФ, сигмоидальная переходная характеристика).

Таблица П15

Матрица весовых коэффициентов и собственные значения НМО 611А3.

-0.005	0.024	0.02	-0.032	0.032	0.057	$0.086 + i0.121$
0,002	0.036	-0,006	-0.033	-0.035	0.079	$0.086 - i0.121$
-0,002	-0,006	0.026	-0.024	-0.129	0.118	$-0.07 + i0.081$
-0,001	-0,003	0.062	-0.064	-0.124	0.115	$-0.07 - i0.081$
-0.202	-0,008	0.022	-0.025	0.093	0.048	-0.014
-0.293	0.212	-0.12	-0.123	0.303	-0.105	-0.038

Таблица П16

Матрица весовых коэффициентов и собственные значения НМО 613 А3.

3E-3	4E-3	0.031	-0.031	0.022	0.065	$0.069 + i0.137$
0.023	0.043	-0.015	-0.02	-0.03	0.069	$0.069 - i0.137$
2E-3	-9E-3	0.073	-0.077	-0.127	0.12	0.009
-4E-3	2E-3	0.11	-0.119	-0.117	0.125	$-0.069 + i0.054$
-0.187	-0.068	0.013	-0.025	0.025	0.051	$-0.069 - i0.054$
-0.209	0.178	-0.114	-0.114	0.271	-0.098	-0.083

Таблица П17

Матрица весовых коэффициентов и собственные значения НМО 628А3.

-0.019	0.04	-0.024	-0.001	0.054	0.033	$0.095 + i0.112$
-0.009	0.027	-0.027	-0.019	0.085	-0.032	$0.095 - i0.112$
-0.001	-0.002	-0.029	0.011	0.108	-0.115	$-0.069 + i0.087$
0.003	-0.004	-0.017	0.001	0.109	-0.117	$-0.069 - i0.087$
-0.301	0.202	-0.107	-0.095	-0.041	0.215	-0.032
-0.24	0.004	0.004	0.016	0.1	0.07	-0.011

Таблица П18.

Матрица весовых коэффициентов и собственные значения НМО 632А3.

-0.041	0.085	-0,003	-0.03	-0.095	-0.042	
-0.023	0.046	-0.043	-0.018	-0.045	-0.048	0.139 + i0.09
-0,001	-0,001	-0.041	0.02	0.123	-0.115	0.139 - i0.09
-0,001	-0,002	-0.034	0.014	0.126	-0.115	-0.035 + i0.127
0.189	-0.027	0.029	0,001	0.162	0.101	-0.035 - i0.127
0.271	-0.174	0.092	0.106	0.227	0.012	-0.051
						-0.006

Таблица П19

Матрица весовых коэффициентов и собственные значения НМО 6310А3.

-0.002	0.042	0.017	-0.012	-0.06	-0.003	
0.042	0.155	-0.014	0.000	0.004	-0.069	0,192
0.000	0.002	-0.025	-0.009	0.259	-0.132	-0,053 + i0.086
0.001	0.002	-0.004	-0.03	0.25	-0.126	-0.053 - i0.086
0.092	-0.023	0.044	-0.025	0.01	0.000	-0.022 + i0.039
0.543	-0.315	0.103	0.089	0.252	-0.086	-0.022 - i0.039
						-0.019

Таблица П20

Матрица весовых коэффициентов и собственные значения НМО 627А3.

0.02	1E-3	-5E-3	0.015	7E-3	-0.102	
0.018	0.053	-0.03	-0.015	0.075	-0.123	0.099 + i0.145
0	-4E-3	6E-3	8E-3	0.126	-0.117	0.099 - i0.145
0	-3E-3	0.016	-2E-3	0.125	-0.117	-0.151
0.192	0.031	3E-3	0.011	0.124	5E-3	-0.014 + i0.023
0.261	-0.207	0.134	0.156	0.402	-0.189	-0.014 - i0.023
						-0.008

Таблица П21

Матрица весовых коэффициентов и собственные значения НМО 611С4.

-0.391	-0.23	0.093	0.06	-0.023	-0.077	
-0.031	0.114	-2E-3	-0.015	-0.021	8E-3	-0.36
2E-3	-4E-3	0.02	7E-3	-0.118	-0.106	0.026 + i0.188
2E-3	-4E-3	0.053	-0.026	-0.117	-0.106	0.026 - i0.188
-0.367	-0.062	0.13	0.1	-0.419	-0.368	0.014
0.613	-0.165	-0.031	-0.072	0.394	0.325	-0.053
						-0.029

Таблица П22.

Матрица весовых коэффициентов и собственные значения НМО 612С4.

