



**Fakulta Matematiky, Fyziky a Informatiky**

**Univerzity Komenského**

**Bratislava**

**DIPLOMOVÁ PRÁCA**

***Bratislava 2006***

***Juraj Kolesár***

**FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A  
INFORMATIKY UNIVERZITY KOMENSKÉHO  
BRATISLAVA**

**Katedra astronómie, fyziky Zeme a meteorológie**

**Diplomová práca**

**Analýza infračerveného spektra organických zlúčenín  
použitím umelých neurónových sietí**

***Diplomant: Juraj Kolesár***

***Vedúci diplomovej práce: Doc. RNDr. I. K. R. Haverlík, Csc.***

**Bratislava 2006**

## **Abstrakt**

Práca sa zaoberá možnosťou využitia umelých neurónových sietí pri analýze infračerveného spektra organických zlúčenín. Sumarizuje základné vedomosti o infračervenej spektroskopii a tradičnom postupe pri analýze nameraného spektra. Ďalej zhŕňa všeobecné poznatky o vývoji umelých neurónových sietí, na základe ktorých sa snaží zvoliť vhodný typ umelej neurónovej siete pre skúmanú problematiku. Zároveň popisuje návrh konkrétneho softvérového riešenia, ktoré bolo realizované v projekte Neuroser.

### ***Vyhlásenie***

Vyhlasujem, že som diplomovú prácu vypracoval samostatne,  
použitú literatúru uvádzam.

***25. apríl 2006***

1. Úvod.....	7
2. Súčasný stav problematiky.....	9
2.1. Infračervená spektroskopia.....	9
2.1.1. Infračervené žiarenie.....	9
2.1.2. Chemické väzby.....	10
2.1.2.1. Špecifickosť frekvencií.....	10
2.1.2.2. Rozdelenie molekulových vibrácií.....	11
2.1.2.3. Spájanie vibrácií.....	13
2.1.3. Teória absorpcie infračerveného žiarenia....	14
2.2. Spôsob merania infračerveného spektra.....	16
2.2.1. Funkcionalita spektrometra.....	16
2.2.2. Príprava vzoriek.....	17
2.3. Identifikácia infračerveného spektra.....	18
3. Cieľ práce.....	22
3.1. Úlohy práce .....	23
4. Materiál a metódy.....	24
4.1. Prirodzené neurónové siete.....	24
4.1.1. Prirodzený model.....	24
4.1.1.1 Nervová bunka - Neurón.....	25
4.1.1.2 Neurónová sieť.....	27
4.1.1.3 Adaptácia siete.....	29
4.1.1.4 Mozog a myslenie.....	29
4.2. Umelé neurónové siete.....	30
4.2.1 Umelý neurón.....	30
4.2.1.1. Hardware vs. software.....	30
4.2.1.2. Virtuálny model neurónu.....	32
4.2.2. Umelá neurónová sieť .....	33
4.2.2.1. Viacvrstvé neurónové siete.....	33
4.2.2.2. Spôsob učenia umelej neurónovej siete	35
4.2.2.3. Perceptróny.....	36
4.2.2.4. Dynamické neurónové siete.....	38
5. Výsledky.....	41

5.1. Čo je Neuroser.....	41
5.1.1. Štruktúra programu.....	41
5.1.2. GNU GPL - Ako nezabiť nádejný projekt...42	
5.1.3. Použité technológie.....	44
5.2. Implementácia databázového servera.....	46
5.2.1. Databáza spektier.....	46
5.2.2. Databáza neurónových sietí.....	48
5.3. Klientské moduly.....	50
5.3.1. Modul databázového pripojenia.....	51
5.3.2. Modul spektra.....	51
5.3.3. Modul neurónovej siete.....	52
5.3.3.3. Štruktúra neurónovej siete.....	52
5.3.3.1. Analógovo digitálny vstup.....	54
5.4. Súčasná funkcionlita.....	56
5.4.1. Proces digitalizácie spektra.....	56
5.4.2. Proces definície novej siete.....	57
5.4.2.2. Vloženie novej vrstvy.....	58
5.4.3. Proces učenia novej siete.....	59
5.4.3.2. Bootstrap.....	60
5.4.4. Pripojenie k databázovému serveru.....	61
6. Diskusia.....	63
7. Záver.....	65
8. Použitá literatúra.....	66

# 1. Úvod

Súčasnú životnú prostredie sa v posledných desaťročiach mení čoraz dynamickejšie. Je to následok antropogénnych činností, ktoré dokážu vplyvať na prostredie s oveľa väčšími následkami ako akýkoľvek iný proces odohrávajúci sa v prírode. Tento stav začína byť nebezpečný nielen pre prírodu, ale aj pre samotného človeka. Ľudia si preto začínajú uvedomovať dôležitosť sledovania niektorých veličín v prirodzených zložkách životného prostredia.

Sledovanie anorganických prvkov alebo zlúčenín sa deje prostredníctvom procesov, ktoré sú dlhé roky vyvíjajú vo vedeckej oblasti analytickej chémie. Tieto procesy sa snažia zistiť či určité substancie obsahujú nejaký prvok alebo zlúčeninu.

V súčasnosti sú mnohé tak dokonalé, že proces analýzy dokáže byť relatívne jednoducho automatizovaný prostredníctvom počítačových technológií. Výstupné hodnoty rôznych čidiel sú digitalizované a počítačový program sa postará o to, že príslušné hodnoty sú vyhľadane v príslušných tabuľkách a jednoznačným logickým algoritmom sú priradené k určitým výstupom. Toto priradenie je zvyčajne jednoznačné alebo vyhodnotené s určitou pravdepodobnosťou v rámci určenej štatistickej odchýlky.

Aj keď sú mnohé anorganické prvky alebo zlúčeniny veľmi toxické a ich výskyt v určitých zložkách životného prostredia je nežiaduci, omnoho väčším rizikom začínajú byť v rôzne organické zlúčeniny pochádzajúce napríklad zo spaľovania látok organického pôvodu ako sú ropa, uhlie alebo zo spracovania odpadov.

Mnohé z procesov spracovania organických látok boli v minulosti neobmedzene používané a výstupné produkty a najmä vedľajšie produkty boli minimálne kontrolované. Možno sa v minulosti zdalo, že kontrola organických zlúčenín nie je až taká potrebná, pretože príroda sa o tieto látky dokáže sama postarať

biodegradáciou a tieto látky zaradiť opäť do kolobehu v životnom prostredí. No mnohé výskumy ukázali že znečistenie organickými zlúčeninami je omnoho nebezpečnejšie a vyžaduje si taktiež pozornosť a kontrolu.

Organické zlúčeniny sú veľmi rôznorodé a z pohľadu klasickej analytickej chémie je ich identifikácia zložitá. Väčšina metód dokáže prítomnosť uhlíku, vodíku, kyslíku alebo dusíku, ale to nám o štruktúre respektíve vlastnostiach danej zlúčeniny nič nepovie.

Jednou z metód, ktorá dokáže identifikovať určité štruktúrne vlastnosti chemických zlúčenín je infračervená spektroskopia. Výstupom tejto analýzy je infračervené spektrum analyzovanej látky, ktoré ukazuje prítomnosť rôznych chemických väzieb na základe tvaru spektrálnej krivky.

Samotný proces zosnímania spektra je relatívne krátky. Najdlhšou zložkou analýzy je samotné skúmanie spektra. Pre zefektívnenie analýzy by bolo vhodné tento proces automatizovať. Analýza spektrálnej krivky sa robí na základe porovnávania so známymi tvarmi kriviek, ktoré boli namerané pri známych zlúčeninách. Táto metóda si vyžaduje od človeka, ktorý analyzuje, množstvo skúseností a niektoré postupy porovnávania kriviek s ich katalógovými predlohami sú často veľmi subjektívne vychádzajúc práve z predošlých skúseností.

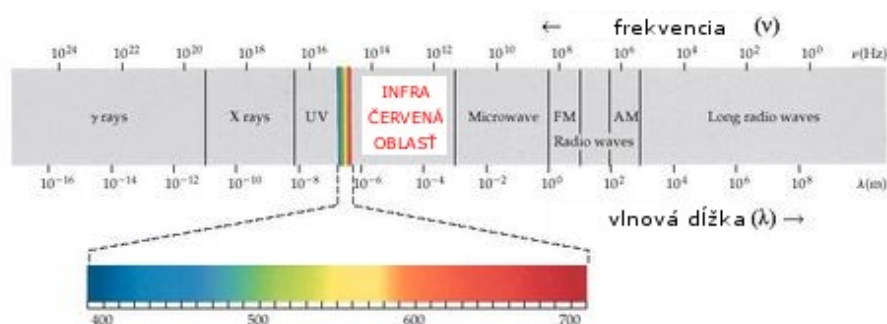
Keďže infračervené spektrum je potrebné analyzovať ako celok, automatizácia procesu analýzy pomocou klasických algoritmov neprichádza do úvahy. Preto vznikla myšlienka použitia neurónových sietí, ktoré sú schopné identifikovať súvislosti medzi jednotlivými zložkami spektra a zároveň sú schopné vložiť do analýzy určitý typ subjektivity na základe predošlých „skúseností“ získaných pri procese ich učenia.



## 2. Súčasný stav problematiky

### 2.1. Infračervená spektroskopia

Naše oči vidia iba malú časť širokého spektra elektromagnetického vlnenia. Smerom ku vyšším energiám a teda nižším vlnovým dĺžkam leží ultrafialová oblasť, na strane opačnej oblasť infračervená.



Obrázok 1

#### 2.1.1. Infračervené žiarenie

Pojem infračervené žiarenie pokrýva oblasť elektromagnetického spektra. Rozsah infračervenej oblasti je približne od  $750\text{ nm}$  do  $1\text{ mm}$ , pri frekvenciách od  $1,9 \cdot 10^{13}\text{ Hz}$  to  $1,2 \cdot 10^{14}\text{ Hz}$ . Najbežnejšie sledovaná oblasť leží medzi  $4000 - 670\text{ cm}^{-1}$ .

Pri infračervenej spektroskopii sa pri frekvencii pracuje s jednotkou recipročný centimeter ( $\text{cm}^{-1}$ ). Táto jednotka sa používa častejšie ako hertz, najmä kvôli tomu, že s hodnotami v recipročných centimetroch sa ľahšie narába. Recipročný centimeter je počet vlnových cyklov na jeden centimeter; zatiaľ čo frekvencia v cykloch za sekundu ( $\text{Hz}$ ) je totožná s počtom vlnových cyklov v  $3 \cdot 10^{10}\text{ cm}$ , čo je vzdialenosť, ktorú prekoná svetlo za jednu sekundu. Vlnová dĺžka je udávaná v mikrometroch ( $\mu$ ), miesto nanometrov z rovnakého dôvodu.

