

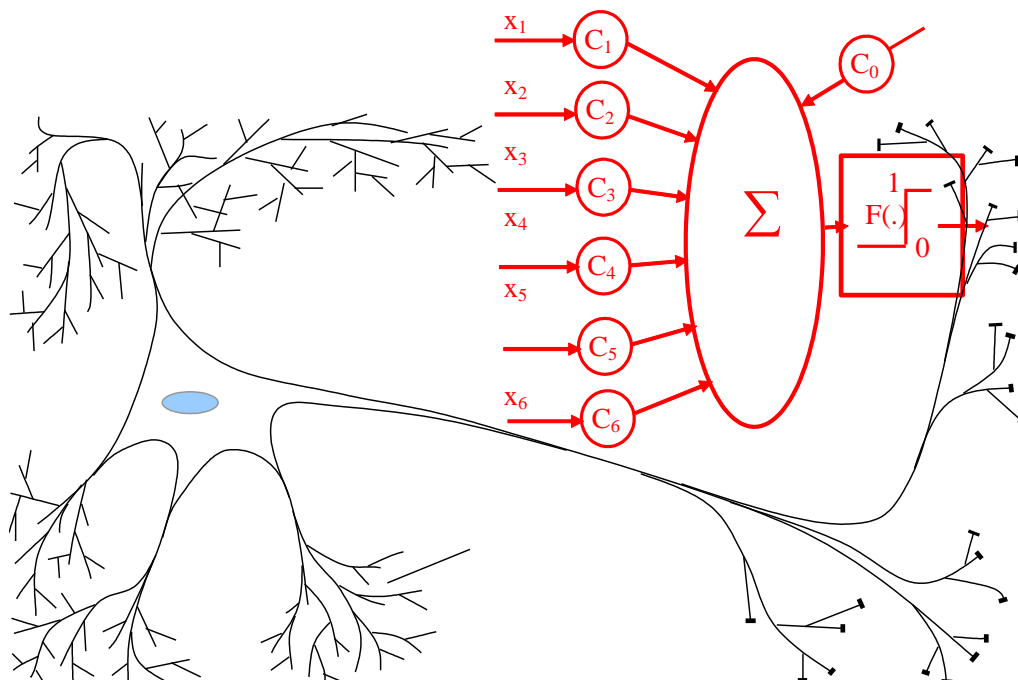
МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Пензенский государственный университет» (ПГУ)

А. И. Иванов

ИСКУССТВЕННЫЕ МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОЛЕКУЛЫ:
ПОВЫШЕНИЕ ТОЧНОСТИ СТАТИСТИЧЕСКИХ
ОЦЕНОК НА МАЛЫХ ВЫБОРКАХ
(ПРОГРАММЫ НА ЯЗЫКЕ MATHCAD)

Препринт



Пенза
Издательство ПГУ
2020

УДК 519.24; 53; 57.017
ББК 32.818
И20

Р е ц е н з е н т ы:

доктор технических наук, профессор,
ученый секретарь научно-технического совета АО «НПП “Рубин”»
М. М. Бутаев;

доктор технических наук, профессор,
заведующий кафедрой «Медицинская кибернетика и информатика»
Пензенского государственного университета
С. И. Геращенко

Иванов, А. И.

И20 Искусственные математические молекулы: повышение точности статистических оценок на малых выборках (программы на языке MathCAD) : препринт / А. И. Иванов. – Пенза : Изд-во ПГУ, 2020. – 36 с.

ISBN 978-5-907262-42-3

Молекулы – это естественные объекты для химиков. Физики рассматривают электроны, нейтроны, протоны и микрочастицы, из которых состоят молекулы. Основной задачей данной работы является попытка показать, что конструкции, напоминающие молекулы химиков, оказываются очень удобными и для математической статистики. При этом объяснить выгоды от применения искусственных математических молекул удастся только в том случае, если использовать квантовые эффекты, изучаемые как химиками, так и физиками. Речь ни в коем случае не идет о дифференциальном уравнении Шредингера. Его воспроизведение на обычной вычислительной машине технически невозможно. Речь пойдет об искусственных молекулах – статических объектах, которые придется специально загонять в динамический режим, чтобы увидеть на их выходе спектральные линии. При этом вычислительные затраты на воспроизведение искусственных молекул – линейные, т.е. все вычисления можно выполнять на обычном компьютере. Проверить основные положения теории может любой студент или аспирант, самостоятельно воспроизведя примеры программ на языке MathCAD, приведенные в приложении.

Издание будет интересно студентам, аспирантам, научным работникам, занимающимся вопросами математической статистики.

УДК 519.24; 53; 57.017
ББК 32.818

ISBN 978-5-907262-42-3

© Иванов А. И., 2020

Содержание

Термины и определения	4
Введение	5
1. Выигрыш, который получают химики и криминалисты при переходе от континуальных методов анализа данных к анализу дискретных спектров молекул	6
2. Формирование гистограмм для вычисления континуальных и дискретных спектров..	7
3. Статистический критерий квадрата среднего геометрического и эквивалентный ему искусственный нейрон	9
4. Реализация условий, позволяющих наблюдать амплитуды линий спектра искусственных молекул.....	12
5. Тестирование качества решений, принимаемых одним искусственным нейроном и эквивалентной ему искусственной молекулой	13
6. Обход проблем, возникающих при обучении «глубоких» многослойных нейронных сетей, через использование однослойных «широких» нейронных сетей.....	15
7. Прогнозирование ожидаемых значений вероятностей ошибок для 100 искусственных нейронов	17
Заключение	18
Библиографический список	19
Приложение 1.1. Программа, позволяющая наблюдать спектральные линии хи-квадрат молекулы при ее возбуждении данными с нормальным и равномерным распределениями	21
Приложение 1.2. Возбуждение хи-квадрат нейрона выборками нормальных и равномерных данных.....	23
Приложение 1.3. Программная реализация искусственной статистической молекулы суммы «хвостов» малой выборки	25
Приложение 1.4. Программная реализация искусственного нейрона суммы «хвостов» малой выборки.....	26
Приложение 1.5. Программная реализация четырех искусственных статистических нейронов	27
Приложение 1.6. Моделирование дифференциального и интегрального вариантов нейрона квадрата среднего геометрического с оценкой коррелированности их данных	29
Приложение 1.7. Связь коррелированности непрерывных внутренних спектров искусственных нейронов с вероятностями появления их дискретных выходных состояний и энтропией пары разрядов кода.....	30
Приложение 1.8.1. Три нейрона со слабо коррелированными состояниями, заранее обученные распознавать малые выборки с нормальными данными	31
Приложение 1.8.2. Пять нейронов со слабо коррелированными состояниями, заранее обученные распознавать малые выборки с нормальными данными	32
Приложение 1.8.3. Пять нейронов с коррелированными состояниями, характерными для биометрии $ r \approx 0.3$, заранее обученные распознавать малые выборки	33

Термины и определения

Преобразователь континуумов – любой преобразователь, преобразующий входной континуум данных в выходной континуум данных. Размерность входных и выходных континуумов может быть любой, например, функция $f(x,y,z)$ – это трехмерный преобразователь континуумов в выходной одномерный континуум.

Преобразователь континуум/цифра – преобразователь, способный преобразовывать континуум входных состояний в конечное число выходных состояний. Такими преобразователями, например, являются физически существующие молекулы водорода, гелия и др., которые континуальное значение своей температуры преобразуют в дискретные линии выходного спектра. В данной работе рассматриваются преобразователи континуум/цифра в форме хи-квадрат молекулы, молекулы квадрата среднего геометрического, молекулы суммы «хвостов» анализируемого распределения.

Искусственный нейрон – конструкция, относящаяся к преобразователям континуума высокой входной размерности «сырых» данных с низкой информативностью в одномерный континуум данных более высокой информативности (нейроны с гладкими функциями возбуждения), либо – это иная конструкция, выполняющая преобразование континуум/цифра, например, персептрон, а также 10 рассмотренных в данной книге нейронов, являющихся аналогами статистических критериев.

Искусственная математическая молекула – программный преобразователь континуум/цифра или аналог физической или химической молекулы.

Искусственная нейросетевая молекула – конструкция, образованная параллельной обработкой входных континуальных данных несколькими искусственными нейронами, выполняющими разные преобразования континуум/цифра.

Нейросетевой преобразователь биометрия-код – преобразователь, заранее автоматически обученный (например, по ГОСТ Р 52633.5–2011) преобразовывать многомерные континуумы примеров биометрического образа «Свой» в почти однозначный выходной код криптографического ключа или длинного пароля доступа. Нейросетевые преобразователи биометрия-код являются хорошо исследованными искусственными нейросетевыми молекулами (на сегодня разработано и введено в действие на территории РФ семь национальных стандартов).

Введение

Технология не стоит на месте, она развивается. Во времена СССР преподаватели по философии объясняли, что развитие человечества идет по спирали. Это суть диалектического материализма. Тогда это была государственная идеология и каждый, кто собирался сдавать кандидатский минимум, должен был написать реферат по философии, пытаясь разглядеть в своей науке эту самую спираль диалектики развития.

Насколько убедительно в 1980 г. автор сумел разглядеть диалектическую спираль в задачах нелинейной динамики, трудно судить, однако она должна существовать независимо от наших субъективных наблюдений. По крайней мере вычислительная техника вроде бы развивается по закону Мура (вроде бы без спирали). Тем не менее какие-то циклы в ее развитии просматриваются.

В СССР на момент рождения автора в 1955 г. работало две большие вычислительные машины «Стрела-1». Это были ламповые гиганты, занимавшие трехэтажные здания. Технологический скачок от «Стрелы-1» до «Урала-1» выполнил татарин из города Пенза Рамеев Башир Искандарович. Он не стал ждать милости от РадиоПром и построил свою вычислительную машину на гражданском ширпотребе (радиолампах «Двойной триод»). Всего потребовалось 1000 ламп, а ресурс наработки на отказ каждой из них составлял 1000 часов. То есть ламповая вычислительная машина Рамеева должна была ломаться каждый час. Однако благодаря удачным техническим решениям, тренировке личного состава и тренировке радиоламп в 1957 г. опытный образец машины «Урал-1» на государственных испытаниях проработал без сбоев 17 часов 40 минут. Это была победа, открывшая перспективу серийного выпуска относительно компактных вычислительных машин. Для размещения ЭВМ «Урал-1» достаточно было одной комнаты вместо целого трехэтажного здания.

С 1957 по 1961 г. было выпущено 267 штук ЭВМ «Урал-1», показатель серийности этой вычислительной машины на тот момент был выше, чем у фирмы ИВМ. Королев, как и все, стоял в очереди за «Уралами». Для того чтобы вернуть Гагарина, Королеву приходилось параллельно запускать три «Урала» и ждать совпадения результатов вычислений хотя бы у двух вычислительных машин.

От ламповых технологий 1961 г. до настоящего времени прошло три технологических революции (транзисторы, микросхемы, микропроцессоры). В ближайшем будущем большие ученые нам предлагают ждать появления «квантовых ламп», «квантовых транзисторов», «квантовых микросхем» и «квантовых микропроцессоров». Кто первый наладит выпуск новой элементной базы для квантовых вычислений, неизвестно. Положительный опыт диалектики Башира Рамеева учит тому, что нет смысла ждать милости от университетов, Зеленограда, Силиконовой долины. Нужно брать тот ширпотреб, который есть под рукой, и «писать» на нем «квантовые» вычислители.