-0.383	-0.233	0.077	0.068	5E-3	-0.05	-0.363
-0.092	0.076	-0.057	-0.07	2E-3	-0.028	0.054 + i0.18
0	-1E-3	0.036	0.041	-0.141	-0.115	0.054 - i0.18
0	-1E-3	0.044	0.033	-0.141	-0.114	0.002 + i0.038
-0.28	0.016	0.015	7E-3	-0.198	-0.178	0.002 - i0.038
0.727	-0.248	0.13	0.101	0.228	0.178	-0.008

Таблица П23

Матрица весовых коэффициентов и собственные значения НМО 641С4.

-0.427	-0.18	0.011	0.015	-0.075	-0.022	-0.087 + i0.298
-6E-3	0.052	-9E-3	0.019	0.031	0.06	-0.087 - i0.298
-2E-3	-2E-3	0.043	0.043	-0.107	-0.122	-0.335
-2E-3	-2E-3	0.044	0.042	-0.107	-0.121	0.077
0.798	-0.114	0.127	0.066	0.181	0.416	-0.004 + i0.001
-0.388	-0.026	0.055	0.035	-0.247	-0.331	-0.004 - i0.001

Таблица П.30 Фрагмент таблицы сравнения парных расстояний от 7-ми нейронных НМО, полученных от разных *init* (функция АЗ. АДФ, сигмоидальная переходная характеристика).

	722	731	741	751	758
711	0,102	0,107	0,142	0,120	0,129
722		0,139	0,054	0,146	0,111
731			0,145	0,033	0,116
741				0,150	0,128
751					0,113

Таблица П.31 Фрагмент таблицы сравнения парных расстояний от 7-ми нейронных НМО, полученных от разных *init* (функция АЗ. АДФ, сигмоидальная переходная характеристика).

	821	831	837	841	843	846	851
811	0,101	0,105	0,099	0,181	0,140	0,109	0,097
821		0,088	0,092	0,182	0,198	0,107	0,111
831			0,086	0,163	0,195	0,104	0,088
837				0,178	0,175	0,063	0,117
841					0,225	0,176	0,180
843						0,178	0,181
846							0,124

Таблица П.32 Фрагмент таблицы сравнения парных расстояний от 10-ти нейронных НМО, полученных от разных *init* (функция АЗ. АДФ, сигмоидальная переходная характеристика).

	1017	10110	1021	1039	1041	1051
1011	0,071	0,070	0,050	0,076	0,052	0,078
1017		0,038	0,088	0,069	0,081	0,060
10110			0,069	0,069	0,071	0,069
1021				0,072	0,053	0,087
1039					0,067	0,040
1041						0,069

Примеры применения симметричных преобразований к структурам 6-ти нейронных НМО, выполняющим функцию АЗ (сигмоидальная переходная характеристика, АДФ).

Таблица ПЗ4. Результаты применения непрерывных преобразований к структурам НМО, относящимся первому кластеру.

N613 \	N611	N612	N614	N615	N616	N617	N618	N61
d _{нач.}	0,029	0,015	0,027	0,029	0,027	0,053	0,020	0,054
Δ	0,13	0,15	0,16	0,15	0,16	0,30	0,15	0,15
λ	1,05	1,05	1,63	2,06	1,31	1,25	1,0	1,65

Символом Δ обозначена доля ошибочных ответов, которая характеризует степень отклонения хорды, соединяющей точки, соответствующие структурам выбранных НМО, от поверхности наилучшего функционирования, выраженной системой (4.1.4). $\Delta=0,5$ соответствует функционированию необученной сети. В таблице указаны минимальные значения ошибки, которые удастся достичь при таком маршруте переходов. Меньшее значение Δ при переходе нейросети N617 можно получить, если осуществить переход через структуру N61. На рисунке П представлена схема подобного перехода. Значение параметра λ характеризует возможность перевода одной структуры НМО в другую, если $\lambda \geq 1$, то переход возможен, в противном случае структуры НМО не переводятся друг в друга.

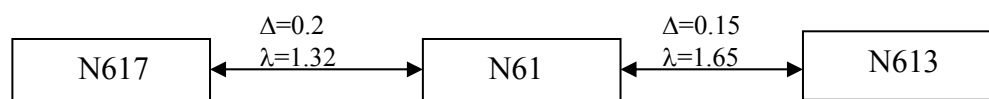


Рис. П.6. Схема перехода структуры N617 в N613.

Поскольку структуры относятся к одному кластеру, дискретные преобразования не применялись. На рисунке использованы двухсторонние стрелки, поскольку переходы возможны в обе стороны.