Infračervená oblasť žiarenia je použiteľná pre analýzu organických zlúčenín. Delí sa na tri oblasti na základe vlnovej dĺžky a na základe ich vzťahu ku viditeľnému spektru.

Oblasť	Vlnová dĺžka [mm]	Vlnnosť [cm <sup>-1</sup> ]
Blízka	0.78 - 2.5	4000 - 12800
Stredná	2.5 – 50	200 – 4000
Vzdialená	50 – 1000	200 – 10

Tabuľka 1

-*Vzdialená infračervená oblasť* leží vedľa oblasti mikrovln, má nízke energie a používa sa pre rotačnú spektroskopiu.

-*Stredná infračervená oblasť* sa používa pri štúdiu základných vibrácií a pripojených rotačno-vibračných štruktúr.

-*Blízka infračervená oblasť* s najvyššími energiami môže excitovať harmonické vibrácie.

### 2.1.2. Chemické väzby

Molekuly sú flexibilné, pohybujúce sa skupiny atómov. Atómy v molekulách konštantne oscilujú okolo svojich pozícií. Väzby medzi atómami v molekulách rôznych zlúčenín nie sú pevné. Sú skôr ako pružinky, ktoré spájajú jednotlivé atómy, ktoré potom môžu oscilovať okolo stabilnej polohy. Dĺžka väzby a uhly väzby sa stále menia vďaka vibráciám. Okrem toho dochádza ešte ku rotácii atómov alebo skupín atómov okolo jednoduchej väzby, ktorá pôsobí ako os otáčania. Všetky tieto pohyby môžeme zhrnúť do kategórie molekulových vibrácií.

#### 2.1.2.1. Špecifickosť frekvencií

Infračervená spektroskopia je založená na tom, že chemické väzby majú špecifické frekvencie, pri ktorých vibrujú zodpovedajúco ku svojim energetickým hladinám. Molekula absorbuje infračervené žiarenie, keď vibrácie atómov v molekule produkujú oscilujúce

elektrické pole s rovnakou frekvenciou ako je frekvencia dopadajúceho žiarenia.

Rezonančné frekvencie alebo vibračné frekvencie sú určené tvarom molekulových energetických potenciálových hladín, hmotnosťou atómu a aj prípadným spájaním vibrácií. Jednoduché dvojatómové molekuly majú iba jednu väzbu, ktorá sa môže naťahovať. Zložitejšie molekuly môžu mať viacero väzieb a vibrácie môžu byť spájané. Toto vedie pri absorpcii infračerveného žiarenia ku vzniku frekvencií, ktoré sú charakteristické pre konkrétne skupiny.

Molekula absorbuje jedinečnú sadu frekvencií infračerveného žiarenia. Tieto frekvencie zodpovedajú prirodzeným vibračným módom molekuly. Molekula zároveň absorbuje iba tie frekvencie infračerveného žiarenia, ktoré zodpovedajú vibráciám, ktoré spôsobujú zmeny v dipólovom momente.

Žiadne individuálne väzby so symetrickou štruktúrou a identickými skupinami na koncoch väzby nebudú absorbovať infračervené žiarenie. Napríklad pri etáne väzba medzi uhlíkovými atómami C-C neabsorbuje, pretože na oboch koncoch je metylová skupina, ale C-H väzby v rámci jednotlivých metylových skupín absorbujú infračervené žiarenie<sup>1</sup>.

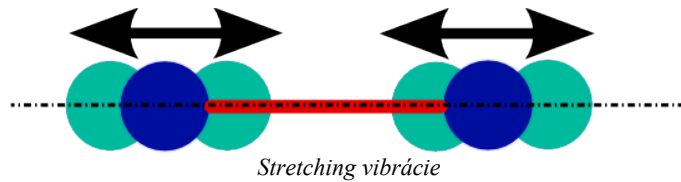
V zložitých molekulách je možných mnoho základných vibrácií, ale nie všetky sú pozorované. Niektoré pohyby nemenia dipólový moment, iné sa spájajú do jedného pásu.

#### **2.1.2.2. Rozdelenie molekulových vibrácií**

Všetky pohyby môžu byť zoradené do dvoch skupín molekulárnych vibrácií *stretching* a *bending*, pričom každý z týchto dvoch hlavných typov vibrácií môže mať variácie.

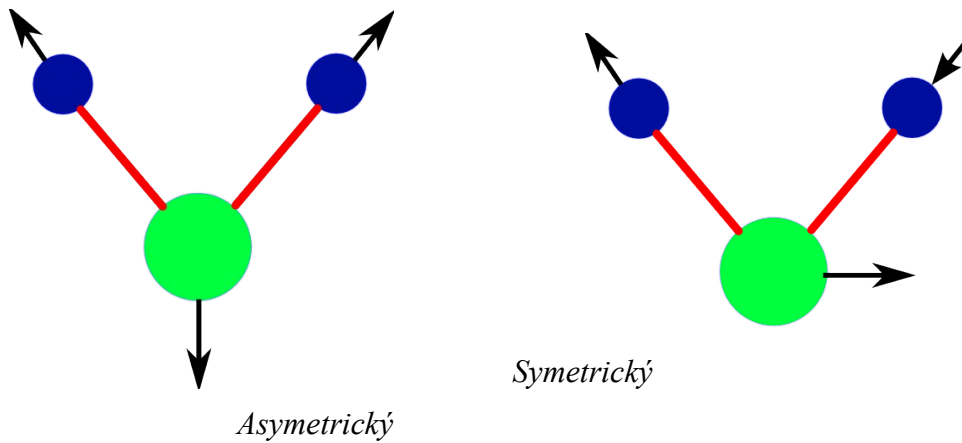
---

<sup>1</sup> <http://www.800mainstreet.com/irsp/eir.html>

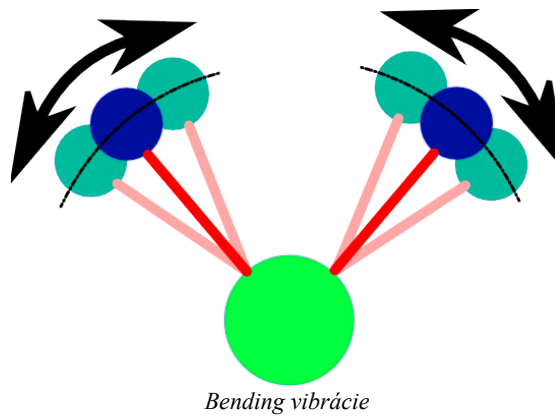


**Obrázok 2**

*Stretching* - produkuje zmeny dĺžky väzby. Je to rytmický pohyb pozdĺž osi väzby, keď vzdialenosť medzi atómami striedavo narastá a klesá. Môže byť symetrický, alebo asymetrický.

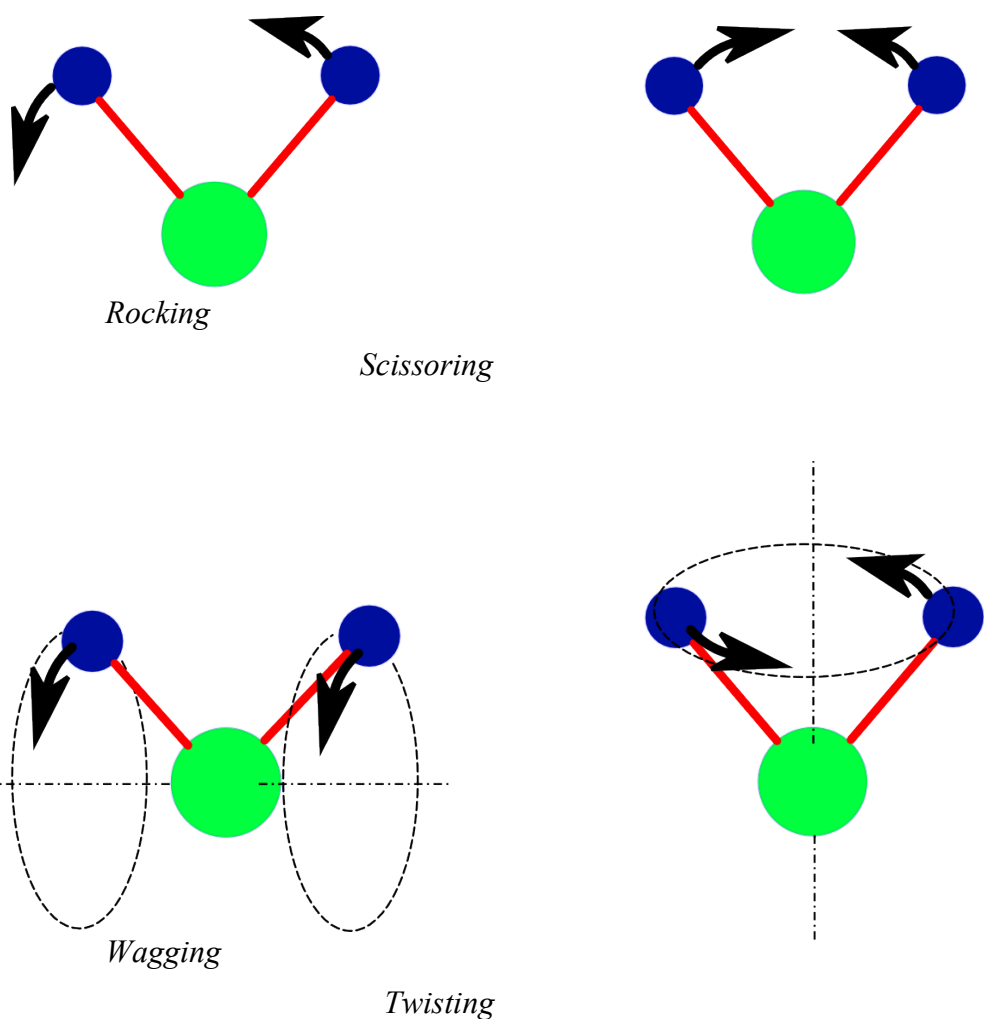


**Obrázok 3**



**Obrázok 4**

*Bending* – je spôsobený zmenou uhla väzby. To sa môže diať v rovine molekuly alebo mimo roviny. Tieto variácie rozdeľujeme na štyri druhy.



Obrázok 5

### 2.1.2.3. Spájanie vibrácií

Ku vibráciám zmieneným vyššie pristupujú aj interakcie medzi vibráciami ak sú vibrujúce väzby napojené na jeden centrálny atóm. Spájanie vibrácií je ovplyvnené veľkým počtom faktorov.