Нет необходимости вслед за математиками и физиками на обычной вычислительной машине пытаться моделировать уравнения Шредингера. Это направление бесполезно, так как такая задача имеет экспоненциальную вычислительную сложность. Гораздо более перспективным является чуть-чуть изменить условия задачи и перейти от моделирования сложных естественных молекул к моделированию более простых искусственных математических молекул.

В данной книге автор попытался показать, что задача моделирования искусственных молекул, собранных из искусственных нейронов, имеет линейную вычислительную сложность. То есть ее вполне можно решать на обычных вычислительных машинах, при этом удастся воспользоваться всеми положительными эффектами квантовой суперпозиции. Диалектика развития состоит в том, что возможностей ламповых вычислительных машин «Урал-1» 1961 г. уже было вполне достаточно для программного воспроизведения эффектов квантовой суперпозиции. Сегодня мы поднялись на следующий виток спирали не из-за того, что получили современную вычислительную технику. Мы выходим на следующий виток спирали развития из-за духовного совершенствования математики. Физика и химия давно стали квантовыми, математика постепенно их догоняет.

1. Выигрыш, который получают химики и криминалисты при переходе от непрерывных методов анализа данных к анализу дискретных спектров молекул

Предположим, что криминалисты обнаруживают у подозреваемого очень точные весы. Следствию нужно ответить на вопрос: зачем подозреваемому такой дорогой и такой точный инструмент? Что подозреваемый взвешивал на этих весах?

Для того чтобы ответить на этот вопрос, криминалист берет вату, смачивает ее в спирте и протирает чашу весов; далее вату помещают в пробирку. При анализе вату сжигают, а свет пламени фокусируют и направляют на призму, как это показано на рис. 1.

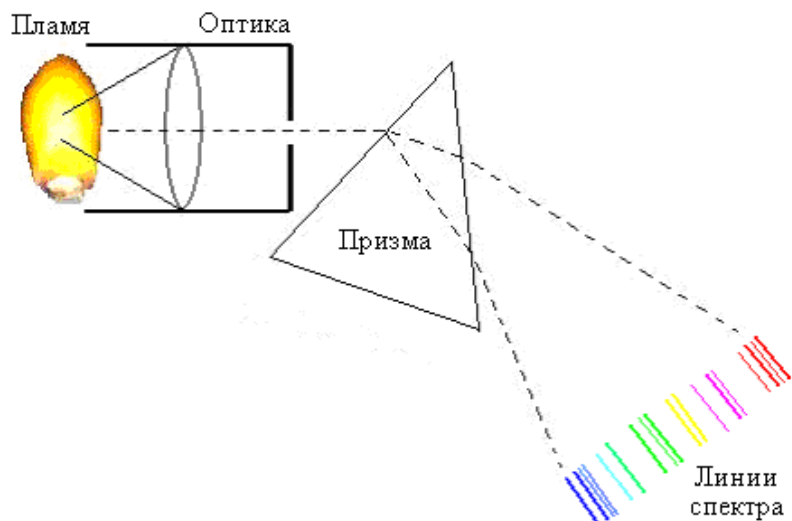


Рис. 1. Схема анализа спектральных линий пламени для обнаружения в сжигаемой пробе нановключений стороннего вещества

Если бы через призму проходил солнечный свет, то после призмы мы бы увидели сплошную раду. В нашем случае спектр оказывается полосатым – отображаются полосы, соответствующие возбужденным молекулам кислорода, спирта и горячей ваты. Если теперь накрыть все полосы цветного спектра черными линиями маски, то свет должен полностью исчезнуть. Это было бы так, если бы на вате не было примесей. Между яркими линиями «чистой» ваты проявятся менее яркие линии нанопримесей. Спектральные линии нанопримесей фотографируют, а потом эксперт исследует фотографию. Факт обнаружения спектральных линий золота, взрывчатки или наркотиков отражается в заключении криминалистической экспертизы. Непрерывные методы химического анализа (взвешивание, титрование, просвечивание...) способны обнаружить в пробе порядка 0,1 % объема примеси от объема основного вещества. Переход к анализу спектральных линий позволяет увеличить чувствительность и точность метода примерно в миллион раз. Очевидно, что заимствование перехода от непрерывного анализа к анализу спектральных линий может оказаться выгодным не только в химии и криминалистике. Если научиться переходить от непрерывных методов анализа к анализу спектральных линий в математической статистике, то появится возможность значительно повысить достоверность статистических оценок на малых выборках.

2. Формирование гистограмм для вычисления континуальных и дискретных спектров

В 1900 г. Пирсон создал хи-квадрат критерий проверки статистических гипотез. Критерий Пирсоном строится с опорой на гистограмму, отображенную в левой части рис. 2. Сегодня считается, что хи-квадрат критерий надежен на выборках в 200 и более опытов. Однако столь большую выборку не всегда удастся получить на практике. Так, биолог далеко не всегда может провести 200 измерений интересующего его параметра у 200 подопытных животных, получив достоверность оценок на уровне 0.97. Если же он выполнит только 20 опытов, то доверительная вероятность его оценок по хи-квадрат критерию оказывается неприемлемо низкой – 0.64.

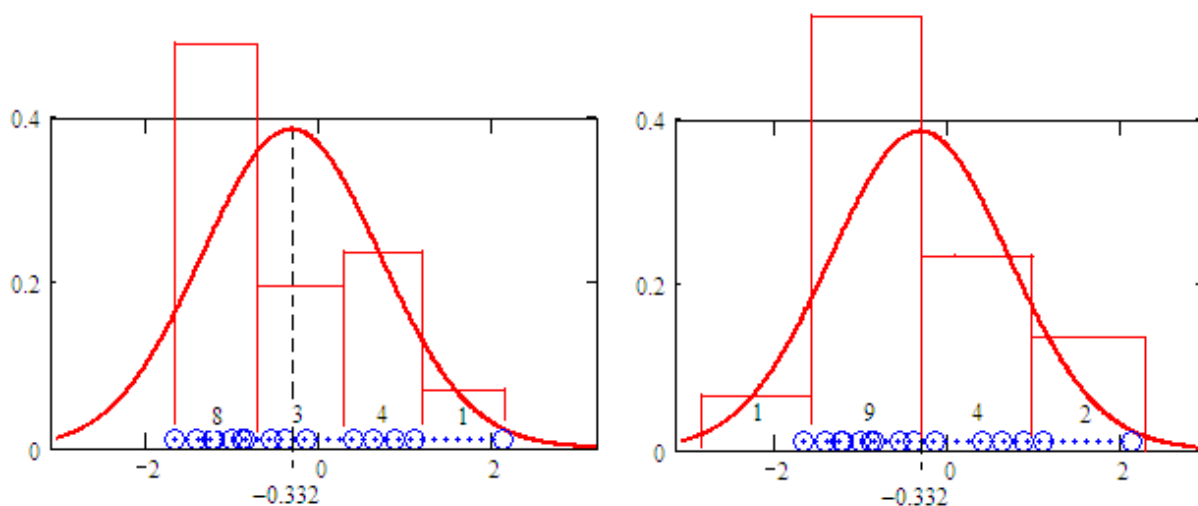


Рис. 2. Два способа построения гистограмм для выборки в 16 опытов

Проблема еще больше обостряется при тестировании новых лекарственных препаратов. В этом случае приходится иметь дело с людьми, что многократно удорожает получение выборок достаточного объема.

Для того чтобы обойти проблему малых выборок, необходимо перейти от анализа непрерывных спектров к анализу линий дискретных спектров (так же, как это делают химики и криминалисты). Для этой цели необходимо изменить способ формирования гистограмм, как это показано в правой части рис. 2.

Как правило, исследователи ожидают нормального закона распределения данных, однако для каждой выборки необходимо проверять гипотезу нормальности. Именно для этой цели может быть применен хи-квадрат критерий Пирсона. При этом гистограмма, сформированная по первому способу, дает континуальный (непрерывный) спектр выходных состояний хи-квадрат критерия Пирсона. Это происходит из-за того, что при таком способе интервалы гистограммы никак не привязаны к математическому ожиданию выборки.

Совершенно иная ситуация возникает при втором способе формирования интервалов гистограммы. В этом случае интервалы гистограммы жестко привязаны к математическому ожиданию выборки, а ширину интервалов выбирают пропорционально стандартному отклонению выборки. При такой предобработке данных выходные состояния хи-квадрат критерия оказываются дискретны. Такой способ формирования гистограммы эквивалентен использованию Ньютоном призмы в оптике, так как он позволяет перейти от наблюдения непрерывного спектра состояний к наблюдению дискретного спектра состояний статистических критериев на малых выборках.

Впервые факт превращения непрерывного спектра хи-квадрат критерия в линейки дискретного спектра обнаружен в 1973 г. [1], что сильно удивило авторов этого открытия. Однако использовать этот эффект авторы открытия даже не пытались. Дело в том, что на тот момент не было известно об огромных преимуществах квантовых вычислений. Название статьи [1] имеет знак вопроса. Только в 1980 г. нашим соотечественником Юрием Маниным [2] была предложена концепция квантовых вычислителей. За последующие 30 лет усилиями ряда выдающихся математиков были созданы теоретические основы квантовых вычислений [3]. Повторное обнаружение возможности перехода к дискретному спектру хи-квадрат критерия [4, 5] было выполнено во времена, когда для специалистов были очевидны преимущества дискретных спектров и квантовых вычислений.

Нет смысла подробно рассматривать варианты хи-квадрат критерия с континуальным (непрерывным) и дискретным (линейчатым) спектрами в силу относительно низкой мощности этого раннего статистического критерия 120-летней давности. Программная реализация хи-квадрат молекулы на языке MathCAD дана в приложении 1.1. Программная реализация хи-квадрат нейрона дана в приложении 1.2.

3. Статистический критерий квадрата среднего геометрического и эквивалентный ему искусственный нейрон

Проведенные уже в этом веке исследования показали, что для малых выборок критерий среднего геометрического [6, 7] более выгоден в сравнении с хи-квадрат критерием. Для любых статистических критериев может быть построен их эквивалент в форме искусственных нейронов. В частности, для критерия квадрата среднего геометрического эквивалентный искусственный нейрон описывается системой функциональных связей, приведенной в табл. 1.

Таблица 1

Таблица функциональных связей программы, воспроизводящей работу искусственного нейрона, эквивалентного статистическому критерию среднего геометрического

$\left\{ \begin{array}{l} x \leftarrow \text{sort}(x) \\ \Delta \leftarrow \frac{x_{15} - x_0}{4} \\ \tilde{x}_i \leftarrow x_0 + \Delta \cdot i; \text{ for } i = 0, 1, \dots, 4 \\ cg^2 \leftarrow \sum_{i=0}^3 \left(\sqrt{\frac{n_i}{16} \cdot P(\Delta_i)} \right)^2 \quad (1), \\ z \leftarrow "1" \text{ if } cg^2 \leq 0.142 \\ z \leftarrow "0" \text{ if } cg^2 > 0.142 \end{array} \right.$	<p>где n_i – число отсчетов выборки, попавшей в i-ый интервал гистограммы – Δ_i; $\tilde{x}_i, \tilde{x}_{i+1}$ – границы i-го интервала; $P(\Delta_i)$ – вероятность попадания в i-ый интервал гистограммы при нормальном законе распределения выборки из 16 опытов; $P_1 = 0.275$ – вероятность ошибок первого рода; $P_2 = 0.268$ – вероятность ошибок второго рода.</p>
---	---

На рис. 3 приведены континуальные плотности распределения значений квадрата критерия среднего геометрического при анализе выборки нормальных данных и равномерных данных.