Таблица П35. Результаты применения непрерывных преобразований к структурам НМО, относящихся ко второму кластеру.

N625 \	N628	N64	N641	N642	N643	N644	N645	N646	N647	N648	N649	N6410
$d_{нач.}$	0,013	0,024	0,037	0,044	0,045	0,023	0,029	0,028	0,051	0,040	0,037	0,035
Δ	0,12	0,14	0,11	0,13	0,17	0,15	0,14	0,11	0,3	0,13	0,14	0,14
λ	2,11	1,56	1,80	1,71	1,36	1,35	1,50	2,59	1,21	1,77	1,60	1,45

В данном случае не удалось найти маршрут перехода, который бы дал меньшее значение ошибки при переходе структуры N647 в N625.

Таблица П.36. Результаты применения непрерывных преобразований к структурам НМО, относящихся к третьему кластеру.

N621 \	N622	N623	N624	N626	N627	N629	N6210	N62	N63	N631
$d_{нач.}$	0,037	0,068	0,100	0,035	0,040	0,067	0,059	0,070	0,024	0,036
Δ	0,11	0,30	0,45	0,25	0,12	0,30	0,50	0,45	0,13	0,12
λ	1,25	1,17	1,19	1,68	1,34	1,17	1,09	1,25	3,58	1,63
N621 \	N632	N633	N634	N635	N636	N637	N638	N639		
$d_{нач.}$	0,028	0,029	0,034	0,031	0,031	0,031	0,032	0,026		
Δ	0,12	0,11	0,13	0,13	0,13	0,13	0,13	0,13		
λ	2,01	1,88	1,97	1,89	2,10	1,92	1,88	1,81		

Ошибки при некоторых переходах можно уменьшить, если использовать маршрут переходов, представленный в таблице П.37.

Таблица П37.

N622 \	N626	N6210	N62 \	N623	N624	N629	N639 \	N623
Δ	0,05	0,15		0,01	0,15	0,01		0,2
λ	1,60	1,02		2,64	1,11	1,83		1,74

Следовательно, процесс перехода структур, относящихся к третьему кластеру в структуру НМО N621 можно представить следующим образом: (рис. П7.).

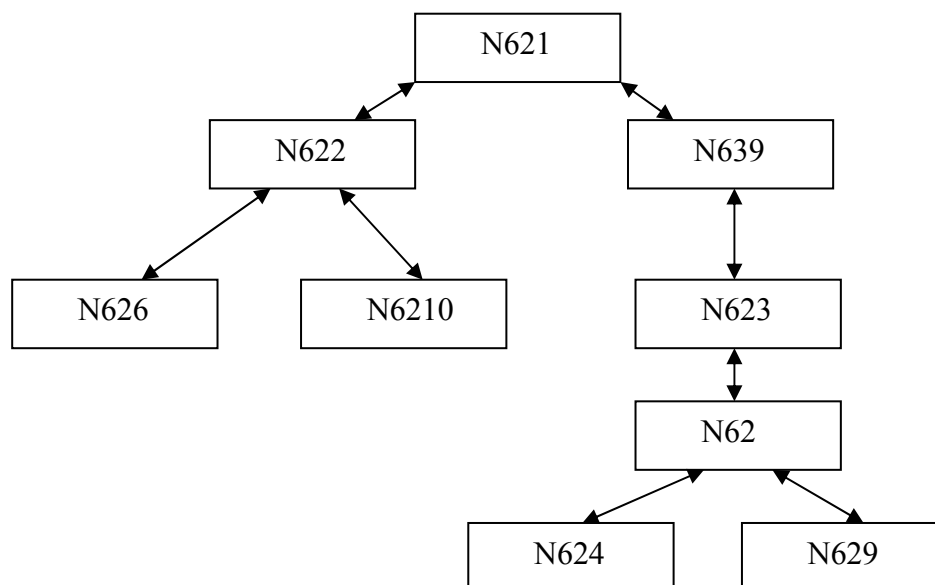


Рис.П.7. Маршрут, уменьшающий отклонения от оптимальной поверхности для структур, относящихся к третьему кластеру.

Таблица П.38. Результаты применения непрерывных преобразований к структурам НМО, относящихся к четвертому кластеру.

651	65	652	653	654	655	656	657	658	659	6510
$d_{нач.}$	0,021	0,015	0,039	0,008	0,023	0,016	0,064	0,021	0,022	0,026
Δ	0,10	0,11	0,20	0,13	0,13	0,10	0,25	0,09	0,09	0,19
λ	1,96	1,15	1,25	1,46	1,35	2,10	1,56	1,80	1,71	1,05

Таблица П.39. Результаты применения непрерывных преобразований к структурам НМО, относящихся к пятому кластеру.