-Silné spájanie *stretching* vibrácií nastáva, ak je spoločný atóm medzi dvoma vibrujúcimi väzbami.

-Spájanie *bending* vibrácií nastáva, ak existuje spoločná väzba medzi vibrujúcimi skupinami.

-Spájanie medzi *stretching* a *bending* vibráciami nastáva, ak *stretching* väzby tvoria jednu stranu uhla meneného *bending* vibráciami.

Spájanie je najvýraznejšie, ak spájané skupiny majú približne rovnaké energie. Žiadne spájanie sa nepozoruje u skupín, ktoré sú oddelené dvoma alebo viacerými väzbami

### 2.1.3. Teória absorpcie infračerveného žiarenia

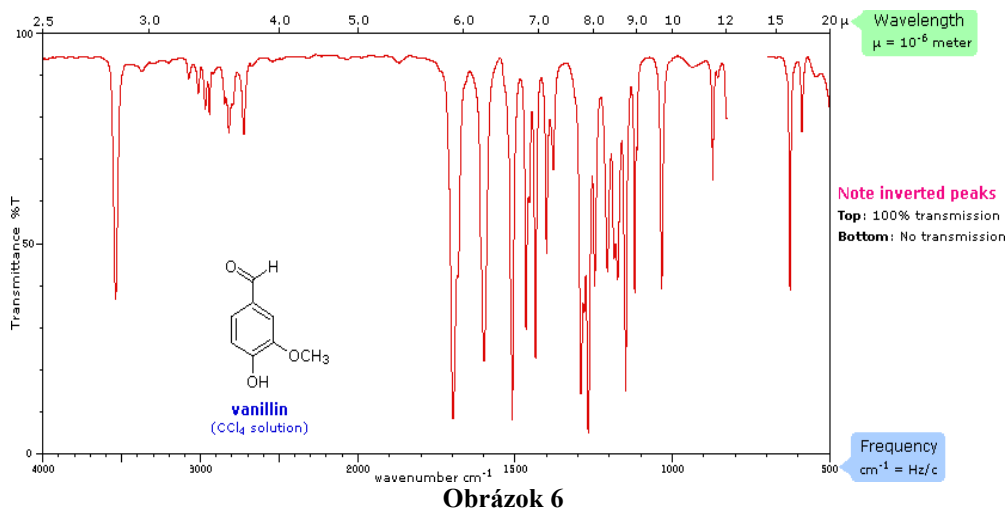
Každá molekulová vibrácia sa deje s frekvenciou charakteristickou pre molekulu a konkrétnu vibráciu. Podľa kvantovej mechaniky sú molekule povolené iba niektoré vibračné energie. S každým vibračným pohybom molekuly je spojená séria energetických hladín. Molekula môže prejsť z jednej energetickej hladiny na druhú iba ak absorbuje kvantum elektromagnetického žiarenia:  $E_{\text{final}} - E_{\text{initial}} = h\nu$ . Frekvencia svetla potrebná na vyvolanie prechodu na novú vibračnú hladinu je totožná s frekvenciou vibrácie, preto sa vibračné frekvencie zisťujú meraním frekvencií molekulou absorbovaného žiarenia. Energia vibrácie je meraná amplitúdou vibrácie, tak vibračná energia narastá s nárastom amplitúdy. Infračervená spektroskopia, pracuje s prechodmi medzi vibračnými hladinami v molekule.

Infračervené žiarenie nemá dostatok energie na indukciu elektrónového prechodu podobne ako ultrafialové žiarenie pri UV spektroskopii<sup>2</sup>. Energia fotónov spojená s touto časťou spektra, v rozmedzí od 1 do 15 kcal/mol, nie je síce dostatočujúca na excitáciu elektrónov, ale môže viesť ku vibračným excitáciám kovalentne viazaných atómov alebo skupín atómov.

Absorpcia infračerveného žiarenia je obmedzená na zlúčeniny s malými rozdielmi energií v možných vibračných a rotačných stavoch. Organické zlúčeniny budú absorbovať infračervené žiarenie, takej energie, ktorá zodpovedá energii týchto vibrácií. Infračervené spektrometre potom umožňujú získať absorpčné spektrá týchto zlúčenín, ktoré sú jednoznačným odrazom molekulovej štruktúry.

---

<sup>2</sup> [3] Infračervená spektra a štruktúra molekúl



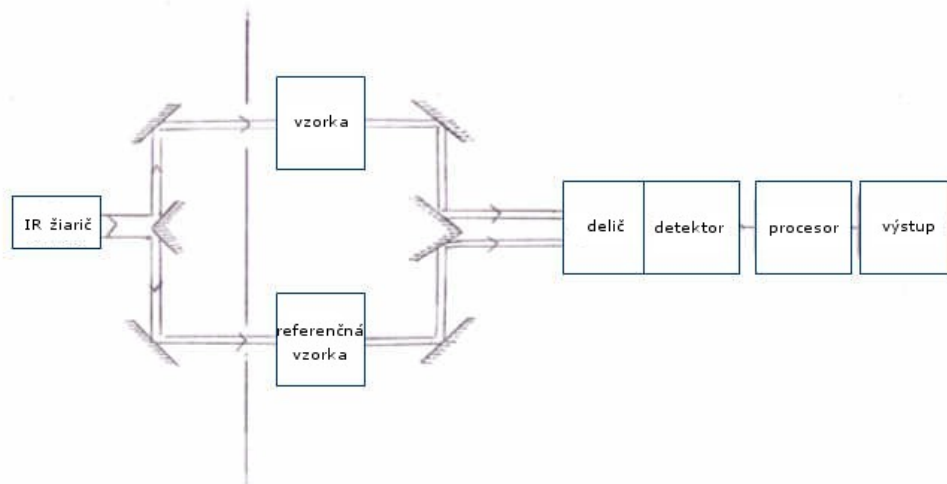
Na *Obrázku 6* je príklad spektra ochucovadla vanilínu. Komplexnosť tohto spektra je typická pre väčšinu infračervených spektier.

Absorpcia infračerveného žiarenia pre molekulu znamená, že vibrácie alebo rotácie v rámci molekuly musia spôsobiť zmenu dipólového momentu molekuly. Striedavé elektrické pole žiarenia interaguje s fluktuáciami dipólového momentu molekuly. Ak frekvencia radiácie zodpovedá frekvencii vibrácií molekuly, potom je žiarenie pohltené a spôsobí zmenu v amplitúde vibrácií molekuly.

Rotačné prechody sa používajú málo, pričom rotačné hladiny sú kvantované. Absorpcia infračerveného žiarenia pri rotačných prechodoch sa používa najmä pri plynách, kde vytvára čiarové spektrá. Pri kvapalinách a pevných látkach sa však tieto čiary rozširujú do kontinuálneho spektra kvôli zrážkam molekúl a iným interakciám.

## 2.2. Spôsob merania infračerveného spektra

### 2.2.1. Funkcionalita spektrometra



Obrázok 7

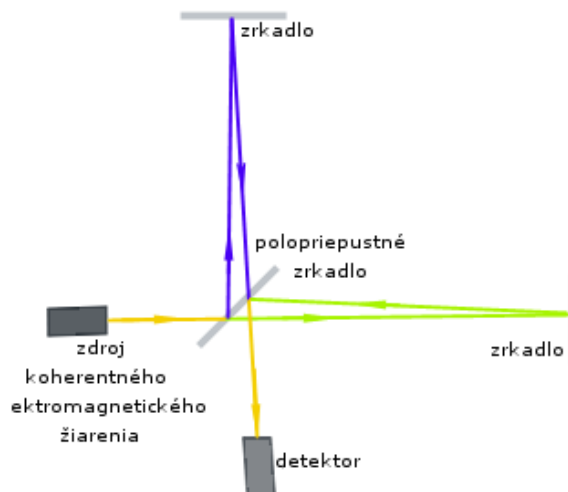
Lúč infračerveného žiarenia je vytvorený a rozdelený na dva oddelené lúče. Jeden prechádza cez vzorku a druhý cez referenčnú vzorku, čo býva najčastejšie rozpúšťadlo použité vo vzorke. Oba lúče sú spätne odrazené do detektora. Predtým ale prejdú rozdeľovačom, ktorý rýchlo mení lúče pri vstupe do detektora, aby bol zosnímaný buď len signál zo vzorky alebo len z referenčnej vzorky. Oba signály sú porovnané a na výstup je poslaná hodnota rozdielu vzorky a referenčnej vzorky.

Referenčná vzorka je používaná z dvoch dôvodov:

- 1.) Zabránenie fluktuáciám v spektre.
- 2.) Zrušenie vplyvu rozpúšťadla.

Pri meraní vzorky cez ňu prechádza lúč infračerveného žiarenia a pre každú vlnovú dĺžku je zaznamenané množstvo absorbovanej energie. Pri meraní sa môže používať monochromatický lúč, ktorého vlnová dĺžka sa postupne mení a zaznamená pri každej frekvencii.





**Obrázok 1**

[http://en.wikipedia.org/wiki/Fourier\\_transform\\_spectroscopy](http://en.wikipedia.org/wiki/Fourier_transform_spectroscopy)

Alebo sa môže použiť Furierovský typ spektrometra, kde je možné odmerať celé spektrum všetkých vlnových dĺžok naraz.

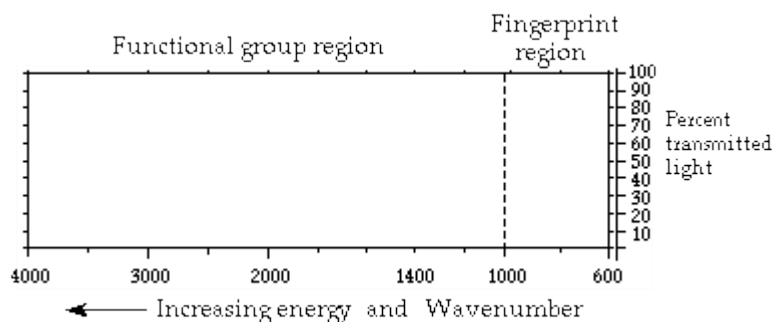
### 2.2.2. Príprava vzoriek

Infračervené spektrá môžu byť získavané zo vzoriek vo všetkých fázach (pevná, kvapalná aj plynná fáza). Plynné vzorky vyžadujú málu prípravu vrátane čistenia. Kvapalné vzorky sa zvyčajne vkladajú medzi dve platničky NaCl, lebo sklo absorbuje IR. Tieto prepúšťajú infračervené žiarenie a nepridávajú do spektra žiadne píky.