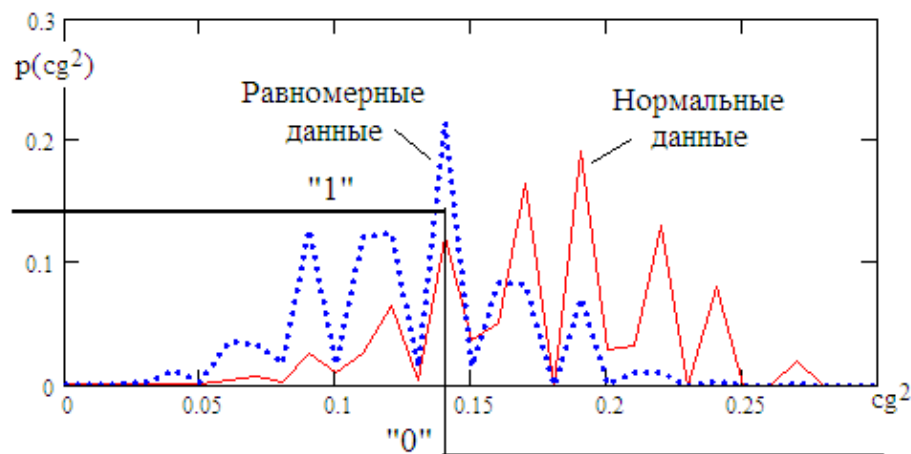


Рис. 3. Континуальные плотности распределения значений квадрата критерия среднего геометрического при анализе выборки в 16 опытов

Если мы будем формировать гистограмму по второму способу (правая часть рис. 2), то получим математическую молекулу квадрата среднего геометрического. Описание математической молекулы дано в табл. 2.

Таблица функциональных связей программы, воспроизводящей работу искусственного нейрона дифференциально-интегрального варианта статистического критерия среднего геометрического

$ \begin{cases} x \leftarrow \text{sort}(x) \\ x \leftarrow \frac{x}{\sigma(x)} \\ \tilde{x}_i \leftarrow E(x) + 1.5 \cdot (i - 2); \text{ for } i = 0, 1, \dots, 4 \\ cg^2 \leftarrow \sum_{i=0}^3 \left(\sqrt{\frac{n_i}{16} \cdot P(\Delta_i)} \right)^2 \\ \sum_{i=0}^{12} \Psi_{n,i} = 0.946 \\ \sum_{i=0}^{12} \Psi_{r,i} = 0.948 \end{cases} \quad (2), $	<p>где $E(x)$ – математическое ожидание выборки в 16 опытов; $\sigma(x)$ – стандартное отклонение выборки; $\Psi_{n,i}$ – амплитуда вероятности спектральных линий нормальных данных; $\Psi_{r,i}$ – амплитуда вероятности спектральных линий равномерных данных</p>
--	---

На рис. 4 приведены спектральные линии искусственной молекулы (2), между линиями наблюдаются большие пустые пространства. Наиболее значимым спектральным линиям присвоены порядковые цифры. Обозначенные наиболее значимые амплитуды вероятности в сумме составляют 0.946 и 0.948. Значения амплитуд вероятностей появления спектральных линий и значения квадрата критерия среднего геометрического приведены в табл. 3.

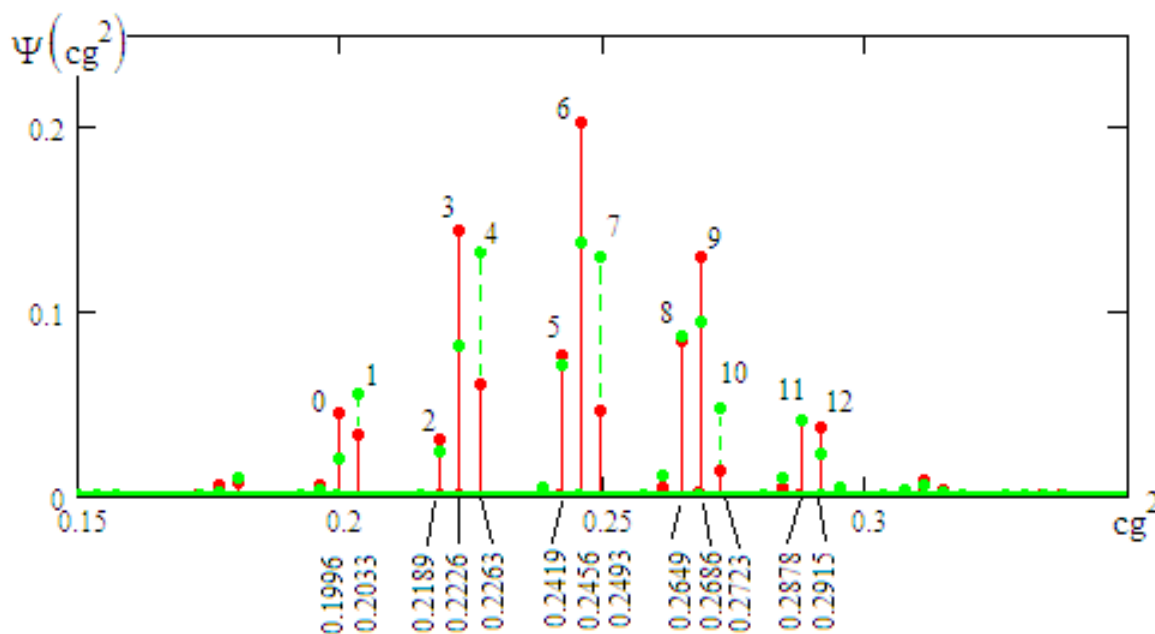


Рис. 4. Амплитуды вероятности спектральных линий молекулы квадрата среднего геометрического для нормальных данных (сплошные линии) и равномерных данных (линии пунктиром)

**Амплитуды вероятности спектральных линий
для равномерных и нормальных данных статистического критерия
квадрата среднего геометрического**

Нормальные данные													
	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Ψ_n	0.045	0.033	0.031	0.144	0.061	0.076	0.202	0.046	0.086	0.13	0.014	0.041	0.037
Равномерные данные													
	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Ψ_r	0.02	0.055	0.024	0.081	0.132	0.076	0.138	0.13	0.086	0.094	0.048	0.041	0.023
Значение критерия квадрата среднего геометрического													
	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
cg^2	0.2	0.203	0.219	0.223	0.226	0.242	0.246	0.249	0.265	0.269	0.272	0.288	0.292

Из рис. 4 видно, что искусственная молекула на нормальный и равномерный источник возбуждения откликается одними и теми же спектральными линиями, однако амплитуды этих линий существенно различаются. Положение спектральных линий будут разными только в том случае, когда разными будут искусственные молекулы. Здесь наблюдается полная аналогия между естественными молекулами и искусственными молекулами. Спектральные линии водорода и кислорода не совпадают по их расположению; именно по этой причине химикам и криминалистам удается увеличить точность и чувствительность спектральных методов анализа примерно в миллион раз.

В математической статистике нет задачи идентификации типов искусственных молекул, т.е. выигрыш от их применения должен быть много менее миллиона. Только в том случае, когда потребуется оценивать объемы смесей хи-квадрат молекул [4, 5] и молекул среднего геометрического [6, 7], возможно достижение повышения достоверности статистических оценок в миллион раз.

4. Реализация условий, позволяющих наблюдать амплитуды линий спектра искусственных молекул

Одной из проблем технологии применения искусственных молекул является то, что выборка в 16 опытов позволяет получить только одно значение. Для того чтобы появились отклики во всех 13 значимых спектральных линиях, необходимо порядка 130 выборок по 16 опытов. Получить их удастся, если использовать как исходную большую выборку. Например, можно взять исходную выборку из 21 опыта. Тогда, извлекая из этой выборки часть случайно выбранных опытов, получим 20 349 не повторяющихся выборок по 16 опытов, отличающихся между собой 1, 2, 3, 4, 5 опытами. При этом примерно 5 % серий по 16 опытов попадут вне 13 выделенных номерами значимых спектральных линий. Примерно 95 % из 20 349 вариантов будет попадать на 13 обозначенных номерами спектральных линий, однако их полезность (информативность) неодинакова.

Очевидно, что практически полное совпадение амплитуд вероятностей $\Psi_{n,i} \approx \Psi_{r,i}$ нормальных и равномерных линий делают их бесполезными для решения задачи. То есть спектральные линии с номерами 2, 5, 8, 11 бесполезны. Оценка полезности (информативности) спектральных линий вычисляется по следующей формуле:

$$e_i = \left\{ \frac{2 \cdot \max(\Psi_{n,i}; \Psi_{r,i})}{\Psi_{n,i} + \Psi_{r,i}} - 1 \right\}. \quad (3)$$

Каждая из 8 информативных спектральных линии с номерами 0, 1, 3, 4, 6, 7, 9, 12 дает результат примерно такой же, как дает один искусственный нейрон, анализирующий непрерывный спектр от выборки в 21 опыт.

5. Тестирование качества решений, принимаемых одним искусственным нейроном и эквивалентной ему искусственной молекулой

Интуитивно понятно, что анализ 8 спектральных линий 20 000 выборок по 16 опытов может быть выгоднее, чем анализ одного континуума, порождаемого одной выборкой объемом в 21 опыт. Очевидно также, что для 8 спектральных линий выходных состояний искусственной молекулы должно быть построено некоторое решающее правило. В первом приближении можно применить нейросеть, состоящую из одного слоя 8 искусственных нейронов. Также может быть применена в качестве решающего правила многослойная сеть из очень большого числа искусственных нейронов. Нам нет смысла вдаваться в подробности решающего правила, построенного для анализа спектральных линий искусственной молекулы. Разработчик каждого конкретного решающего правила всегда может его протестировать и объявить достигнутую им доверительную вероятность различения им нормальных и равномерных данных.

При тестировании на искусственную молекулу с модулятором на 10 000 подвыборок следует подавать по одной выборке в 21 опыт от программного генератора псевдослучайных чисел. В итоге мы можем получить достоверную оценку решений одного нейрона (простейшего решающего правила) и более сложного решающего правила, анализирующего спектральные линии искусственной молекулы. Достигнутые на сегодняшний день результаты отражены в табл. 4.

Таблица 4

Достигнутые вероятностные показатели на 01.12.2019

	Один нейрон среднего геометрического, 16 входов	Один нейрон среднего геометрического, 21 вход	Модулятор на 10 000 подвыборок по 16 из 21, многослойная нейросеть, анализирующая спектральные линии искусственной молекулы
Доверительная вероятность	0.729	0.771	0.993
Вероятность отказа от принятия решения	0.000	0.000	0.031
Вероятность ложного решения	0.271	0.229	0.007

Из табл. 4 видно, что одиночные нейроны среднего геометрического при анализе континуумов на малых выборках дают неприемлемо низкие для практики доверительные вероятности. Положение меняется, когда мы переходим к использованию искусственной молекулы среднего геометрического и достаточно сложного решающего правила в виде многослойной сети искусственных нейронов. Такая сеть искусственных нейронов достаточно сложна в обучении, однако она позволяет различать нормальные и равномерные данные с приемлемой для практики доверительной вероятностью.

Интересно отметить то, что пользователь всегда может самостоятельно убедиться в достоверности доверительной вероятности объявленной производителем очередной версии «квантового вычислителя». Пользователь может создать 50 тестовых примеров нормальных данных и 50 примеров данных с равномерным распределением. Примеры

можно перемешать и направить владельцу обученной «искусственной молекулы». Если создатель «квантового вычислителя» верно угадает законы распределения 97 примеров (отказавшись принимать решение для 3 примеров), то его спектральный анализатор действительно имеет доверительную вероятность выше 0.99.