619	6110
$d_{нач.}$	0,009
Δ	0,003
λ	2,17

Таблица П40. Перевод структур НМО, относящихся ко второму кластеру, в структуру "базового" НМО 613 АЗ.

613 \	625	628	641	642	643	644	645	646	647	648	649	6410	64
$d_{нач.}$	0,134	0,125	0,130	0,135	0,129	0,113	0,134	0,130	0,146	0,125	0,126	0,121	0,128
$d_{кон.}$	0,050	0,049	0,055	0,063	0,051	0,045	0,036	0,044	0,065	0,055	0,058	0,055	0,042
знак	++	++	++	++	++	++	++	++	++	++	++	++	++
перес-тка	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да
Δ	0,18	0,15	0,15	0,20	0,20	0,16	0,18	0,12	0,24	0,15	0,16	0,31	0,15
λ	1,6	1,47	1,55	1,46	1,43	1,33	2,00	1,71	1,21	1,54	1,46	1,04	1,69

Если задать условие, что максимальное значение отклонения от наилучшего функционирования не должно превышать 0,2, то необходимо выбрать другой маршрут перехода структур N647 и N6410 в структуру "базовой" НМО N613. Например, маршрут перехода может быть таким как представлено на рисунке П.8.

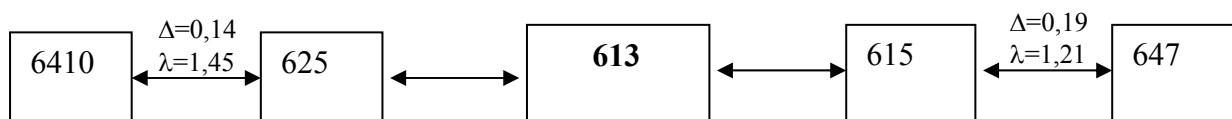


Рис.П.8. Маршрут перевода структур НМО в структуру "базового" НМО при условии, что отклонение от наилучшего функционирования не превышает 0,2.

Таблица П41 Перевод структур НМО, относящихся к третьему кластеру, в структуру "базового" НМО 613 АЗ.

613 \	621	622	623	624	626	627	629	6210	62	63
$d_{нач.}$	0,165	0,178	0,184	0,181	0,168	0,171	0,180	0,182	0,188	0,162
$d_{конеч}$	0,048	0,055	0,078	0,145	0,043	0,050	0,078	0,069	0,080	0,057
знак	--	--	--	++	--	--	--	--	--	--
переста-новка	нет	нет	нет	да	нет	нет	нет	нет	нет	нет
Δ	0,17	0,18	0,33	0,5	0,14	0,15	0,29	0,31	0,38	0,14
λ	1,54	1,23	1,19	0,17	1,78	1,64	1,17	1,05	1,16	1,48
613 \	631	632	633	634	635	636	637	638	639	

$d_{\text{нач.}}$	0,171	0,164	0,165	0,169	0,165	0,166	0,167	0,167	0,171	
$d_{\text{конеч.}}$	0,070	0,062	0,063	0,068	0,064	0,065	0,062	0,067	0,064	
знак	- -	- -	- -	- -	- -	- -	- -	- -	- -	
перестановка	нет	нет	нет	нет	нет	нет	нет	нет	нет	
Δ	0,15	0,15	0,13	0,15	0,14	0,14	0,15	0,17	0,13	
λ	1,31	1,37	1,34	1,31	1,32	1,39	1,44	1,36	1,29	

Как следует из таблицы в структуру "базового" НМО 613А3 с заданным уровнем максимальной ошибки непосредственно не переводятся структуры НМО N624, N624, N629, N6210, N62.

Таблица П42. Перевод структур НМО, относящихся к четвертому кластеру, в структуру "базового" НМО 613 А3.

613	651	652	653	654	655	656	657	658	659	6510	65
$d_{\text{нач.}}$	0,154	0,148	0,147	0,153	0,156	0,156	0,154	0,152	0,152	0,146	0,158
$d_{\text{конеч.}}$	0,055	0,052	0,060	0,054	0,055	0,060	0,067	0,061	0,062	0,058	0,063
знак	- +	- +	- +	- +	- +	- +	- +	- +	- +	- +	- +
перес-ка	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да
Δ	0,13	0,14	0,17	0,14	0,16	0,13	0,24	0,13	0,15	0,19	0,15
λ	1,48	1,51	1,34	1,49	1,58	1,34	1,14	1,25	1,28	1,26	1,43

Непосредственно в структуру "базового" НМО N613А с выбранным уровнем ошибки не переходит НМО N657.