Pevné vzorky sa pripravujú viacerými spôsobmi. Prvým spôsobom je rozdrvenie vzorky na jemný prášok a jej rozpustenie. Pri použití rozpúšťadiel je potrebné dbať na oblasť absorpcie rozpúšťadla a vyhnúť sa oblastiam v spektrách, kde očakávame signál od vzorky. Bežne používané rozpúšťadlá sú chloroform, tetrachlórétán. Druhý spôsob je zmiešanie vzorky s čistým KBr. Táto zmes je stlačená pod vysokým tlakom na tabletku, cez ktorú môže prejsť lúč spektrometra. Ďalšou možnosťou pre pevné látky je ich zmiešanie s neprchavou kvapalinou a zmixovanie do pasty, ktorá sa natiera na NaCl platničku.

## 2.3. Identifikácia infračerveného spektra

Aj keď je infračervené spektrum charakteristické pre celú molekulu, existujú isté skupiny atómov v molekule, ktoré zväčšujú absorpciu pri rovnakom vlnočte, bez ohľadu na štruktúru zvyšku molekuly. Tieto charakteristické pásy umožňujú identifikáciu hlavných štruktúrnych skupín.



Obrázok 9

<http://www.800mainstreet.com/irsp/eir.html>

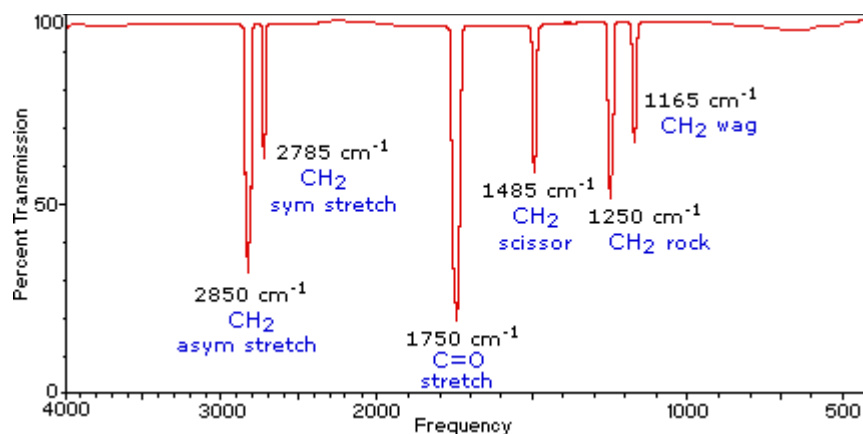
Infračervené spektrum molekuly je znázornené graficky. Ukazuje frekvencie infračerveného žiarenia, ktoré sa absorbujú a % žiarenia, ktoré prejde vzorkou bez toho, aby bolo absorbované. Spektrum má dva regióny. Oblasť „fingerprint“ je jedinečná pre molekulu a pre oblasti funkčných skupín je rovnaká pre molekuly s rovnakými funkčnými skupinami.

Zvyčajne nelineárna horizontálna os má jednotky vlnočtu. Každá hodnota vlnočtu zodpovedá vlastnej frekvencii infračerveného žiarenia. Vertikálna os zobrazuje % preneseného alebo absorbovaného žiarenia. Pre každú frekvenciu platí, že % preneseného žiarenia je 100% pre žiarenie, ktoré prejde molekulou bez interakcie. Nízku percentuálnu hodnotu naopak vykazujú žiarenie, ktoré interaguje a excituje vibrácie v molekule. Časť spektra, kde % preneseného žiarenia klesne na nízku hodnotu a potom narastie na hodnotu blízku 100% je nazývaná „pás“. Pás je spojený s konkrétnou vibráciou v rámci molekuly. Šírka pásu je popísaná ako rozsah frekvencií, ktorý pás pokrýva. Výkonnosť pre rôzne vibrácie určuje ako intenzívne alebo silné absorpcie v páse sú. Pás býva popísaný ako silný, stredný

alebo slabý. Pásky, ktoré sa objavujú v spektre, sú závislé na type väzieb a štruktúrach molekúl.

Pre organické molekuly môže byť infračervené spektrum rozdelené do troch oblastí. Absorpcie medzi  $4000$  až  $1300\text{ cm}^{-1}$  sú primárne spôsobené špecifickými funkčnými skupinami a typmi väzieb. Oblasť medzi  $1300$  a  $909\text{ cm}^{-1}$ , región „fingerprint“, je spôsobený najmä komplexnejšími vibráciami a oblasť medzi  $909$  a  $650\text{ cm}^{-1}$  je spojená s prítomnosťou benzénových kruhov.

Molekula pozostávajúca z  $n$  atómov má  $3n$  stupňov voľnosti. Šesť z týchto stupňov voľnosti predstavuje rotácia a posuny v molekule. Tak zostáva  $3n-6$  stupňov voľnosti pre vibrácie,  $3n-5$  ak ide o lineárnu molekulu.



Obrázok 10

<http://www.cem.msu.edu/~reusch/VirtualText/Spectrpy/InfraRed/infrared.htm>

Štvoratómová molekula formaldehydu  $\text{H}_2\text{C}=\text{O}$  (spektrum na obrázku vyššie), je príkladom vibračných módov popísaných skôr. V spektre môžeme očakávať 6 základných vibrácií ( $n=4$ ,  $3n-6$ ). Tieto sú priradené absorpciám v spektre.

Napríklad atómy v  $\text{CH}_2$  skupine, ktoré sa bežne nachádzajú v organických molekulách, môžu vibrovať šiestimi rôznymi spôsobmi: *symetrické* a *asymetrické (stretching)*, a *scissoring*, *rocking*, *wagging*, a *twisting (bending)* pre ktoré platia niektoré všeobecné trendy: *-Stretching* frekvencie sú vyššie ako odpovedajúce *bending* frekvencie. Je jednoduchšie ohýbať väzbu ako ju stláčať.

-Väzby na vodík majú vyššie *stretching* frekvencie ako väzby na ťažšie atómy.

-Trojité väzby majú vyššie *stretching* frekvencie ako odpovedajúce dvojité väzby, ktoré majú vyššie frekvencie ako jednoduché väzby.

V praxi, infračervené spektrum nezobrazuje bežne osobitne absorpčné signály pre jednotlivé vibračné módy molekuly. Počet pozorovaných absorpcií môže narásť dodatočnými interakciami vedúcimi ku skladaniu základných vibrácií. Ďalej, počet pozorovaných absorpcií môže klesnúť kvôli symetrii molekuly, obmedzeniam spektrometra alebo požiadavkám merania.

Infračervené spektrá môžu byť použité na identifikáciu neznámych organických molekúl. Zaznamenané spektrum neznámej molekuly sa porovná s databázou spektier známych zložiek. Pri analýze neznámeho spektra, je bežné postupovať v nasledovných krokoch s použitím tabuľky identifikujúcej rôzne pásy:

- 1.) Pokúsiť sa vyhľadať karbonylový C::O pás. Silný pás sa nachádza medzi  $1820-1660\text{cm}^{-1}$ . Tento pás je zvyčajne najsilnejší absorpčný pás spektra. Má strednú šírku. Ak spektrum obsahuje karbonylovú skupinu, hľadajú sa v kroku 2.) pásy, ktoré prislúchajú funkčným skupinám, ktoré obsahujú karbonylovú skupinu. Ak nie je prítomný C::O pás, ide sa na krok 3.) a hľadajú sa alkoholy.
- 2.) Ak je prítomný C::O, je potrebné určiť, či je súčasťou kyseliny, esteru, aldehydu alebo ketónu.

KYSELINA - Prítomnosť O-H skupiny je určená absorpčným pásom na  $3300-2500\text{cm}^{-1}$ . Tento pás presahuje *stretching* C-H väzby. Tiež je prítomný pás zodpovedajúci jednoduchej väzbe C-O na  $1100-1300\text{cm}^{-1}$  a karbonylový pás na  $1725-1700\text{cm}^{-1}$ .

ESTER - Pri esteroch je C-O absorpcia strednej intenzity blízko  $1300-1000\text{cm}^{-1}$  a nie je prítomný žiaden O-H pás.

ALDEHYD - Pri aldehydoch je potrebné hľadať C-H absorpčné pásy. Ide o dve slabé absorpcie blízko  $2850\text{cm}^{-1}$  and  $2750\text{cm}^{-1}$ .

Tieto absorpcie sú spôsobené C-H väzbou, ktorá je súčasťou CHO funkčnej skupiny aldehydu. Okolo  $1740-1720\text{cm}^{-1}$  sa nachádza karbonylová absorpcia.

KETÓN - Pri ketónoch chýba slabá CH absorpcia. Navyše ale je karbonylový CO pás okolo  $1725-1705\text{cm}^{-1}$ .

3.) Ak nie sú prítomné žiadne karbonylové pásy, hľadajú sa alkoholové O-H pásy.

ALKOHOL - Pri alkoholoch je široký OH pás blízko  $3600-3300\text{cm}^{-1}$  a pás absorpcie C-O blízko  $1300-1000\text{cm}^{-1}$ .

4.) Ak v spektre nie sú prítomné karbonylové pásy ani O-H pásy, je potrebné hľadať dvojité väzby,  $\text{C}::\text{C}$ , u aromatických uhľovodíkov alebo u alkénov.

ALKÉNY - Slabý absorpčný pás blízko  $1650\text{cm}^{-1}$  je spôsobený dvojitou väzbou. Pás odpovedajúci CH stretching je blízko  $3000\text{cm}^{-1}$ .

AROMATICKE UHĽOVODÍKY - Stredné až silné absorpcie  $\text{C}::\text{C}$ , dvojitej väzby sa objavujú v oblastiach  $1650-1450\text{cm}^{-1}$ . Pás CH stretching je viditeľne slabší ako u alkénov.

5.) Ak nie je prítomná ani jedna z predchádzajúcich skupín, možno môže ísť o alkány.

ALKÁNY – Hlavná absorpcia je C-H *stretching* blízko  $3000\text{cm}^{-1}$ . ide o jednoduché spektrum s ďalším pásom blízko  $1450\text{cm}^{-1}$ .

### 3. Cieľ práce

Cieľom tejto práce bolo zhodnotiť možnosti analýzy infračerveného spektra organických zlúčenín prostredníctvom neurónových sietí.

Oblasť infračervenej spektroskopie patrí k špecializovaným odborom v oblasti fyziky a analytickej chémie. Oblasť neurónových sietí zase k špecializovanému odboru v oblasti informatiky.