В средние века трубадуры (поэты-песенники) и математики кочевали из одного замка в другой, услаждая слух и ум средневековых властителей своим искусством. Лучшие трубадуры и лучшие математики получали награду за свои таланты. В частности, награду получал тот из математиков, кто быстрее других находил корни заданного уравнения полинома. После опубликования теоремы Виета подобные математические соревнования утратили смысл. Однако мир не стоит на месте, появляются новые математические конструкции, применение которых сегодня выглядит как искусство.

Выше автор попытался показать, что незначительное изменение правил формирования гистограммы при статистических оценках реальных данных приводит к преобразованию континуума выходных состояний статистического критерия к появлению дискретного спектра линий его состояний. В математической статистике мы получаем примерно то же самое, что дает призма Ньютона в оптике. Нельзя не попытаться воспользоваться этим.

Перед каждым из нас появился выбор. Можно оставаться в средневековье и требовать от биолога статистических данных, полученных на 621 кролике по хи-квадрат критерию с доверительной вероятностью 0.993. Более разумным является переход к искусственным статистическим молекулам и нейросетевому анализу амплитуд их спектральных линий. В этом случае для 96.9 % биологов будет достаточно 21 опыта при той же доверительной вероятности 0.993. Удастся сократить примерно в 30 раз объем представительной выборки.

6. Обход проблем, возникающих при обучении «глубоких» многослойных нейронных сетей через использование однослойных (широких) нейронных сетей

Следует отметить, что искусственные нейронные сети и классические компьютеры развивались параллельно с середины прошлого века. То, что сегодня эти две ветви далеко не равноправны, обусловлено относительной простотой программирования классических компьютеров. Для искусственных нейронов роль программирования играет их обучение. По обучению сетей искусственных нейронов существует огромный пласт литературы, описывающей сотни известных алгоритмов, построенных под нейронные сети разных конфигураций. К сожалению, большинство типов нейронных сетей пока не имеет достаточно надежных (устойчивых) алгоритмов обучения. Подавляющее большинство алгоритмов обучения неустойчивы. Запустив неустойчивый алгоритм обучения, нельзя быть уверенным в том, что он за приемлемое время найдет удовлетворительное нейросетевое решение. Можно говорить о том, что практически все алгоритмы обучения нейронных сетей, созданные в прошлом веке, не имеют сегодня промышленного применения. Исключением является обучение многослойных нейронных сетей методом обратного распространения, предложенный в 1974 г. нашим соотечественником А. И. Галушкиным [8]. На тот момент реализовать идею Галушкина было технически невозможно из-за отсутствия вычислительных машин достаточной производительности.

Довести метод обратного распространения ошибки при обучении многослойных нейронных сетей до промышленного применения удалось только в этом веке Дж. Хинтону [9]. Примерно с 2006 г. все цифровые фотокамеры получили функцию поиска лиц в кадре, реализованную с помощью заранее обученной «глубокой» нейронной сети. В этом контексте промышленную технологию глубоких нейронных сетей следует именовать технологией Галушкина – Хинтона.

К сожалению, перенести технологию поиска лиц людей в кадре на другую задачу далеко не так просто. Для обучения многослойных нейронных сетей приходится использовать огромные обучающие выборки в десятки миллионов примеров распознаваемого образа и привлекать значительные вычислительные ресурсы. Студенту-биологу или аспиранту-химику с задачей обучения «глубокой» нейронной сети под его данные не справиться.

Гораздо более простой задачей является обучение «широких» однослойных сетей искусственных нейронов [10, 11]. Пример такой сети приведен на рис. 5.

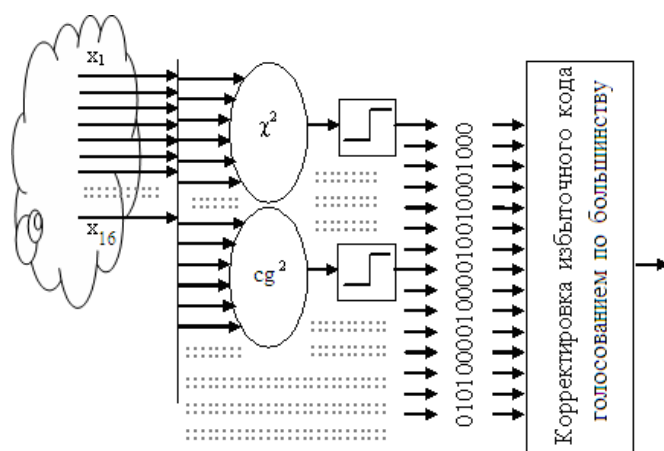


Рис. 5. Широкая нейронная сеть, состоящая из десятков нейронов, воспроизводящих работу десятков статистических критериев (нейросетевая математическая молекула)

Принципиальным отличием «широких» нейронных сетей от «глубоких» является простота их обучения. Каждый нейрон «широкой» нейронной сети обучается независимо от других нейронов. В рассматриваемом нами случае достаточно написать программу, воспроизводящую работу того или иного статистического критерия, и поставить порог принятия решений, обеспечивающий примерно одинаковые вероятности появления ошибок первого и второго рода.

Формальное описание нейронов среднего геометрического дано в табл. 1, программная реализация для еще 9 нейронов дана в приложениях:

- 1) хи-квадрат нейрон Пирсона (Приложение 1.2);
- 2) нейрон суммы «хвостов» (Приложение 1.3);
- 3) нейрон Крамера – фон Мизеса (Приложение 1.5);
- 4) нейрон Смирнова – Крамера – фон Мизеса (Приложение 1.5);
- 5) нейрон Андерсона – Дарлингга (Приложение 1.5);
- 6) нейрон Муроты Такеучи (Приложение 1.5);
- 7) интегральный нейрон квадрата среднего геометрического (Приложение 1.6);
- 8) интегро-дифференциальный нейрон квадрата среднего геометрического (Приложение 1.6);
- 9) интегральный нейрон среднего гармонического (Приложение 1.7).

Располагая предложенными данными, можно построить нейросетевое обобщение 10 статистических критериев или создать искусственную нейросетевую молекулу с длиной выходного кода в 10 бит. Число выходных состояний такой молекулы $2^{10}=1024$. При этом исчезает очень сложная задача обучения «глубоких» нейронных сетей, анализирующих спектральные линии:

- 1) искусственной молекулы среднего геометрического (рис. 4);
- 2) искусственной хи-квадрат молекулы (Приложение 1.2.);
- 3) искусственной молекулы суммы «хвостов» (Приложение 1.3.).

Искусственных молекул, обладающих дискретными выходными состояниями, может быть построено как угодно много, однако их применение затруднительно. Для каждой из них нужно обучать «глубокую» многослойную сеть искусственных нейронов, что требует достаточно высокой квалификации исполнителей и привлечения значительных вычислительных ресурсов.

Совершенно иная ситуация возникает, когда мы собираем однослойную сеть из десятков нейронов, построенных как аналоги статистических критериев [12–15]. Обучение такой нейронной сети тривиально, и она дает длинный выходной код с высокой избыточностью. В подобных кодах легко обнаруживать и корректировать ошибки голосованием по большинству состояний их разрядов.

7. Прогнозирование ожидаемых значений вероятностей ошибок для 100 искусственных нейронов

В случае использования простейшего решающего правила (голосование по большинству) результат работы 100 сети из нейронов сильно зависит от корреляционной сцепленности [16, 17] выходных разрядов нейросетевой молекулы.

Данные рис. 6 построены на программном моделировании (Приложение 1.8.), воспроизводящем разные уровни корреляционной сцепленности выходных разрядов искусственной молекулы для 3 и 5 нейронов. При моделировании принято, что среднее геометрическое вероятностей ошибок объединяемых нейронов составляет 0.252 (это число соответствует 4 нейронам, промоделированным в прил. 1.5).

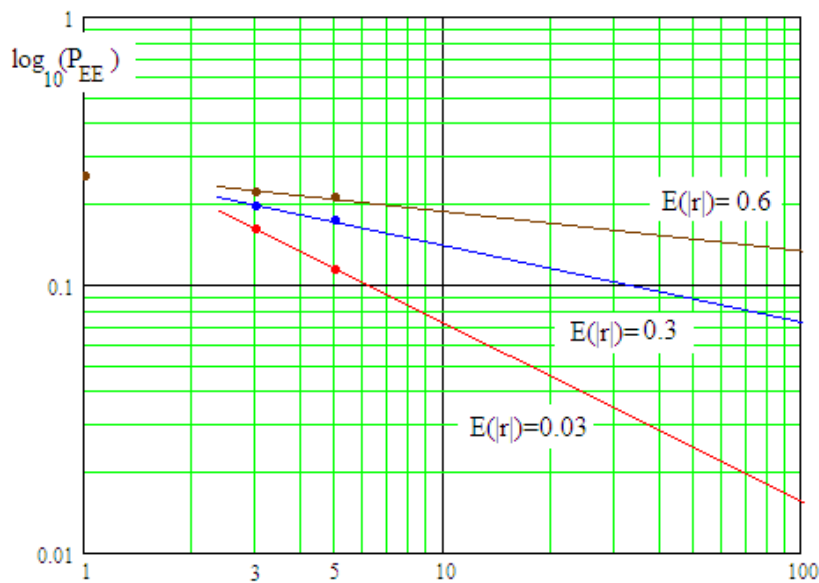


Рис. 6. Прогноз вероятностей ошибок с ростом числа нейронов при разном уровне коррелированности (сцепленности) разрядов выходного кода нейросетевой молекулы

Заключение

Из рис. 6 видно, что для нейросетевой молекулы, собранной из 100 нейронов, простейшее решающее правило дает вероятности ошибок 0.017, что вполне приемлемо для практики при слабо коррелированных откликах нейронов $E(|r|)=0.03$. Столь низкое значение корреляционных связей достигнуто специальным подбором статистических нейронов. Если пользоваться любыми известными статистическими критериями (их создано в прошлом веке более 200), то результаты будут много скромнее. Математики, создававшие статистические критерии в прошлом веке, заботились только об их мощности. В прошлом веке никто не объединял критерии в группы для совместной статистической обработки, соответственно, никто не интересовался тем, насколько данные статистических критериев между собой связаны (коррелированы).

Автор надеется, что примеры программ на языке MathCAD позволят читателям проверить самостоятельно приведенные в книге утверждения. К сожалению, все современные коммерческие математические пакеты программ повторяют «чистую» математику прошлого века и друг друга до пятого знака десятичной арифметики. В плохо обусловленных задачах (например, при малых выборках) коммерческие продукты «просто» не работают. В этом востребованном практикой месте современная коммерческая математика боится оказывать услуги, так как там не работает классическая бесплатная математика прошлого века.

Автор убежден, что множество некорректных задач может быть решено обучением «глубоких» и «широких» искусственных нейронных сетей, собранных в виде искусственных статистических молекул. Эффективное обучение конструкций нейросетевой математики в ближайшее время, видимо, станет фактором конкуренции между представителями коммерческой математики.

Видимо, коммерческие математики будут соревноваться за право присутствовать на рынке услуг решения некорректных задач, доказывая обществу, что их нейросетевое обобщение работает лучше, чем у соседа, и дает больше достоверных десятичных знаков. Тренер, обучавший нейросетевое приложение фирмы XXXX, обществом будет признан лучше других тренеров таких же фирм, например, из-за того, что тренировал свое «глубокое» нейросетевое приложение на более мощной вычислительной машине. Другой тренер станет лучше всех, так как улучшит методику тренировки нейросетевого приложения своей фирмы или своего университета. Мы вновь станем свидетелями соревнований математиков как и в средневековье.