Таблица П43. Перевод структур НМО, относящихся к пятому кластеру, в структуру "базового" НМО 613А3.

613 \	619	6110
$d_{нач.}$	0,142	0,139
$d_{конечн.}$	0,076	0,072
знак	- -	- -
перестановка	да	да
Δ	0,35	0,28
λ	1,19	1,12

Из анализа таблицы следует, что НМО N619 и N6110 с заданным уровнем ошибки не переходят непосредственно в структуру НМО N613.

Таблица П44. Результат перевода структур НМО, обученных при помощи "мутационного" алгоритма, в структуру "базового" НМО 613 А3.

613 \	R611	R612	R621	R622	R623	R631	R632	R633	R641	R642
$d_{нач.}$	0,171	0,190	0,151	0,153	0,168	0,18	0,143	0,192	0,150	0,167
$d_{конечн.}$	0,069	0,085	0,064	0,075	0,078	0,142	0,087	0,147	0,085	0,108
знак	- -	+ -	- +	- +	+ -	- -	+ +	- -	+ +	+ +
перес-ка	да	нет	нет	нет	да	да	да	да	да	да
Δ	0,1	0,12	0,11	0,15	0,12	0,50	0,12	0,50	0,16	0,14
λ	1,83	1,34	1,81	1,47	1,34	0,14	1,23	0,15	1,24	1,24
613 \	R643	R651	R652	R653	R661	R662	R663	R671	R672	R673
$d_{нач.}$	0,162	0,186	0,154	0,168	0,167	0,217	0,170	0,205	0,185	0,177
$d_{конечн.}$	0,053	0,117	0,062	0,092	0,14	0,123	0,147	0,155	0,143	0,137
знак	- +	- +	- +	- +	+ -	+ -	- -	- -	+ -	+ -
перестановка	да	да	да	да	нет	да	нет	да	нет	нет
Δ	0,12	0,25	0,14	0,13	0,5	0,18	0,5	0,5	0,5	0,5
λ	1,79	1,21	1,45	1,23	0,12	1,21	0,18	0,11	0,13	0,14

Из анализа таблицы следует, что непосредственно в структуру "базового" НМО не переходят следующие структуры НМО: R631A3, R633A3, R661A3, R663A3, R671A3-R673A3.

Таблица П45. Результат перевода структур НМО, обученных при помощи "мутационного" алгоритма и не переходящих непосредственно в структуру N613A3, в структуру других НМО

611 \	R631	R633	R661	R663	R671	R672	R673
$d_{\text{нач.}}$	0,187	0,198	0,175	0,182	0,215	0,195	0,188
$d_{\text{конеч.}}$	0,049	0,084	0,050	0,085	0,093	0,082	0,065
знак	- -	- -	+ -	- -	- -	- +	- +
перестановка	нет	нет	да	да	нет	да	да
Δ	0,03	0,06	0,07	0,09	0,03	0,05	0,06
λ	1,33	1,53	3,66	1,51	1,32	1,15	1,31

Следовательно, переход структур НМО, обученных при помощи "мутационного" алгоритма, в структуру НМО N613A3 можно представить схемой (рис.).