V praxi sa veľmi často stáva, že programátori, ktorí nemajú dostatočné vedomosti z inej oblasti ako z informatiky, nevedia presne vniknúť do problematiky iného odboru, v ktorom by automatizácia prostredníctvom výpočtovej techniky priniesla veľké zlepšenia. Naopak odborníci z týchto špecifických odborov nevedia presne zadefinovať problematiku, ktorú chcú analyzovať prostredníctvom výpočtovej techniky. Nechápu presne otázky programátorov, ktorí sa na problematiku pozerajú úplne z inakšieho uhla.

Takto vzniká medzera v komunikácii, ktorú je veľmi zložitá preklenúť a vyriešiť tak aby vznikol požadovaný softvérový produkt.

Táto diplomová práca sa zároveň snaží byť akýmsi spájajúcim článkom, ktorý by mal byť zrozumiteľný ako programátorovi tak aj odborníkovi na infračervenú spektroskopiu. Je možné, že niektoré poznatky uvedené v tejto práci sa môžu zdať triviálne a samozrejme pre niektorých členov spomínaných komunit, no predpokladám, že málokto rozumie dokonale obom problematikám, infračervenej spektroskopii a neurónovým sieťam zároveň. Práca sa snaží ukázať potenciál, ktorý je v prepojení týchto technológií.

### **3.1. Úlohy práce**

- 1.) Zozbierať informácie o princípoch, na základe ktorých funguje infračervená spektroskopia.
- 2.) Zhrnúť základné princípy fungovania neurónových sietí, a navrhnúť možný smer ich implementácie pri analýze infračerveného spektra.
- 3.) Navrhnúť softvérový model na základe ktorého by bola táto implementácia uskutočnená.

## 4. Materiál a metódy

### 4.1. Prirodzené neurónové siete

*"Myslím, teda som" (R.Descartes)*

#### 4.1.1. Prirodzený model

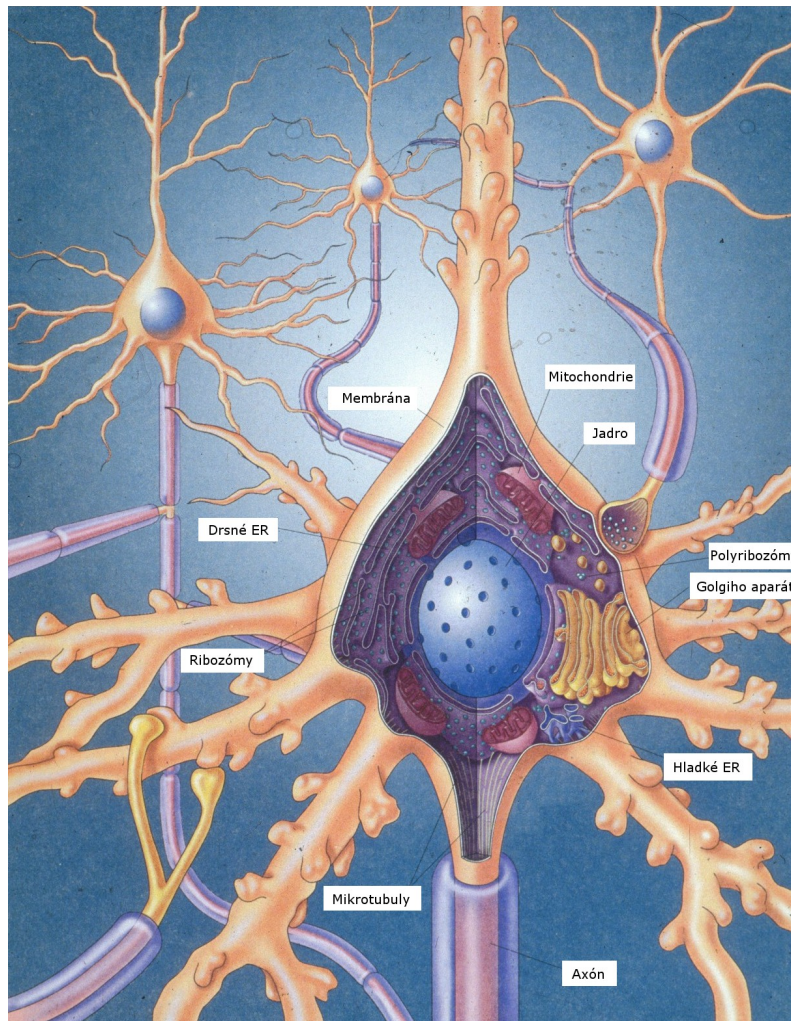
Ľudský mozog je odpradáva považovaný za jedinečné dielo prírody. Schopnosť myslieť bola skúmaná odvtedy, odkedy bol človek o tejto schopnosti schopný rozmýšľať. Fenomén myslenia je možné skúmať z viacerých uhlov pohľadu.

Jednou zo základných foriem skúmania je rozloženie reálneho skúmaného objektu na menšie časti, ktoré je jednoduchšie pochopiť a skúmať. Až potom sa snažíť pochopiť ako tieto časti navzájom spolupracujú a tým pochopiť celý skúmaný objekt. Takouto metódou sa dospelo aj k základnému stavebnému prvku neurónových sietí a to neurónu.

Neurón je základným stavebným prvkom nervového tkaniva, ktoré slúži jednak na prenos signálov a zároveň aj na ich spracovanie. Obe vlastnosti priamo vyplývajú zo štruktúry neurónov. Nervové bunky mozgu sa nelíšia od nervových buniek ktoré prenášajú signály v nejakej končatine.

Rozdiel v tom, že končatina sama nedokáže „myslieť“ je len hustote neurónov, ktoré tvoria sieť. Dokáže však reflexne reagovať na určité jednoduché podnety. Iné zložitejšie reflexné reakcie sú vygenerované až v mieche, kde je už vyššia hustota neurónov. Komplexné vyhodnotenie signálu prebieha až v mozgu, kde je hustota najvyššia.





**Obrázok 21**

(<http://www.mb.jhu.edu/tins/media/2004%20Neuron%20Schema1.jpg>)

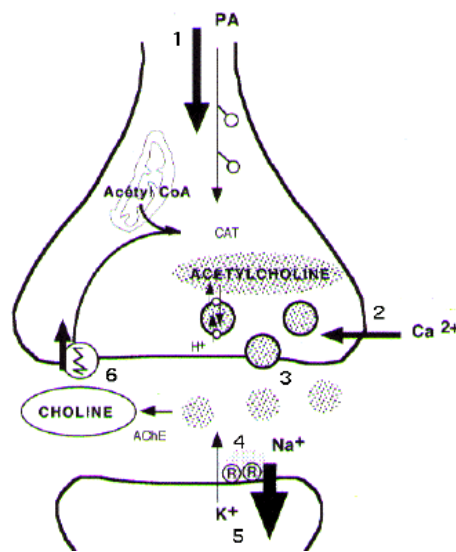
#### **4.1.1.1 Nervová bunka - Neurón**

Neurón je z biologického hľadiska bunka, ktorá tvorí nervové tkanivo. Podobne ako ostatné bunky má jadro, membránu tvorenú fosfolipidovou dvojvrstvou a organely. Od ostatných buniek sa odlišuje najmä výbežkami, ktorými sa napája na ostatné nervové bunky alebo iné tkanivá (svaly, rôzne receptory). Tieto výbežky sa rozdeľujú na dva druhy.

- 1.) *Dendrity* - vstupné kanály, ktorými neurón "prijíma" signál. Dendritov môže byť viacej. Ich počet závisí od pozície neurónu v nervovej sústave a môže sa pohybovať od desiatok až do niekoľkých tisícov.

2.) *Axón* - výstupný kanál. Každý neurón má len jeden axón, ktorý vysiela signál v prípade, že neurón bol aktivovaný. Axón môže byť v porovnaní s priemerom samotnej bunky veľmi dlhý. Preto je tento výbežok chránený ďalšími bunkami, ktoré ho obaľujú myelínovou pošvou. Medzi týmito bunkami sa nachádzajú neobalené úseky, ktoré nazývame "Ranvierove zárezy", ktoré zabezpečujú skokovité šírenie signálu pozdĺž membrány axónu.

Nervová bunka je stále podrobovaná výskumu a napriek tomu, že už o nej vieme množstvo informácií, stále nie sme schopní presne definovať všetky deje, ktoré sa v nej odohrávajú pri prenose a vyhodnocovaní signálu.



Obrázok 13

<http://neurobranches.chez-alice.fr/neurophy/lasynapse.html>

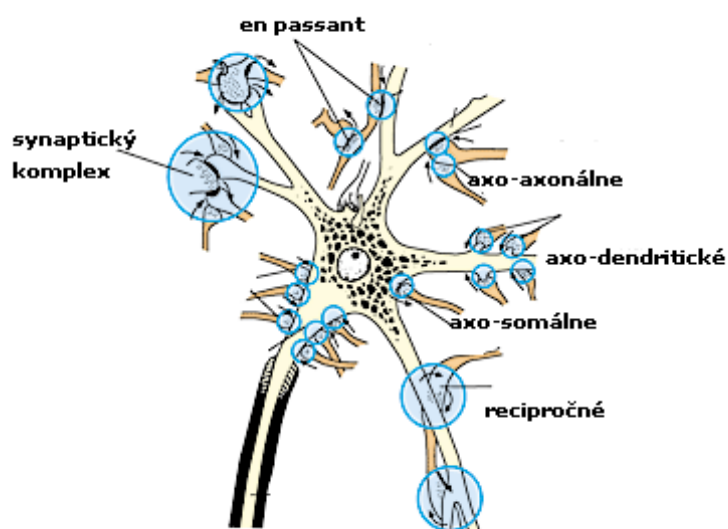
Základný princíp prenosu funguje na báze zmeny elektrických potenciálov, ktorá je spôsobená prechodom iónov najmä draslíka a sodíka cez iónové kanály v membráne neurónu a jeho výbežkov. Tieto kanály sú väčšinou špecifické pre určitý typ iónu, čo umožňuje

nervovým bunkám vytvárať zmenu potenciálu ako reakciu na konkrétny podnet.

Každý neurón pôsobí ako rozhodovací prvok v rámci neurónovej siete. Ak potenciál nahromadený na vstupných kanáloch dosiahne hodnoty aktivačného prahu konkrétneho neurónu je tento posielaný ďalej prostredníctvom axónu.

#### 4.1.1.2 Neurónová sieť

Neurón samotný nie je nijak výnimočný ako samostatná bunka. Zaujímavá je až neurónová sieť, ktorá pozostáva z viacerých poprepájaných neurónov. Prepojenie medzi neurónmi je tvorené synapsiami.