Существует ли диалектика развития вычислительной техники по закону Мура, неизвестно. Однако диалектика развития математического материализма существует; математика, как и другие технологии, развивается не по кругу, а по спирали. Сегодня мы пользуемся такими понятиями, как химическая молекула и физическая молекула. Надеюсь, что завтра мы будем пользоваться математическими молекулами, хотя бы при статистической обработке малых выборок.

Библиографический список

1. Dahiya, R. C. How many class in the Pearson hi-square test? / R. C. Dahiya, J. Gurland // Journal of the American Statistical Association. – 1973. – Vol. 68, № 303. – P. 707–712.
2. Манин, Ю. И. Вычислимое и невычислимое / Ю. И. Манин // Кибернетика. – Москва : Сов. радио, 1980. – 128 с. – URL: http://publ.lib.ru/ARCHIVES/M/MANIN_Yuriy_Ivanovich/Manin_Yu.I..html#h
3. Нильсен, М. Квантовые вычисления и квантовая информация : монография / М. Нильсен, И. Чанг. – Москва : Мир, 2006. – 821 с.
4. Ахметов, Б. Б. Дискретный характер закона распределения хи-квадрат критерия для малых тестовых выборок / Б. Б. Ахметов, А. И. Иванов, Ю. В. Фунтикова // Вестник Национальной академии наук Республики Казахстан. – 2015. – № 1. – С. 17–25. – URL: http://nauka-nanrk.kz/ru/assets/журнал%202015%201/Вестник_01_2015.pdf
5. Кулагин, В. П. Циклические непрерывно-квантовые вычисления: усиление мощности хи-квадрат критерия на малых выборках / В. П. Кулагин, Б. Б. Ахметов, А. И. Иванов, А. И. Газин // Аналитика. – 2016. – Т. 30, № 5. – С. 22–29. – URL: <http://www.j-analytics.ru/journal/article/5679>
6. Иванов, А. И. Сравнение мощности критерия среднего геометрического и Крамера – фон Мезиса на малых выборках биометрических данных / А. И. Иванов, Е. А. Малыгина, К. А. Перфилов, С. Е. Вятчанин // Модели, системы, сети в экономике, технике, природе и обществе. – 2016. – № 2. – С. 155–158.
7. Быстрый алгоритм обучения сетей искусственных нейронов квадрата среднего геометрического плотностей распределения значений многомерных биометрических данных / В. И. Волчихин, А. И. Иванов, К. А. Перфилов, Е. А. Малыгина, Ю. И. Серикова // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Технические науки. – 2018. – № 3 (47). – С. 23–35.
8. Галушкин, А. И. Синтез многослойных систем распознавания образов / А. И. Галушкин. – Москва : Энергия, 1974.
9. Гудфеллоу, Я. Глубокое обучение / Я. Гудфеллоу, И. Бенджио, А. Курвиль. – Москва : ДМК Пресс, 2017. – 652 с.
10. ГОСТ Р 52633.5–2011 «Защита информации. Техника защиты информации. Автоматическое обучение нейросетевых преобразователей биометрия-код доступа».
11. Технология использования больших нейронных сетей для преобразования нечетких биометрических данных в код ключа доступа : монография / Б. С. Ахметов, А. И. Иванов, В. А. Фунтиков, А. В. Безяев, Е. А. Малыгина. – Алматы : LEM, 2014. – 144 с. – URL: <http://portal.kazntu.kz/files/publicate/2014-06-27-11940.pdf>
12. Коллекция искусственных нейронов, эквивалентных статистическим критериям, для их совместного применения при проверке гипотезы нормальности малых выборок биометрических данных / А. И. Иванов, А. Г. Банных, Е. Н. Куприянов, В. С. Лукин, К. А. Перфилов, К. Н. Савинов // Безопасность информационных технологий : сб. науч. ст. по материалам I Всерос. науч.-техн. конф. – Пенза, 2019. – С. 156–164.
13. Иванов, А. И. Нейросетевое обобщение семейства статистических критериев среднего геометрического и среднего гармонического для прецизионного анализа малых выборок биометрических данных / А. И. Иванов, К. А. Перфилов, В. С. Лукин ; под общ. ред. В. С. Безяева // Информационно-управляющие телекоммуникационные системы, средства поражения и их техническое обеспечение : сб. науч. ст. Всерос. науч.-техн. конф. – Пенза : АО «НПП «Рубин»», 2019. – С. 50–63.
14. Иванов, А. И. Нейросетевое обобщение классических статистических критериев для обработки малых выборок биометрических данных / А. И. Иванов, Е. Н. Куприянов, С. В. Туреев // Надежность. – 2019. – № 2. – С. 22–27.

15. Волчихин, В. И. Нейросетевой анализ малых выборок биометрических данных с использованием хи-квадрат критерия и критериев Андерсона – Дарлинга / В. И. Волчихин, А. И. Иванов, А. В. Безяев, Е. Н. Куприянов // Инженерные технологии и системы. – 2019. – Т. 29, № 2. – С. 205–217.

16. Иванов, А. И. Численная оценка показателей квантовой сцепленности выходных кубит нейросетевой молекулы преобразователя биометрических данных : учеб. пособие / А. И. Иванов. – Пенза : Изд-во АО «ПНИЭИ», 2018. – 27 с. – URL: <http://пниэи.рф/activity/science/нос/BOOK18-2.pdf>

17. Иванов, А. И. Многомерная нейросетевая обработка биометрических данных с программным воспроизведением эффектов квантовой суперпозиции / А. И. Иванов. – Пенза : Изд-во АО «ПНИЭИ», 2016. – 133 с. – URL: <http://пниэи.рф/activity/science/BOOK16.pdf>

Приложение 1.1

Программа, позволяющая наблюдать спектральные линии хи-квадрат молекулы при ее возбуждении данными с нормальным и равномерным распределениями

```

χ²(tr) :=
  x ← sort(rnorm(16,0,1 + tr))
  m ← mean(x)
  σ ← stdev(x)
  for i ∈ 0..6
    | intervi ← (i - 3)·σ + m
    | Pi ← pnorm([(i - 3)·σ + m],m,σ)
  n ← hist(interv,x)
  χ² ← ∑i=05 [ni - 16·(Pi+1 - Pi)]² / 16·(Pi+1 - Pi)
  χ²
  i := 0..9999
  rri := rnd(0.01)
  xxi := χ²(tri)
  j := 0..999
  intj := 0.01·j
  n := hist(int,xx)
  n := n / 9999

```

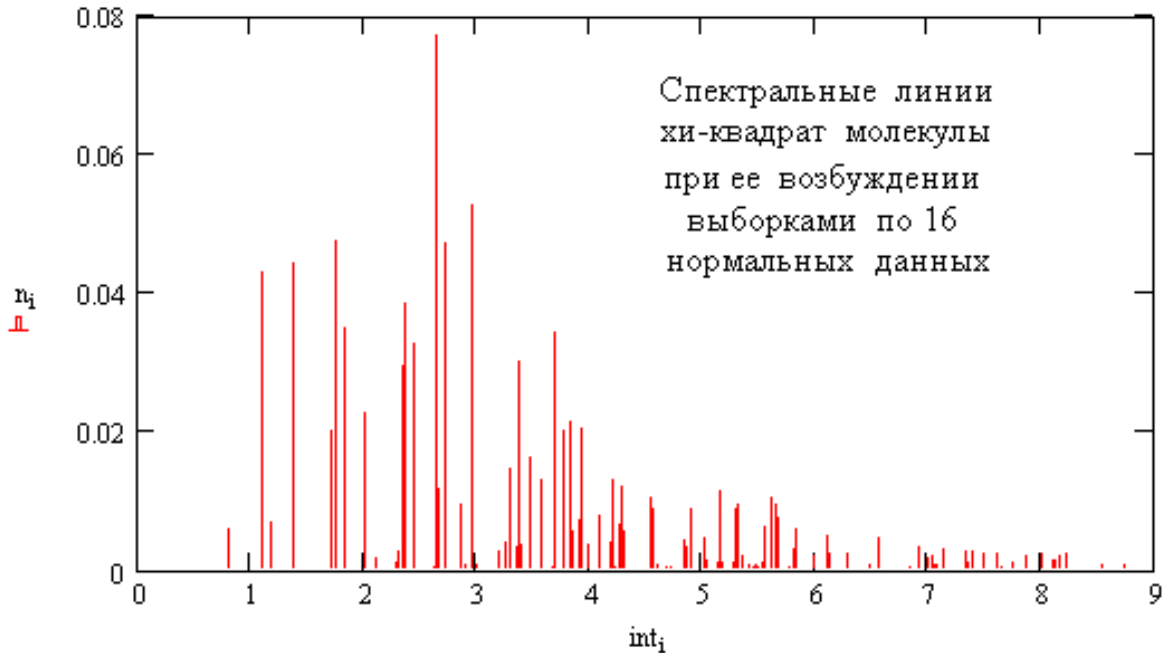


Рис. П.1.1.1. Линии амплитуд вероятности хи-квадрат молекулы, наблюдаемые при условии ее возбуждения данными с нормальным распределением

Продолжение программы моделирования хи-квадрат молекулы (ее возбуждение данными с равномерным распределением значений)

```

 $\chi^2 r(rr) :=$ 
  x ← sort(runif(16, -3 - rr, 3 + rr))
  m ← mean(x)
   $\sigma \leftarrow$  stdev(x)
  for i ∈ 0..6
    | intervi ← (i - 3) ·  $\sigma$  + m
    | Pi ← pnorm[[(i - 3) ·  $\sigma$  + m], m,  $\sigma$ ]
  n ← hist(interv, x)
   $\chi^2 \leftarrow \sum_{i=0}^5 \frac{[n_i - 16 \cdot (P_{i+1} - P_i)]^2}{16 \cdot (P_{i+1} - P_i)}$ 
   $\chi^2$ 
  i := 0..9999
  rri := rnd(0.01)
  xxxi :=  $\chi^2 r(rr_i)$ 
  j := 0..999
  intj := 0.01 · j
  nr :=  $\frac{\text{hist}(\text{int}, \text{xxx})}{9999}$ 

```

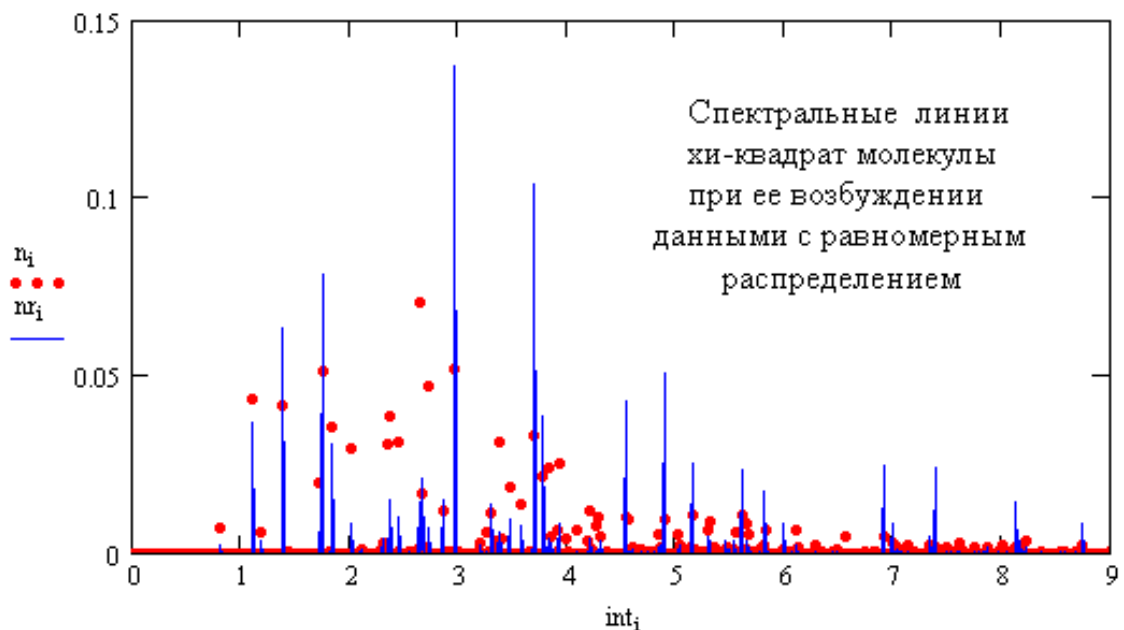


Рис. П.1.1.2. Амплитуды вероятности дискретных спектров, появляющихся при возбуждении хи-квадрат молекулы нормальными данными (точки) и равномерно распределенными данными (вертикальные линии)

Точками обозначены вершины спектральных линий хи-квадрат молекулы при ее возбуждении 10 000 выборками нормальных данных. Видно значительное расхождение амплитуд вероятности линий спектра (равномерное распределение) и точек (нормальное распределение данных, возбуждающих хи-квадрат молекулу).