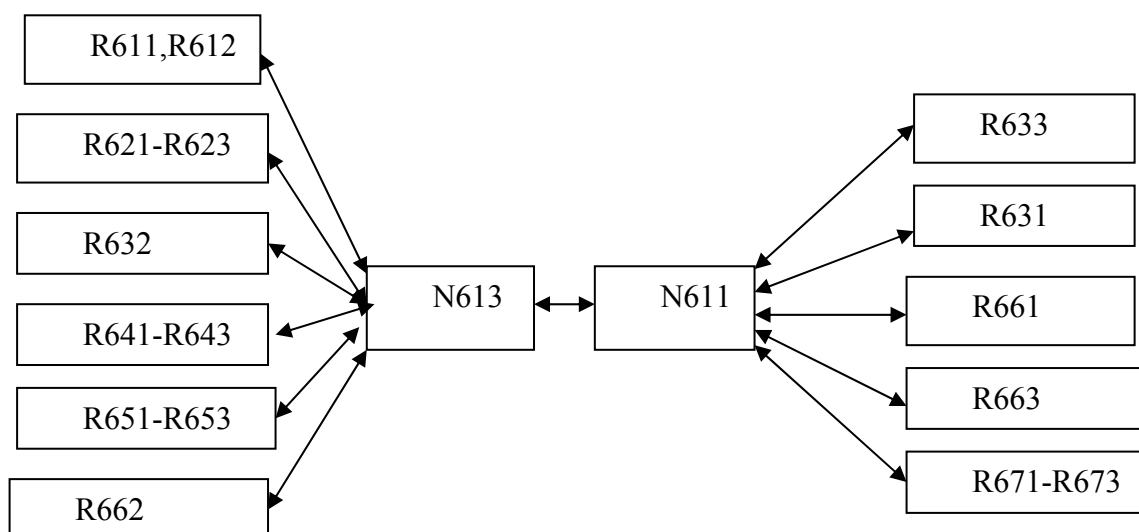


Рис.П.9. Переход структур НМО, обученных выполнению функции А3 при помощи "мутационного" алгоритма в структуру "базового" НМО N613A3.

Далее в таблицах П46-П49 представлены результаты перевода структур НМО, сформированных под действием "мутационного" давления в структуру НМО 613А3.

Таблица П46.

613 \	Sm61	Sm62	Sm63	Sm64	Sm61 \	Sm62	Sm63	Sm64
$d_{нач.}$	0,069	0,211	0,205	0,212		0,248	0,218	0,207
$d_{конечн.}$	0,069	0,106	0,165	0,212		0,112	0,084	0,142
знак	++	--	--	++		--	--	++
перестановка	нет	нет	да	да		нет	нет	да
Δ	0,12	0,5	0,5	0,5		0,25	0,04	0,03
λ	1,41	1,29	0,12	0,13		1,16	1,02	1,02

Таблица П47.

613 \	St61	St62	St63	St64	St65	St65 \
$d_{нач.}$	0,206	0,208	0,169	0,152	0,213	0,194
$d_{конечн.}$	0,110	0,1	0,084	0,095	0,229	0,114
знак	--	--	--	++	+-	-+
перестан-ка	да	нет	нет	да	да	нет
Δ	0,15	0,4	0,18	0,11	0,5	0,14
λ	1,45	1,21	1,25	01,81	0,13	1,34

Таблица П48.

613 \	Sc61	Sc62	Sc63	Sc64	Sc65
$d_{нач.}$	0,229	0,236	0,219	0,182	0,213
$d_{конечн.}$	0,106	0,121	0,106	0,102	0,117
знак	--	--	--	++	--
перестановка	нет	нет	нет	да	да
Δ	0,35	0,15	0,25	0,2	0,15
λ	1,42	1,57	1,34	1,31	1,83

Таблица П49.

N613	Sg61	Sg62	Sg63	Sg64	Sg65
$d_{\text{нач.}}$	0,07	0,187	0,159	0,128	0,142
$d_{\text{конечн.}}$	0,07	0,084	0,07	0,063	0,071
знак	+ +	- -	- -	+ +	- +
перестановка	нет	нет	нет	да	да
Δ	0,19	0,25	0,19	0,16	0,20
λ	1,21	1,15	1,25	1,26	1,21

Таблица П 50. Результаты перевода структур, обученных выполнению функции С4, в структуру "базового" НМО 621С4.

621	611	612	613	614	61	622	623	624	62
$d_{\text{нач.}}$	0,286	0,298	0,246	0,239	0,216	0,03	0,101	0,043	0,079
$d_{\text{конечн.}}$	0,088	0,022	0,210	0,225	0,204	0,03	0,101	0,043	0,079
знак	- -	- -	+ -	- +	+ -	+ +	+ +	+ +	+ +
перестановка	нет	нет	да	да	да	нет	да	нет	нет
Δ	0,04	0,03	0,2	0,2	0,2	0,03	0,03	0,03	0,04
λ	1,09	3,44	0,04	0,04	0,07	2,30	1,32	1,64	1,01
621	631	632	633	634	63	641	642	64	651
$d_{\text{нач.}}$	0,019	0,034	0,047	0,035	0,085	0,223	0,224	0,181	0,229
$d_{\text{конечн.}}$	0,019	0,034	0,047	0,035	0,085	0,052	0,213	0,083	0,039
знак	+ +	+ +	+ +	+ +	+ +	- -	- +	- -	+ -
перестановка	нет	нет	нет	нет	нет	да	нет	да	да
Δ	0,03	0,05	0,03	0,03	0,06	0,03	0,20	0,14	0,04
λ	1,36	1,61	1,12	1,22	1,25	2,31	0,07	1,34	1,08