Obrázok 14

<http://145.253.118.170/roche5/pics/p07366.001-2.html>

Existuje viacero typov synaptických prepojení, pričom každý má určité špecifické vlastnosti. Najčastejší a najštandardnejší spôsob prepojenia neurónov je *axo-dendritický* typ synapsie, kedy axón (ako výstupný kanál) je napojený na dendrit (vstupný kanál). Napriek tomu že axón je len jeden, môže byť rozvetvený a napojený na veľké množstvo dendritov. Veľmi častý je ešte aj *axo-somálny* typ synapsie, kedy je axón napojený priamo na bunkovú stenu, alebo *axo-axonálny*

kde môže byť viacero axónov napojených na iný axón v mieste napojenia na ďalší neurón.

Signál prenášaný neurónovou sieťou sa nešíri automaticky všetkými smermi. Každý neurón sa štandardne nachádza v nejakom rovnovážnom stave. Informácia sa šíri vtedy, keď sa neurón dostane do „excitovaného“ stavu, čo znamená, že sa v ňom krátkodobo zvýši elektrický potenciál, ktorý je zosilnený a šírený ďalej pozdĺž axónu.

Tento signál zachytia všetky ostatné neuróny, ktoré sú synapsiami pripojené na axón excitovaného neurónu. Podstatné je, že na excitáciu neurónu zvyčajne nestačí len jedna synapsia, ktorá prijme signál (potenciál) iného neurónu, ale je potrebné prijať signál z viacerých synapsíí.

Každá synapsia má určitú váhu, ktorá násobí prijímaný signál. Táto váha môže mať excitačný alebo inhibičný účinok vzhľadom na excitáciu neurónu. Excitačný účinok zvyšuje a inhibičný účinok znižuje zozbieraný potenciál. Každý neurón potom spracováva vstupné signály, ktoré keď dosiahnu po sčítaní určitú intenzitu, neurón sa excituje a posielá signál ďalej.

Vstupný signál z jednotlivých synapsíí nemusí prísť v jednom okamihu, preto neurón dokáže sčítovať signály za určité časové rozmedzie.

Ďalšou vlastnosťou synapsíí na jednom neuróne je aj schopnosť vyhodnocovať signály vzhľadom na ich umiestnenie na tele neurónu. Synapsie umiestnené bližšie u seba znásobia silu vstupného signálu viacej ako vzdialenejšie.

Všetky tieto vlastnosti dávajú mnoho dimenzií vyhodnocovacím schopnostiam neurónu.

#### ***4.1.1.3 Adaptácia siete***

Veľmi dôležitou vlastnosťou prirodzených neurónových sietí je schopnosť učiť sa. Stále ešte nie je vedecky preukázané ako učenie sa

neurónovej siete prebieha. Všeobecne je však akceptovaná Hebbova<sup>3</sup> hypotéza, ktorá tvrdí, že učenie sa prebieha zmenami váh jednotlivých synapsí, ktoré sa zvyšujú alebo znižujú v závislosti od toho, či neurón vyhodnotil vstupný signál správne.

Aj keď sa zatiaľ neprišlo na to, ako presne tento mechanizmus funguje, menenie sa váh synapsí bolo preukázané. Keďže žiadny z doterajších pokusov túto hypotézu nevyvrátil, je táto hypotéza považovaná za správnu.

#### **4.1.1.4 Mozog a myslenie**

Každý neurón v sieti má svoj podiel na tom, čo sa stane s ľubovoľným signálom, ktorý prechádza neurónovou sieťou. „Rozhodovací“ potenciál siete sa potom môže zvyšovať s počtom neurónov v jednotlivých elementoch.

Jednoduché komplexy neurónových sietí slúžia zvyčajne len na prenos signálu z receptorov do väčších nervových centier, alebo naopak z centier do svalových tkanív, kde zmena potenciálu spôsobená príchodom signálu pôsobí ako inicializátor kontrakcie. Tieto „prenosové“ siete slúžia na predspracovanie signálov z jednotlivých lokálnych oblastí. Tým že sa signál šíri paralelne po viacerých neurónoch v rámci neurónovej siete zároveň pôsobia redundantne, teda v prípade výpadku jedného prenosového kanálu, nedochádza zvyčajne k zlyhaniu celého systému, respektíve ostatné prenosové kanály sa dokážu adaptovať tak, že strata jedného kanálu nijako neovplyvní funkčnosť siete ako celku.

Väčšie nervové centrá slúžia zvyčajne už na vyhodnotenie signálu. Ako napríklad niektoré reflexy sú už zakódované v mieche, kedy v prípade popálenia prstu miecha rozhodne o stiahnutí ruky od plameňa, ale pošle ďalej signál mozgu, ktorý rozhodne o tom že celé telo by sa malo od plameňa vzdialiť.

---

<sup>3</sup> [1] Mirko Novák a Kolektív (1998) Umělé neuronové sítě teorie a aplikace

Môžeme povedať, že samotný mozog pozostáva z viacerých komplexov neurónových sietí, ktoré navzájom spolupracujú. Pričom jeden komplex po vyhodnotení nejakej informácie, slúži ako vstup pre ďalší komplex, ktorý ho vyhodnotí v úplne inom kontexte ako ten predošlý. Ľudský mozog obsahuje približne  $10^{11}$  neurónov. Ak uvážime aký rozhodovací potenciál má len samotný neurón, je celkový potenciál ľudského mozgu skutočne veľký.

## **4.2. Umelé neurónové siete**

Za účelom potvrdenia hypotéz o fungovaní neurónových sietí boli vytvorené rôzne matematické modely ich fungovania. Pri realizácii týchto modelov pomocou výpočtovej techniky sa nielenže potvrdila ich funkčnosť, ale stal sa z nich nový odbor v oblasti informatiky.

### **4.2.1 Umelý neurón**

Základom umelých neurónových sietí (Artificial Neural Networks) sa stal virtuálny model neurónu. Princíp fungovania umelého neurónu sa snaží priblížiť čo najvernejšie k fungovaniu prirodzeného neurónu, respektíve k poznatkom, ktoré sú dostupné o neurónoch.

Je zaujímavé, že umelé neurónové siete dosahujú veľmi zaujímavých výsledkov aj pri použití veľmi triviálnych modelov neurónu.

#### **4.2.1.1. Hardware vs. software**

Pri začiatkoch modelovania neurónových sietí pomocou výpočtovej techniky, nemala táto dostatočnú kapacitu na simuláciu zložitejších modelov prostredníctvom softvérového riešenia. Preto existovali snahy vytvoriť elektronický model neurónu, ktorý by fungoval podobne ako binárne hradlo v polovodičoch. Doteraz sa nepodarilo vytvoriť elektronickú súčiastku, ktorá by dokázala analógovo sčítavať potenciál na vstupných synapsiách, respektíve

vedieť porovnať tento nasčítaný potenciál s nejakým nastaveným excitačným potenciálom.

Ak by sa niekedy takúto súčiastku podarilo vymyslieť, mohol by nastať prevrat v oblasti klasických počítačov založených na princípe turingovho stroja. Okrem sčítania potenciálov je dôležitou vlastnosťou neurónu schopnosť meniť váhy synapsí pri učení sa. To si vyžaduje od umelého neurónu obsahovať určitý pamäťový element, ktorý by si držal informáciu o aktuálnom stave váh jednotlivých synapsí. Vzhľadom na možný vysoký počet synapsí sa môže stať táto úloha u jednoduchej elektronickej súčiastky ešte náročnejšou ako analógové sčítanie potenciálov.

Ak zjídeme do extrému, kde by mal byť umelý elektronický neurón schopný zobrať do úvahy aj časové a priestorové rozmiestnenie vstupných signálov, zdá sa byť vytvorenie elektronického umelého neurónu utópiou.

Vzhľadom na exponenciálny rast výkonu dnešných počítačov, kde je možné simulovať veľké siete virtuálnych neurónov spĺňajúcich všetky vyššie uvedené vlastnosti, upadá výskum vytvorenia umelého neurónu a namiesto toho sa programujú stále dokonalejšie softvérové neuróny.

Veľmi aktuálne začína byť aj paralelné spracovanie na viacerých procesoroch. Problematika vyhodnocovania neurónových sietí je priam ideálne navrhnutá pre paralelné procesy spracovania. Ak by sme dokonca mohli zájsť bežne tak ďaleko, že každý procesor by predstavoval jeden neurón a prepojenie bolo uskutočnené napríklad internetovým protokolom *TCP-IP*, dá sa takmer hovoriť o umelej neurónovej sieti s vlastnosťami porovnateľnými s prirodzenou predlohou. Nevýhodou takýchto sietí je však zatiaľ priestorová a najmä finančná náročnosť. Zatiaľ čo virtuálnu neurónovú sieť s objemom niekoľko tisíc neurónov vie spracovať bežné PC v každom laboratóriu, vytvoriť superpočítač obsahujúci niekoľko tisíc zosieťovaných počítačov si vyžaduje nemalé finančné prostriedky.

Napriek tomu takéto superpočítačové clustre už existujú<sup>4</sup> a často pracujú na programoch založených práve na neurónových sieťach.

#### 4.2.1.2. Virtuálny model neurónu

Virtuálny neurón je schopný simulovať takmer akúkoľvek vlastnosť. Pri vytváraní virtuálnej neurónovej siete sa stáva ohraničujúcou vlastnosťou len kapacita počítača, ktorá ovplyvňuje počet neurónov v sieti, respektíve časovú náročnosť vyhodnotenia veľkej siete. Čím jednoduchší model neurónu, tým kratší čas je potrebný na výpočet.

Implementácia prebieha väčšinou tak, že sa vytvorí trieda objektu typu neurón. Takejto triede sme schopní nadefinovať rôzne vlastnosti a metódy vyhodnocovania v závislosti od modelu. Táto trieda je potom použitá pre vytvorenie virtuálnych neurónov v pamäti počítača.

Definícia takejto triedy môže byť veľmi jednoduchá, čo si môžeme demonštrovať na konkrétnom príklade.