Возбуждение хи-квадрат нейрона выборками нормальных и равномерных данных

```

χ2(rr) :=
  x ← sort(mnorm(16,0,1 + rr))
  m ← mean(x)
  σ ← stdev(x)
  for i ∈ 0..6
    |
    |   (x15 - x0) · i
    |   ─────────── + x0
    |   6
    |   ┌──────────────────────────────────────────────────────────┐
    |   │ Pi ← pnorm[ ───────────────────────────────────────────, m, σ ]
    |   │ ───────────────────────────────────────────────────────────┘
    |   │   (x15 - x0) · i
    |   │   ─────────── + x0
    |   │   6
    |   └──────────────────────────────────────────────────────────┘
  n ← hist(interv, x)
  χ2 ← ∑i=05 [  $\frac{n_i - 16 \cdot (P_{i+1} - P_i)}{16 \cdot (P_{i+1} - P_i)}$  ]2
  i := 0..9999
  rr1 := rnd(0.01)
  xx1 := χ2(rr1)
  j := 0..999
  intj := 0.1 · j
  n :=  $\frac{\text{hist}(\text{int}, \text{xx})}{9999}$ 
  χ2
  
```



Рис. П.1.2.1. Отклики классического хи-квадрат критерия, построенные на обычных гистограммах (см. левую часть рис. 2 основного текста)

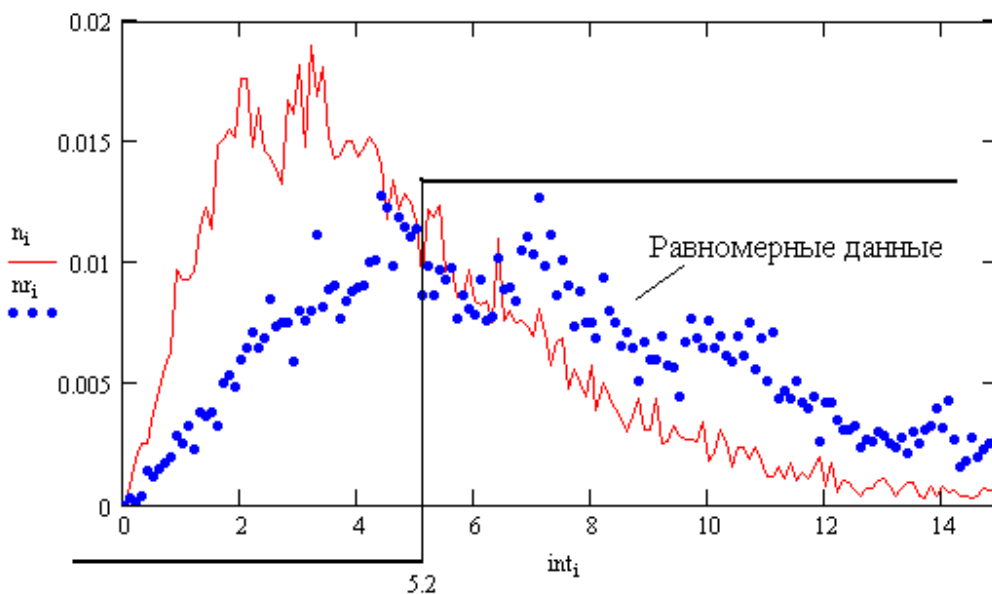
Продолжение программы, воспроизводящей работу хи-квадрат нейрона, настроенного разделять нормальные и равномерные данные

```

 $\chi^2_{nr}(rr) :=$ 
  x  $\leftarrow$  sort(runif(16, -3 - rr, 3 + rr))
  m  $\leftarrow$  mean(x)
   $\sigma \leftarrow$  stdev(x)
  for i  $\in$  0..6
     $\text{interv}_i \leftarrow \frac{(x_{15} - x_0) \cdot i}{6} + x_0$ 
     $P_i \leftarrow \text{pnorm}\left[\frac{(x_{15} - x_0) \cdot i}{6} + x_0, m, \sigma\right]$ 
  n  $\leftarrow$  hist(interv, x)
   $\chi^2 \leftarrow \sum_{i=0}^5 \frac{[n_i - 16 \cdot (P_{i+1} - P_i)]^2}{16 \cdot (P_{i+1} - P_i)}$ 
   $\chi^2$ 

  i := 0..9999
  rr1 := rnd(0.01)
  xxr1 :=  $\chi^2_{nr}(rr_1)$ 

  j := 0..999
  intj := 0.1 · j
  nr :=  $\frac{\text{hist}(\text{int}, \text{xxr})}{9999}$ 
  
```



Вероятность ошибок
первого рода

$$1 - \sum_{j=0}^{52} n_j = 0.352$$

Вероятность ошибок
второго рода

$$\sum_{j=0}^{52} nr_j = 0.343$$

Рис. П.1.2.2. Положение квантователя хи-квадрат нейрона, обеспечивающего значение равновероятных ошибок первого и второго рода при разделении нормальных и равномерных данных

Программная реализация искусственной статистической молекулы суммы «хвостов» малой выборки

```

sx(rr) := | x ← sort(mnorm(16,0,1 + rr))
          | m ← mean(x)
          | σ ← stdev(x)
          | for i ∈ 0..6
          |   intervi ← (i - 3)·σ + m
          | n ← hist(interv,x)
          | sx ← n0 + n1 + n3 + n4
          | sx

sxx(rr) := | x ← sort(runif(16,-3 - rr,3 + rr))
           | m ← mean(x)
           | σ ← stdev(x)
           | for i ∈ 0..6
           |   intervi ← (i - 3)·σ + m
           | n ← hist(interv,x)
           | sx ← n0 + n1 + n3 + n4
           | sx
    
```

```
i := 0..9999
```

```
rr1 := rnd(0.01)   xx1 := sx(rr1)   xxx1 := sxx(rr1)
```

```
j := 0..999   intj := 0.01·j   n := hist(int,xx) / 9999   nr := hist(int,xxx) / 9999
```

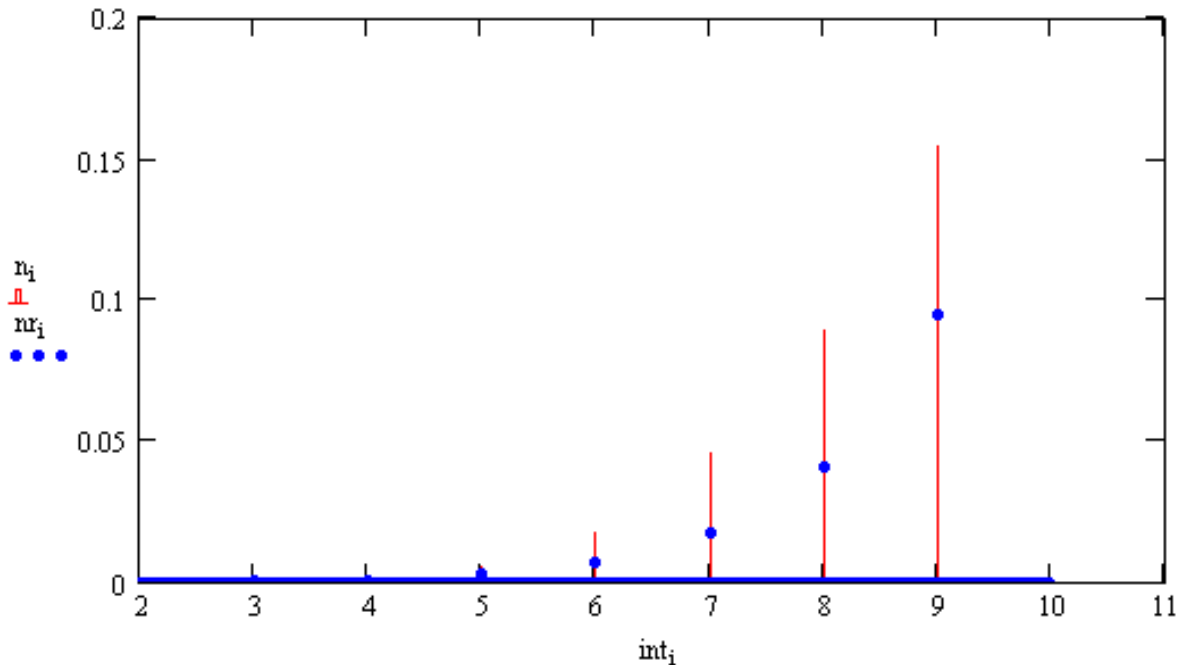


Рис. П.1.3.1. Амплитуда спектральных линий молекулы суммы хвостов малой выборки для нормальных данных (вертикальные линии) и для равномерных данных (точки)