621	652	653	654	65	661	662	663	664	665
$d_{нач.}$	0,229	0,234	0,205	0,225	0,308	0,296	0,268	0,248	0,303
$d_{конеч.}$	0,039	0,139	0,081	0,201	0,082	0,033	0,081	0,216	0,207
знак	+ -	- +	+ -	- +	+ +	+ +	+ +	- -	- -
перестановка	да	нет	да	да	да	да	да	да	нет
Δ	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	0,03	0,03	0,20	0,20
λ	0,08	0,15	1,35	0,07	0,47	1,02	1,31	0,06	0,13
621	671	672	674	675					
$d_{нач.}$	0,244	0,178	0,075	0,084					
$d_{конеч.}$	0,216	0,178	0,075	0,084					
знак	- -	+ +	+ +	+ +					
перестановка	нет	да	да	да					
Δ	0,20	0,20	0,20	0,20					
λ	0,06	0,15	1,29	0,42					

Из анализа таблицы следует, что непосредственно в структуру НМО Net621C4 не переходят структуры НМО Net 613C4, 614C4, 61C4, 642C4, 652C4, 653C4, 65C4, 661C4, 664C4, 665C4, 671C4, 672C4, 675C4.

Таблица П51. Результаты перевода структур, выполняющих функцию С4 и непосредственно не переходящих в структуру Net621C4, в структуры промежуточных НМО.

613	614	671	61	614	664	664	652	65	671	642
$d_{нач.}$	0,099	0,231	0,078	$d_{нач.}$	0,215	$d_{нач.}$	0,191	0,15	$d_{нач.}$	0,247
$d_{конеч.}$	0,099	0,032	0,078	$d_{конеч.}$	0,052	$d_{конеч.}$	0,075	0,042	$d_{конеч.}$	0,058
знак	+ +	+ -	+ +	знак	- +	знак	+ -	+ -	знак	+ -
перестановка	да	да	да	перестановка	нет	перестановка	нет	нет	перестановка	нет
Δ	0,18	0,07	0,06	Δ	0,06	Δ	0,11	0,06	Δ	0,27
λ	1,23	1,52	1,35	λ	1,11	λ	1,29	1,4	λ	1,32

Таблица П52. Результаты перевода структур, выполняющих функцию С4 и непосредственно не переходящих в структуру Net621С4, в структуры промежуточных НМО.

611	661	661	665	665	653	672	672	675
$d_{нач.}$	0,239	$d_{нач.}$	0,072	$d_{нач.}$	0,250	0,354	$d_{нач.}$	0,161
$d_{конеч.}$	0,102	$d_{конеч.}$	0,072	$d_{конеч.}$	0,089	0,16	$d_{конеч.}$	0,161
знак	- -	знак	+ +	знак	+ -	+ +	знак	+ +
перестановка	да	перестановка	нет	перестановка	нет	да	перестановка	нет
Δ	0,18	Δ	0,16	Δ	0,11	0,2	Δ	0,27
λ	1,15	λ	1,40	λ	1,56	1,19	λ	1,36

Применение преобразований к структурам, выполняющим разные функции.

Таблица П53. Сравнение структур, выполняющих функции А3 и С4. Значение $\Delta \geq 0,3$.

61А3	611С4	612С4	613С4	614С4	61С4	617А3	611С4	612С4	613С4	614С4	61С4
$d_{нач.}$	0,246	0,243	0,172	0,160	0,149		0,240	0,237	0,195	0,171	0,162
$d_{конеч.}$	0,193	0,169	0,172	0,160	0,149		0,201	0,191	0,195	0,158	0,157
знак	- +	- -	+ +	+ +	+ +		- +	- -	+ +	- +	+ -
перестановка	да	нет	нет	да	да		да	нет	нет	да	да
λ	0,09	0,07	0,05	0,08	0,13		0,09	0,11	0,05	0,77	0,49
расстояние	0,17	0,16	0,16	0,15	0,13		0,18	0,17	0,18	0,036	0,080
619А3	611С4	612С4	613С4	614С4	61С4	62А3	621С4	622С4	623С4	624С4	62С4
$d_{нач.}$	0,221	0,196	0,220	0,163	0,163		0,245	0,229	0,199	0,214	0,208
$d_{конеч.}$	0,155	0,121	0,184	0,154	0,150		0,125	0,120	0,130	0,106	0,128
знак	+ -	+ -	- +	- +	- +		- +	+ -	+ -	+ -	+ -
перестановка	да	да	нет	нет	нет		нет	нет	нет	нет	0-нет
λ	0,1	0,1	0,68	0,1	0,67		0,1	0,07	0,11	0,13	0,17
расстояние	0,14	0,11	0,06	0,14	0,05		0,11	0,11	0,12	0,09	0,11

Таблица П54. Сравнение структур, выполняющих функции АЗ и С4. Значение $\Delta \geq 0,3$.