Jednoduchá trieda typu „Neuron“ bude obsahovať vlastnosť „aktivačná energia“, kde je uložené číslo definujúce veľkosť energie potrebnej na aktiváciu neurónu. Okrem toho bude neurón obsahovať jednorozmerné pole synapsií. V tomto poli budú uložené ukazatele identifikujúce iné neuróny, na ktoré je tento neurón napojený, a zároveň váha zodpovedajúca danému napojeniu.

$$f\left[\left(\sum_{i=1}^s w_i\right) - p\right]$$

$f$  - funkcia aktivácie neurónu

$s$  - veľkosť pola synapsií neurónu

$w_i$  - váha  $i$ -tej synapsie

$p$  - prah excitácie

**Vzorec 1**

Ďalej bude obsahovať funkciu aktivácie neurónu, ktorá vyhodnotí excitačné a inhibičné signály z neurónov, na ktoré ukazuje pole synapsií. Takto, bude váha každej synapsie prirátaná k sume

---

<sup>4</sup> <http://www.top500.org>



vstupných aktivačných energií. Ak táto suma presiahne hodnotu aktivačnej energie, bude neurón aktivovaný.

```
public class Neuron {
    private class Synapse {
        public Neuron Source;
        //ukazateľ na iný neurón
        public double Weight;
        //váha synapsie
        public Synapse (Neuron p_Neuron, double p_Weight) {...}
        //konštruktor synapsie
        //vyžadujúci existujúci neurón a
        //hodnotu váhy synapsie
    }
    public bool Activated = false;
    //binárny parameter excitácie neurónu
    public double ActivationLevel = 0;
    //excitačný prah
    public ArrayList Synapsys = new ArrayList();
    //pole synapsii obsahujúce objekty podtriedy "Synapse"
    public Neuron (ArrayList p_Neurons, double p_Activation) {...}
    //konštruktor neurónu vyžadujúci pole
    //existujúcich neurónov na ktoré bude napojený a
    //hodnotu excitačného prahu
    public void Evaluate() {
        //vyhodnocovacia funkcia aktivácie neurónu
        double l_ActivationEnergy = 0;
        foreach (Synapse l_Synapse in this Synapsys) {
            l_ActivationEnergy += l_Synapse.Weight * (l_Synapse.Source.Activated?1:0);
        }
        this.Activated = (l_ActivationEnergy > this.ActivationLevel);
    }
    public void Reset() {...}
    //funkcia pre zrušenie aktivácie
}
```

*Časť zdrojového kódu programu Neuroser*

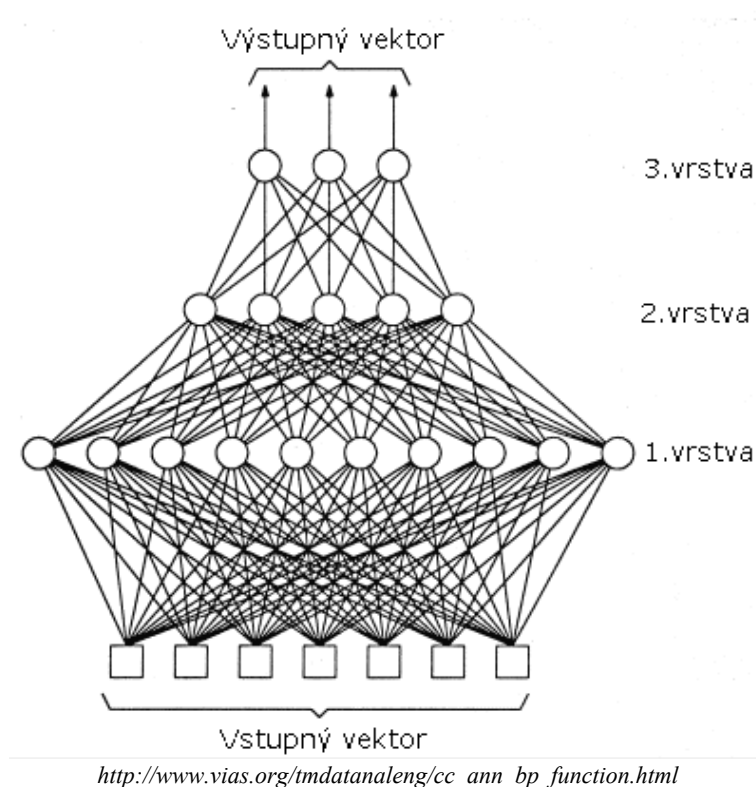
Obrázok 14

## 4.2.2. Umelá neurónová sieť

Umelá neurónová sieť môže byť tvorená napríklad z virtuálnych neurónov spomenutých v predošlej kapitole. Je potom len na programátorovi, akú štruktúru prepojení nadefinuje pri vytvorení neurónovej siete.

### 4.2.2.1. Viacvrstvé neurónové siete

V praxi sa osvedčili najmä takzvané viacvrstvé neurónové siete s dopredným šírením (Feed Forward Multilayer Neural Network).



**Obrázok 15**

K ich základným vlastnostiam patrí, že pozostávajú z viacerých vrstiev neurónov a signál sa v nich šíri dopredným smerom, teda od vstupnej vrstvy cez takzvané skryté vrstvy (*Hidden layers*) smerom k výstupnej vrstve. Každá vrstva pozostáva z neurónov, ktoré nie sú navzájom nijako prepojené. Vstupné synapsie sú napojené vždy na neuróny predchádzajúcej vrstvy.

Tento model nekorešponduje úplne s prirodzenou neurónovou sieťou, kde prepojenia medzi neurónmi sú náhodné a neexistuje tam nič podobné ako vrstva. Model vznikol skôr preto, aby ľudia boli schopný zhodnotiť správanie sa neurónovej siete, pretože sledovať správanie sa siete náhodne pospájaných neurónov je značne náročné, najmä pri vyššom počte neurónov. Vo viacvrstvovej sieti sme schopní sledovať každú vrstvu samostatne vzhľadom na vstup z predošlej vrstvy.

Ďalšou výhodou tohto modelu je jednoduchá implementácia prostredníctvom štandardných lineárnych algoritmov, kde

vyhodnocujeme jednoducho signál od vstupnej vrstvy postupne až po výstupnú.

Rovnako jednoduché je aj zdefinovanie štruktúry samotnej siete, pretože postačujúci údaj, ktorý jednoznačne identifikuje štruktúru siete, je jednorozmerné pole údajov ktoré, obsahuje hodnoty počtu neurónov v určitej vrstve.

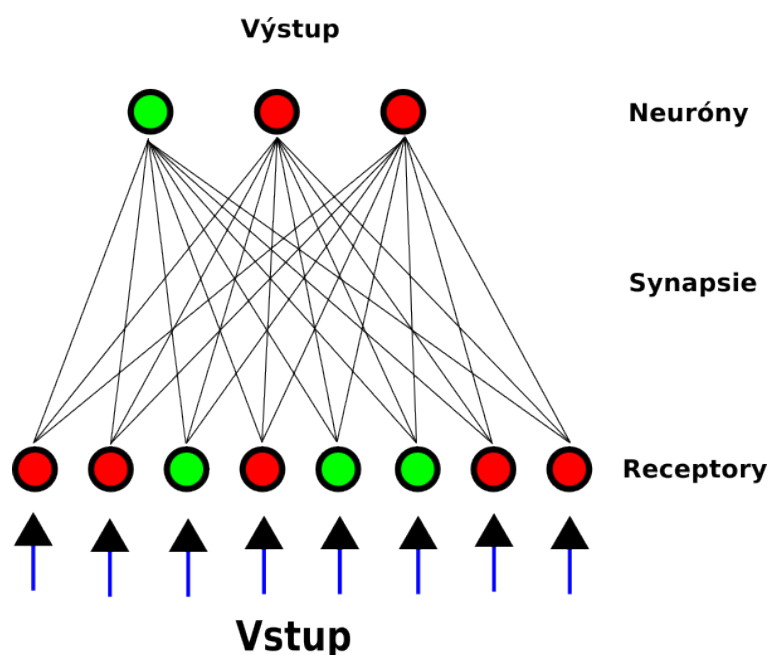
#### ***4.2.2.2. Spôsob učenia umelej neurónovej siete***

Umelé neurónové siete používajú pri učení Hebbovu teóriu menenia synaptických váh. To znamená, že hodnota váhy sa zvýši ak cez synapsiu prešiel signál ktorý správne prispel k excitácii alebo inhibícii neurónu a naopak.

Problémom implementácie tejto teórie do umelých neurónových sietí bolo, že signál idúci neurónovou sieťou sa rôzne vetvil a bolo ťažké sledovať a následne vyhodnotiť, či daná synapsia prispela svojou váhou správne k celkovému zhodnoteniu vstupu.

Aj v tejto problematike nastal zlom s definovaním viacvrstvých neurónových sietí. Pri nich vznikla takzvaná „Back propagation“ učebná metóda, ktorá funguje na princípe spätného šírenia sa signálu. Upravovanie synaptických váh je vyhodnocované opačným smerom ako ide signál, teda od výstupu k vstupu. Keďže celý proces ide po vrstvách, nie je problém vyhodnotiť či určitá synapsia prispela k správne mu vyhodnoteniu vstupného signálu z predošlej vrstvy.

### 4.2.2.3. Perceptróny



Obrázok 16

Sú predchodcovia viacvrstvých neurónových sietí. Perceptron je takpovediac jednovrstvá neurónová sieť. Dôležitou schopnosťou perceptronov je spracovať vstupný signál, ktorý je prijatý vrstvou receptorov.

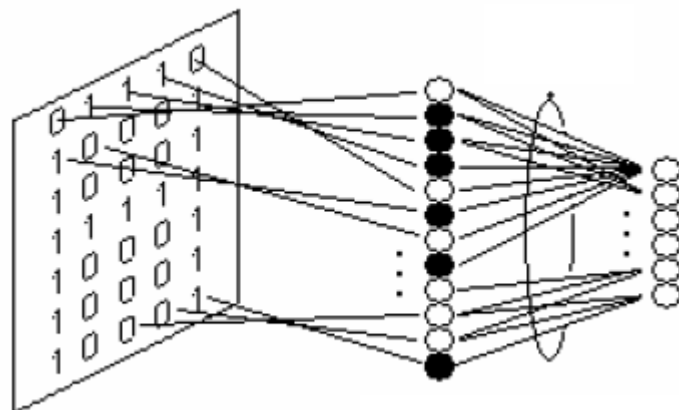
Receptory sú objekty podobné neurónom. Ich základnou vlastnosťou je, že sa môžu nachádzať v aktivovanom ( $1$ ) alebo neaktivovanom ( $0$ ) stave. Tento stav sa mení na základe nejakého vonkajšieho podnetu - vstupu. Ďalšou jeho vlastnosťou je, že sa na receptor môžu napojiť synapsie nejakého neurónu, ktorý vyhodnocuje stav, v ktorom sa nachádzajú receptory na ktoré je neurón napojený. Receptor sa pre synapsiu, ktorá je naňho napojená správa rovnako ako neurón. V prípade že je receptor aktivovaný, synapsia prenesie jeho signál na príslušný neurón, rovnako ako keby bola napojená na excitovaný neurón.

Perceptron je teda tvorený vrstvou receptorov, na ktoré je napojená vrstva neurónov. Tieto vyhodnocujú binárny vektor vytvorený hodnotami na receptoroch.