Программная реализация искусственного нейрона суммы «хвостов» малой выборки

```

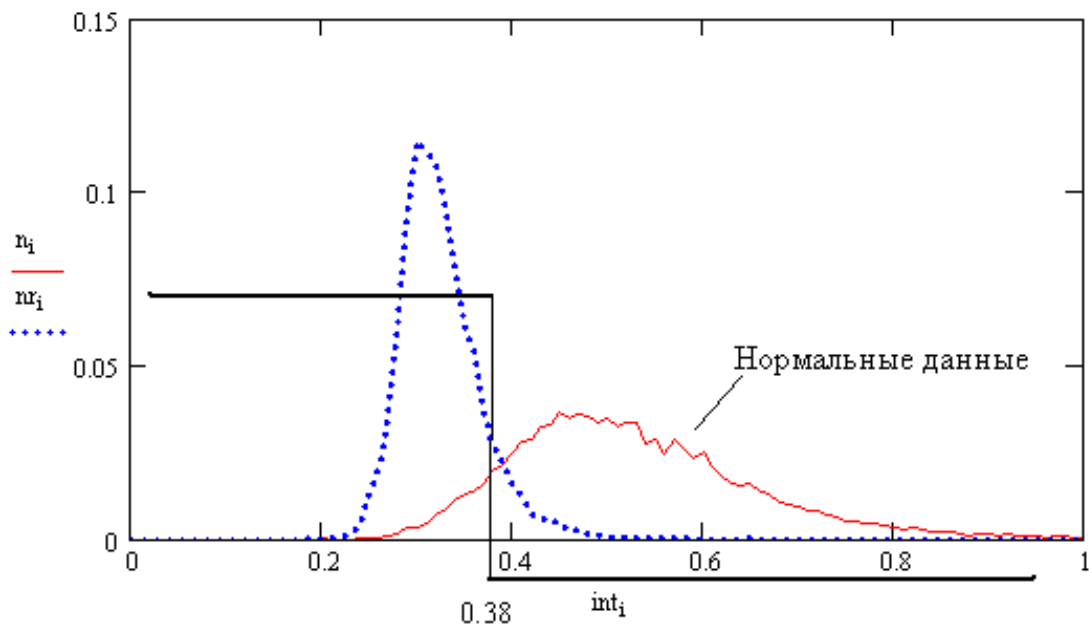
sx(rr) := | x ← sort(rnorm(16,0,1 + rr))
          | m ← mean(x)
          | σ ← stdev(x)
          | for i ∈ 0..15
          |   ni ← dnorm(xi,m,σ)
          | sx ← n0 + n1 + n14 + n15
          | sx

sxx(rr) := | x ← sort(runif(16,-3 - rr,3 + rr))
           | m ← mean(x)
           | σ ← stdev(x)
           | for i ∈ 0..15
           |   ni ← dnorm(xi,m,σ)
           | sx ← n0 + n1 + n14 + n15
           | sx
    
```

i := 0..9999

rr₁ := rnd(0.01) xx₁ := sx(rr₁) xrx₁ := sxx(rr₁)

j := 0..999 int_j := 0.01 · j n := $\frac{\text{hist}(\text{int}, \text{xx})}{9999}$ nr := $\frac{\text{hist}(\text{int}, \text{xrx})}{9999}$



Вероятность ошибки
первого рода

$$\sum_{i=0}^{38} n_i = 0.104$$

Вероятность ошибки
второго рода

$$1 - \sum_{i=0}^{38} nr_i = 0.084$$

Рис. П.1.4.1. Непрерывные спектры состояний сумматора нейрона суммы «хвостов» малой выборки при воздействии на него нормальными или равномерными данными

Программная реализация четырех искусственных статистических нейронов

Программная реализация четырех искусственных статистических нейронов:

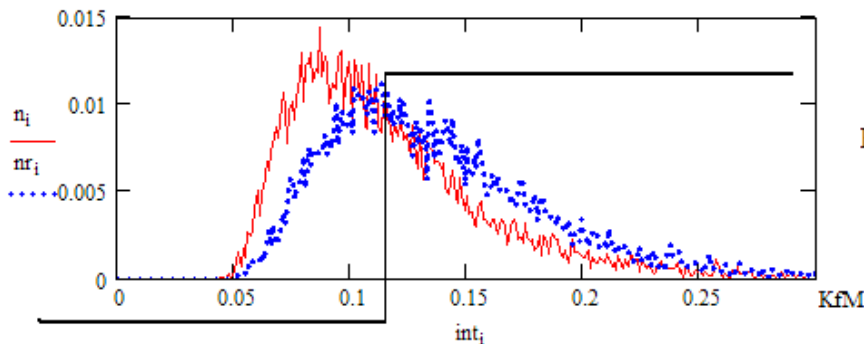
- Крамера – фон Мизеса (KfM);
- Смирнова – Крамера – фон Мизеса (SKfM);
- Андерсона – Дарлингга (AD);
- Муроты Такеучи (MT).

<pre> sx(rr) := x ← sort(mnorm(16,0,1 + rr)) m ← mean(x) σ ← stdev(x) for i ∈ 0..15 P_i ← pnorm(x_i,m,σ) KfM ← ∑_{i=0}¹⁵ (P_i - $\frac{i-0.5}{16}$)² SKfM ← ∑_{i=0}¹⁵ [pnorm(x_i - $\frac{i-0.5}{16}$,m,σ)]² AD ← ∑_{i=0}¹⁵ $\frac{(P_i - \frac{i-0.5}{16})^2}{P_i(1-P_i)}$ MT ← [∑_{i=0}¹⁵ cos($\frac{(x_i - x_{15})}{1.8}$)] (KfM SKfM AD MT) </pre>	<pre> sxr(rr) := x ← sort(runif(16,-3 - rr,3 + rr)) m ← mean(x) σ ← stdev(x) for i ∈ 0..15 P_i ← pnorm(x_i,m,σ) KfM ← ∑_{i=0}¹⁵ (P_i - $\frac{i-0.5}{16}$)² SKfM ← ∑_{i=0}¹⁵ [pnorm(x_i - $\frac{i-0.5}{16}$,m,σ)]² AD ← ∑_{i=0}¹⁵ $\frac{(P_i - \frac{i-0.5}{16})^2}{P_i(1-P_i)}$ MT ← [∑_{i=0}¹⁵ cos($\frac{(x_i - x_{15})}{1.8}$)] (KfM SKfM AD MT) </pre>
--	---

i := 0..9999

rr_i := md(0.01) xx_i := (sx(rr_i)^T)₀ xxr_i := (sxr(rr_i)^T)₀

j := 0..999 int_j := 0.001·j n := $\frac{\text{hist}(\text{int}, \text{xx})}{9999}$ nr := $\frac{\text{hist}(\text{int}, \text{xxr})}{9999}$



Вероятность ошибки
первого рода

$$1 - \sum_{i=0}^{117} n_i = 0.398$$

Вероятность ошибки
второго рода

$$\sum_{i=0}^{117} nr_i = 0.408$$

Рис. П.1.5.1. Программная реализация искусственных нейронов и график вероятности выходных состояний нейрона Крамера – фон Мизеса

Графики состояний еще трех искусственных нейронов

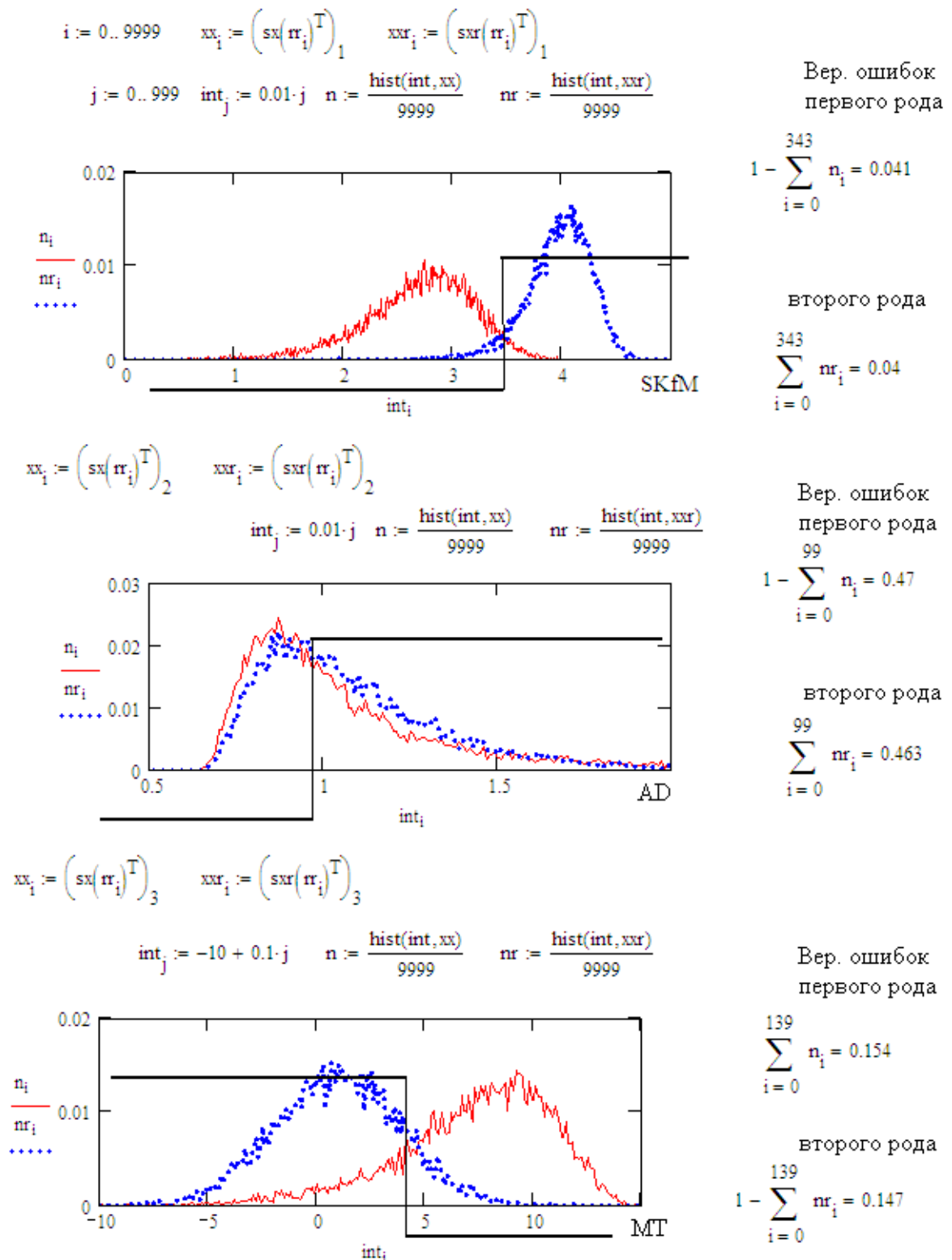


Рис. П.1.5.2. Графики состояний искусственных нейронов Смирнова – Крамера – фон Мизеса (SKfM), Андерсона – Дарлингга (AD), Муроты Такеучи (MT) при их возбуждении нормальными данными и данными с равномерным распределением

Моделирование дифференциального и интегрального вариантов нейрона квадрата среднего геометрического с оценкой коррелированности их данных