617АЗ	621С4	622С4	623С4	624С4	62С4	619АЗ	621С4	622С4	623С4	624С4	62С4
d _{нач.}	0,195	0,193	0,199	0,214	0,194	d _{нач.}	0,217	0,204	0,189	0,191	0,189
d _{коне..}	0,195	0,193	0,130	0,106	0,168	d _{коне..}	0,127	0,128	0,128	0,106	0,126
знак	+ +	+ +	+ -	+ -	- +	знак	- +	- +	- +	- +	+ -
перес-ка	нет	нет	нет	нет	да	перес-ка	да	да	да	да	да
λ	0,11	0,12	0,11	0,08	0,17	λ	0,12	0,08	0,08	0,08	0,31
рассто яние	0,17	0,17	0,12	0,10	0,14	рассто яние	0,11	0,12	0,12	0,10	0,09
62АЗ	611С4	612С4	613С4	614С4	61С4	63АЗ	631С4	632С4	633С4	634С4	63С4
d _{нач.}	0,20	0,166	0,237	0,197	0,119	d _{нач.}	0,235	0,216	0,205	0,211	0,180
d _{коне..}	0,157	0,121	0,186	0,158	0,154	d _{коне..}	0,167	0,149	0,148	0,144	0,139
знак	- +	- +	+ -	+ -	- +	знак	+ -	+ -	+ -	+ -	+ -
перес-ка	нет	нет	да	да	да	перес-ка	нет	нет	нет	нет	нет
λ	0,11	0,10	0,65	0,14	0,69	λ	0,11	0,09	0,09	0,009	0,08
рассто яние	0,14	0,11	0,07	0,08	0,05	рассто яние	0,15	0,13	0,13	0,13	0,13
63АЗ	611С4	612С4	613С4	614С4	61С4	63АЗ	621С4	622С4	623С4	624С4	62С4
d _{нач.}	0,207	0,173	0,226	0,189	0,181	d _{нач.}	0,233	0,219	0,192	0,203	0,201
d _{коне..}	0,192	0,155	0,172	0,154	0,142	d _{коне..}	0,160	0,157	0,175	0,140	0,158
знак	+ -	- +	- -	- -	- -	знак	+ -	+ -	- +	+ -	+ -
перес-ка	да	нет	нет	нет	нет	перес-ка	нет	нет	да	нет	да
λ	0,08	0,07	0,05	0,06	0,18	λ	0,10	0,09	0,09	0,08	0,10
рассто яние	0,18	0,14	0,16	0,14	0,12	рассто яние	0,14	0,13	0,16	0,13	0,14

Таблица П55. Сравнение структур, выполняющих функции А3 и С4. Значение $\Delta \geq 0,3$.

617A3 \	631C4	632C4	633C4	634C4	63C4	619A3 \	631C4	632C4	633C4	634C4	63C4
$d_{нач.}$	0,198	0,186	0,185	0,186	0,168	$d_{нач.}$	0,219	0,205	0,194	0,198	0,175
$d_{конеч.}$	0,192	0,186	0,185	0,186	0,144	$d_{конеч.}$	0,131	0,116	0,114	0,112	0,108
знак	++	++	++	++	--	знак	+-	+-	+-	+-	+-
перес-ка	нет	нет	нет	нет	да	перес-ка	да	да	да	да	да
λ	0,2	0,14	0,21	0,23	0,17	λ	0,26	0,31	0,24	0,26	0,27
расстояние	0,16	0,16	0,11	0,14	0,12	расстояние	0,096	0,08	0,09	0,08	0,08

Таблица П56. Перевод структур контрастированных НМО в неконтрастированные.

611A3 \	611A3 контраст	612A3 \	612A3 контраст	611A3 \	612A3	1031A3 \	1031A3 контр.	611A3 \	1031A3 \
	контраст		контраст				контр.		контр.
$d_{нач.}$	0,149	$d_{нач.}$	0,115	$d_{нач.}$	0,024	$d_{нач.}$	0,115	$d_{нач.}$	0,160
$d_{конеч.}$	0,149	$d_{конеч.}$	0,115	$d_{конеч.}$	0,024	$d_{конеч.}$	0,115	$d_{конеч.}$	0,08
знак	++	знак	++	знак	++	знак	++	знак	+-
перес-ка	нет	перес-ка	нет	перес-ка	нет	перес-ка	да	перес-ка	да
Δ	0,12	Δ	0,19	Δ	0,06	Δ	0,04	Δ	0,10
λ	1,09	λ	1,38	λ	1,11	λ	1,1	λ	1,38