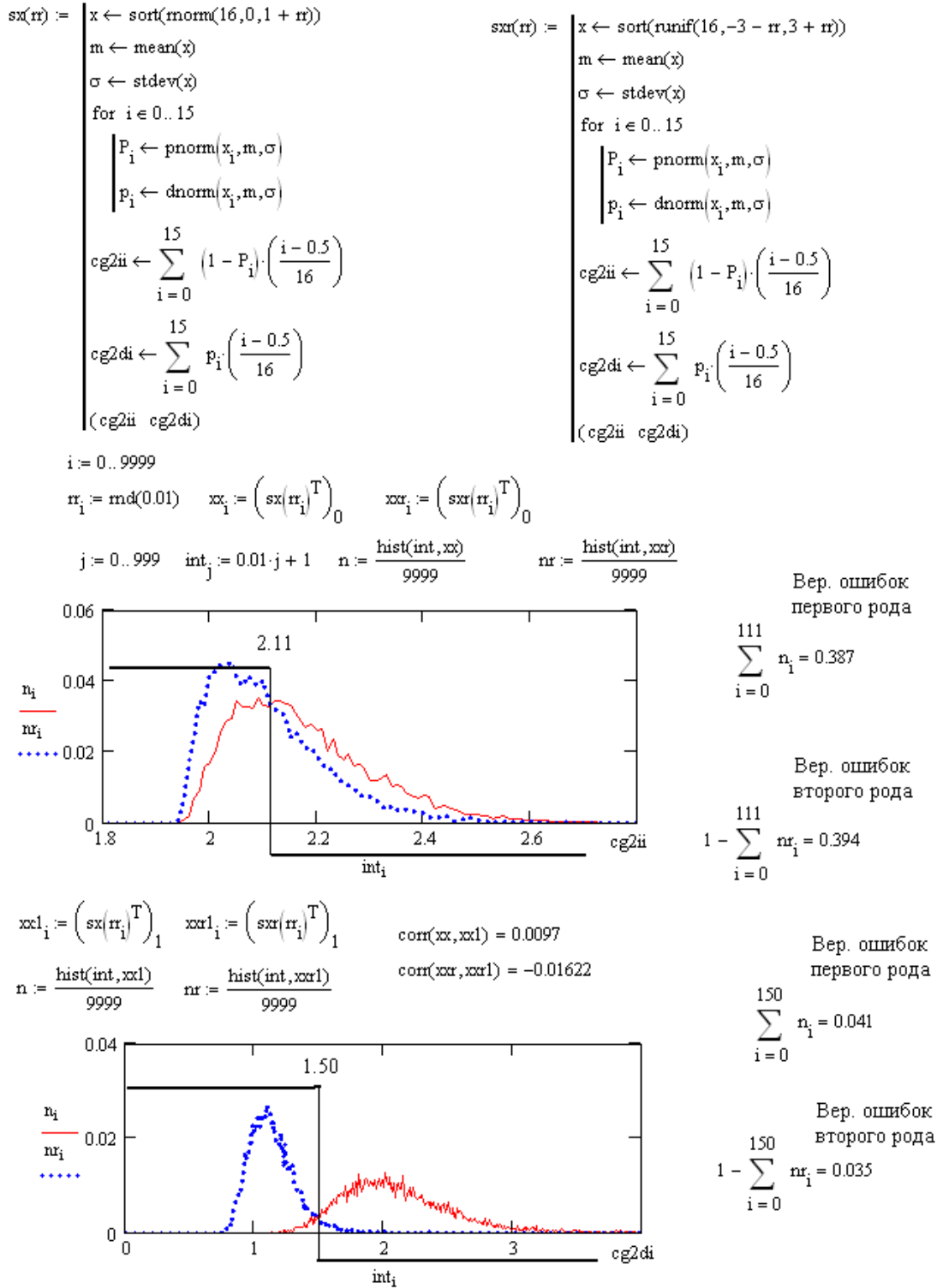


Рис. П.1.6.1. Отсутствие корреляции у дифференциальных и интегральных нейронов семейства среднего геометрического

Связь коррелированности непрерывных внутренних спектров искусственных нейронов с вероятностями появления их дискретных выходных состояний и энтропией пары разрядов кода

```

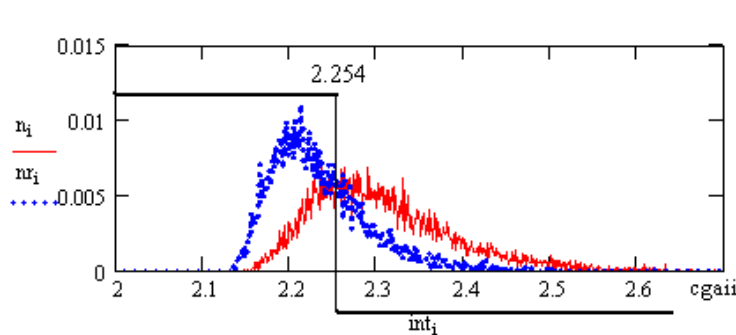
sx(r) := | x ← sort(mom(16,0,1+r))
          m ← mean(x)
          σ ← stdev(x)
          for i ∈ 0..15
            P1 ← pnom(x1,m,σ)
            cg2ii ← ∑i=015 (1 - P1) · (i - 0.5) / 16
            cgaii ← ∑i=015 [(1 - P1) · (i - 0.5)] / [(1 - P1) + i / 16]
          (cg2ii cgaii)
  
```

```

sxx(r) := | x ← sort(runif(16,-3-r,3+r))
           m ← mean(x)
           σ ← stdev(x)
           for i ∈ 0..15
             P1 ← pnom(x1,m,σ)
             cg2ii ← ∑i=015 (1 - P1) · (i - 0.5) / 16
             cgaii ← ∑i=015 [(1 - P1) · (i - 0.5)] / [(1 - P1) + i / 16]
           (cg2ii cgaii)
  
```

```

i := 0..9999
rr1 := md(0.01)  xx1 := (sx(rr1)T)0  xxx1 := (sxx(rr1)T)0  xx11 := (sx(rr1)T)1  xxx11 := (sxx(rr1)T)1
int1 := 0.001 · i  n := hist(int,xx1) / 9999  nr := hist(int,xxx1) / 9999  corr(xx,xx1) = 0.0034  corr(xxx,xxx1) = -0.01118
  
```



Вер. ошибок первого рода
 $\sum_{i=0}^{2254} n_i = 0.299$

Вер. ошибок второго рода
 $1 - \sum_{i=0}^{2254} nr_i = 0.29$

```

P00 := | k ← 0
        for i ∈ 0..9999
          k ← k + 1 if xx1 ≥ 2.11 ∧ xx11 ≥ 2.254
        k-0.0001
  
```

```

P01 := | k ← 0
        for i ∈ 0..9999
          k ← k + 1 if xx1 ≥ 2.11 ∧ xx11 < 2.254
        k-0.0001
  
```

```

P10 := | k ← 0
        for i ∈ 0..9999
          k ← k + 1 if xx1 < 2.11 ∧ xx11 ≥ 2.254
        k-0.0001
  
```

```

P11 := | k ← 0
        for i ∈ 0..9999
          k ← k + 1 if xx1 < 2.11 ∧ xx11 < 2.254
        k-0.0001
  
```

```

Энтропия 2-х разрядов
Entr := -P00·log(P00,2) - P01·log(P01,2) - P10·log(P10,2) - P11·log(P11,2)
Entr = 1.807  R = (1 - Entr/2)  R = 0.096 - показатель сцепленности
  
```

Рис. П.1.7.1. Расчет показателя сцепленности двух разрядов, получаемых от двух нейронов

Приложение 1.8.1

Три нейрона со слабо коррелированными состояниями, заранее обученные распознавать малые выборки с нормальными данными

```

a := 5.4      n := 99999      z := mnorm(n,0,1)

      x0 := mnorm(n,0,1)      x1 := mnorm(n,0,1)      x2 := mnorm(n,0,1)
x0 :=  $\frac{a \cdot x0 + z}{\sqrt{1 + a^2}}$       x1 :=  $\frac{a \cdot x1 + z}{\sqrt{1 + a^2}}$       x2 :=  $\frac{a \cdot x2 + z}{\sqrt{1 + a^2}}$ 

corr(x0,x1) = 0.035      corr(x0,x2) = 0.032      corr(x1,x2) = 0.034

P0 :=  $\left\{ \begin{array}{l} k \leftarrow 0 \\ \text{for } i \in 0..99998 \\ \quad k \leftarrow k + 1 \text{ if } x0_i < -0.672 \\ k \cdot 0.00001 \end{array} \right.$       P0 = 0.249

p := -0.672

P0 :=  $\left\{ \begin{array}{l} k \leftarrow 0 \\ \text{for } i \in 0..99998 \\ \quad k \leftarrow k + 1 \text{ if } x0_i < p \wedge x1_i < p \wedge x2_i < p \\ k \cdot 0.00001 \end{array} \right.$       Все_3_нуля
      P0 = 0.01803

P1 :=  $\left\{ \begin{array}{l} k \leftarrow 0 \\ \text{for } i \in 0..99998 \\ \quad \left\{ \begin{array}{l} k \leftarrow k + 1 \text{ if } x0_i > p \wedge x1_i < p \wedge x2_i < p \\ k \leftarrow k + 1 \text{ if } x0_i < p \wedge x1_i > p \wedge x2_i < p \\ k \leftarrow k + 1 \text{ if } x0_i < p \wedge x1_i < p \wedge x2_i > p \end{array} \right. \\ k \cdot 0.00001 \end{array} \right.$       Два_нуля
      P1 = 0.142
      P0 + P1 = 0.16

      Выигрыш_по_вероятности
       $\frac{0.252}{0.162} = 1.556$ 

```

Рис. П.1.8.1.1. Программа эмуляции трех нейронов с корректировкой их кода по Хэммингу снижает вероятности ошибок примерно в полтора раза в случае слабой коррелированности данных на уровне 0.03 и вероятности ошибок одного нейрона 0.252

Для заметок

Научное издание

Иванов Александр Иванович

**Искусственные математические молекулы: повышение
точности статистических оценок на малых выборках
(программы на языке MathCAD)**

Редактор *А. П. Федосова*
Технический редактор *Ю. В. Анурова*
Компьютерная верстка *Ю. В. Ануровой*

Подписано в печать 22.01.2020.
Формат 60×84¹/₁₆. Усл. печ. л. 2,09.
Заказ № 009446. Тираж 300.

Издательство ПГУ
440026, Пенза, Красная, 40
Тел./факс: (8412) 56-47-33; e-mail: iic@pnzgu.ru

Вниманию авторов!

Издательство ПГУ выпускает учебную, научную и художественную литературу, презентационную и акцидентную продукцию, а также полноцветные юбилейные и мемориальные издания в соответствии с ГОСТ 7.60–2003.

Издательство ПГУ принимает к изданию рукописи, подготовленные с использованием текстового редактора Microsoft Word for Windows версий **2003 и выше**. Формат – А4, основной шрифт – Times New Roman, 14–16 pt через одинарный интервал (минимальный размер шрифта в таблицах и сносках – 12,5 pt). Тип файла в электронном виде – doc, docx.

Работа должна содержать индекс УДК, аннотацию.

Аннотация (ГОСТ 7.86–2003, ГОСТ 7.9–1995) включает характеристику основной темы, проблемы объекта, цели работы и ее результаты. В аннотации указывают, что нового несет в себе данный документ в сравнении с другими, родственными по тематике и целевому назначению. Аннотация может включать сведения о достоинствах произведения. Текст аннотации начинают фразой, в которой сформулирована главная тема документа. Заканчивается аннотация читательским адресом.

Рисунки и таблицы должны быть размещены в тексте после ссылки на них (растровые рисунки представляются в виде отдельных файлов в формате jpg, BMP с разрешением 300 dpi, векторные рисунки в формате Corel Draw с минимальной толщиной линии 0,75 pt. Рисунки должны быть доступны для правки!). Они должны сопровождаться подрисуночными подписями, на все рисунки и таблицы в тексте должны быть ссылки.

Формулы в тексте выполняются только в редакторе формул **MathType версий 5.0** и выше. Символы греческого и русского алфавита должны быть набраны прямо, нежирно; латинского – курсивом, нежирно; обозначения векторов и матриц – прямо, жирно; цифры – прямо, нежирно. Наименования химических элементов набираются прямо, нежирно. Эти же требования необходимо соблюдать и в рисунках.

В списке литературы **нумерация источников** должна соответствовать очередности ссылок на них в тексте ([1], [2], ...). Номер источника указывается в квадратных скобках. Требования к оформлению списка литературы, русских и иностранных источников (ГОСТ 7.1–2003): для книг – фамилия и инициалы автора, название, город, издательство, год издания, том, количество страниц; для журнальных статей, сборников трудов – фамилия и инициалы автора, название статьи, полное название журнала или сборника, серия, год, том, номер, страницы; для материалов конференций – фамилия и инициалы автора, название статьи, название конференции, город, издательство, год, страницы.

К материалам **должна** прилагаться следующая информация: фамилия, имя, отчество, контактные телефоны.

Контакты Издательства ПГУ: (8412) 56-47-33, 36-84-91. E-mail: iic@pnzgu.ru