Perceptrony boli jedny z prvých umelých neurónových sietí. Boli schopné riešiť akékoľvek lineárne separovateľné problémy<sup>5</sup>, to znamená základné logické operátory. Problém nastal s funkciou *XOR*, ktorá nie je lineárne separovateľná. To zapríčinilo, že problematika umelých neurónových sietí bola považovaná za zbytočnú. Tento omyl vyvrátili až viacvrstvé neurónové siete, ktoré dokážu riešiť už aj lineárne neseparovateľné problémy.

Štandardný receptor môže nadobúdať len hodnoty *1* alebo *0* (aktivovaný alebo neaktivovaný). Celá množina receptorov vytvára maticu receptorov, ktorá slúži ako vstup pre neurónovú sieť.

Pre obrázkové vstupy, akými sú napríklad písmená, alebo podpisy je jednoduché vygenerovať dvojrozmernú maticu, ktorá predstavuje súradnicový systém s určitým rastrom nad obrázkom. Príslušný receptor je aktivovaný vtedy, ak je obrázok na danej súradnici čierny a neaktivovaný ak je biely.



<http://www.cis.hut.fi/AKRR05/papers/amklc05rondinoni.pdf>

**Obrázok 17**

Každý neurón z perceptronu prvej vrstvy neurónov (neuróny priamo spojené s receptormi) môže byť napojený na každý receptor

<sup>5</sup> [1]Mirko Novák a Kolektív (1998) Umělé neuronové sítě teorie a aplikace

vstupnej matice. Ale postupne trénovaním siete môžu strácať spojenia s nesúvisiacimi receptormi na váhe, takže pri veľmi nízkej váhe spojenia ich môžeme rovno eliminovať bez zmeny funkcionality siete. Preto niekedy neuróny prvej vrstvy nebývajú prepojené na celú maticu receptorov, ale len na určité receptory. Úloha takéhoto neurónu je dať vstupný signál nejakého receptora do kontextu len so signálom súvisiacich receptorov a nie celej matice. Takéto preddefinovanie štruktúry perceptronu môže urýchliť tréningový proces neurónovej siete. Je to niečo ako vrozený inštinkt neurónovej siete.

#### **4.2.2.4. Dynamické neurónové siete**

Pri navrhovaní štruktúr neurónových sietí sa aj pri komplexnejšom modeloch snaží prizeriť na funkcionality pôvodnej prirodzenej predlohy.

V mozgu napríklad v súčasnosti dokážeme identifikovať rôzne nervové centrá<sup>6</sup>, ktoré spracovávajú určitý typ signálov. Tieto centrá navzájom spolupracujú tým že výstupný signál nejakého komplexu môže byť vstupným signálom iného komplexu. Zároveň si tieto centrá môžu poskytovať spätnú väzbu, kedy je vyhodnotený či spracovaný výstup nejakého centra bol správny alebo nie.

Je to ako keby sme navzájom poprepájali viacero neurónových sietí, kde jedna učí druhú. Takýto model bol už implementovaný a priniesol veľmi zaujímavé výsledky v mnohých oblastiach.

#### **4.2.2.5. Použitie neurónových sietí**

Na princípe prepojenia viacerých neurónových sietí, ktoré navzájom spolupracujú je napríklad založená *Creativity Machine*<sup>7</sup>, čo je patentovaný typ neurónovej siete, ktorá vymyslela niekoľko tisíc hudobných melódií, niekoľko stoviek nových anglických slov, ktoré

---

<sup>6</sup> [2] Mirko Novák, Josef Faber, Olga Kufadaki (2002) Neurónové siete a informační systémy živých organismů

<sup>7</sup> <http://www.imagination-engines.com>

sa začali dokonca používať alebo zubnú kefku *Oral-B Cross Action*<sup>8</sup>. Aj keď tieto nápady vznikajú virtuálnou kreativitou, ktorá vzniká náhodným prerušovaním synapsií v jednom z komplexov neurónových sietí tvoriacich *Creativity Machine*, môžeme povedať, že náhodné podnety interpretované správnym spôsobom a usmernené na určitý cieľ môžu mať zmysluplné výsledky.

Ľudská kreativita a myslenie sú často považované za jedinečné vlastnosti ľudskej mysle a preto myšlienka, že by mohla byť nahradená počítačom je všeobecne veľmi ťažko akceptovaná nielen pre laikov, ale aj pre akademické kruhy.

Špecifickou vlastnosťou neurónových sietí je to, že fungujú ako čierna skrinka do ktorej vložíme nejaký vstup a na druhej strane dostaneme nejaký výstup. Aj keď je takýto výstup zmysluplný, najmä u zložitejších neurónových sietí, nevieme presne povedať ako sa neurónová sieť k týmto výstupom dopracovala. Čím je spracovávaný problém zložitejší a neurónová sieť komplexnejšia, tým menej vieme prácu neurónovej siete kontrolovať a skúmať.

Napriek tomu výsledky, ktoré prináša aplikácia neurónových sietí do rôznych expertných systémov, presvedčujú čoraz viac o tom, že myšlienka neurónových sietí založená na jednoduchom sčítavaní váh jednotlivých synapsií, je použiteľná pri riešení mnohých zložitých problémov a vygenerované výstupy majú svoje opodstatnenie.

Kritickým miestom pri neurónových sieťach je ich počiatková nevedomosť, ktorá je odstraňovaná následným učením, kde musíme mať k dispozícii dostatočné množstvo dát na ktorých je sieť trébovaná. Práve nedostatok dát pre učenie, je často dôvodom, prečo nie je možné nasadiť neurónové siete tam, kde by ich schopnosti mohli byť veľkým prínosom.

V súčasnosti sú neurónové siete nasadené najmä v oblastiach kde existuje veľké množstvo vstupných dát. A to napríklad pri

---

<sup>8</sup> <http://www.mindfully.org/Technology/2004/Creativity-Machine-Thaler24jan04.htm>

rozoznávaní písma, kde vstupné dáta veľmi často existujú ako digitalizovaná predloha v naskenovaných dokumentoch.

Ešte jednoduchšie je použitie pre predikciu trendov pri dátach, ktoré sú zaznamenané v rôznych kontinuálne dopĺňaných číselných tabuľkách, ako napríklad burzové indexy, teplota prostredia, rýchlosť vetra, vodných prúdov. Teda v oblastiach kde je možné zabezpečiť automatický zber dát.

Umelé neurónové siete sú teda už implementované v mnohých oblastiach nášho života, pričom o ich nasadení nemusíme ani tušiť. Automatické rozoznávanie PSČ čísla na poštových zásielkach alebo rozoznávanie odtlačkov prstov používa úspešne túto technológiu už niekoľko desaťročí.



## 5. Výsledky

### 5.1. Čo je Neuroser

Projekt „Neuroser“ vznikol ako aplikácia neurónových sietí, pre analýzu infračerveného spektra v rámci tejto diplomovej práce. Názov je odvodený ako skratka z anglického "NEUReural netwOrk analyZER".

Je to program, ktorý je schopný analýzy ľubovoľného spektra, teda nielen infračerveného spektra. Táto vlastnosť vychádza z toho, že vstupom do programu je jednoducho spektrum, ktoré obsahuje určitý počet kanálov a každý z kanálov môže nadobúdať hodnotu z reálneho intervalu  $\langle 0,1 \rangle$ . Tieto podmienky spĺňa aj infračervené spektrum a teda môže byť analyzované prostredníctvom tohto programu.

Použitá umelá neurónová sieť v čase jej vytvorenia nevie nič. Jej synaptické váhy sú náhodne vygenerované. Je to len zhuk neurónov, ktoré sú pospájané do určitej štruktúry, čím sú pripravené prijímať a spracovávať určitý typ signálu. Schopnosť analyzovať infračervené spektrum získava neurónová sieť až postupným tréňovaním na určitej vzorke vstupných dát.

Analýza nejakého neznámeho spektra je až posledným štádiom celého procesu. Tomu musí predchádzať proces vytvorenia a učenia konkrétnej neurónovej siete, ktorá je potom schopná vykonať samotnú analýzu.

#### 5.1.1. Štruktúra programu

Program ako taký pozostáva z niekoľkých modulov. Pracuje na báze *klient-server*, čo znamená že činnosť celého programu môže byť rozložená na viacej počítačov. Štandardne je technológia klient-server používaná vtedy, ak viacero užívateľov v rovnakom čase potrebuje pracovať paralelne nad tými istými dátami.

Strana serveru slúži potom ako centrálné úložisko dát, ktoré môžu byť poskytované na spracovanie rôznym klientským aplikáciám. Niekedy je server zároveň aj poskytovateľom samotných aplikácií a preberá na seba všetky výpočtové úlohy. Klientské stanice potom pôsobia len ako terminály, ktoré spracúvajú vstupy užívateľa a spätne zobrazujú užívateľovi dáta ktoré spracoval server.

Pri projekte Neuroser je strana serveru použitá najmä ako úložisko dát a strana klienta tieto dáta spracováva. Tento prístup umožňuje spustiť klientský program na ľubovoľnom počítači, ktorý je spojený so serverom poskytujúcim dáta na spracovanie. Týmto môžeme dosiahnuť, že finálna analýza prostredníctvom neurónovej siete, ktorá môže byť pomerne náročná na výkon počítača a strojový čas, môže byť vykonaná na nejakom superpočítači, čerpajúc dáta zo serveru, ktorý nemusí byť mimoriadne výkonný. Zároveň to umožňuje pristupovať k centrálnym údajom viacerým užívateľom naraz. Táto vlastnosť bude užitočná najmä vtedy, ak by sa program uchytí a jeho schopnosti by chceli využiť viacerí ľudia nezávisle od seba hocikde na svete. Jediné čo by potom potrebovali, by bol internetový prístup na server, kde by bežala serverová časť projektu.

Relatívne veľkorysý prístup k štruktúre projektu vychádza aj z toho, že použité technológie uloženia dát pracujú prirodzene na báze klient-server a implementácia v rámci uzavretej aplikácie by bola omnoho zložitejšia.

### **5.1.2. GNU GPL - Ako nezabiť nádejný projekt**

Pri programovaní projektu Neuroser boli použité výhradne technológie dostupné pod licenciou GNU GPL<sup>9</sup> (GNU General Public License – GNU<sup>10</sup> Všeobecná verejná licencia). Táto licencia neoficiálne nazývaná ako „copyleft“ umožňuje používať zadarmo všetky dostupné technológie uverejnené pod touto licenciou. Daňou za bezplatné používanie je strata akejkoľvek záruky na funkčnosť

---

<sup>9</sup> <http://www.gnu.sk>

<sup>10</sup> <http://www.gnu.org>

technológií, ktorá je však kompenzovaná podmienkou zverejnenia zdrojového kódu. To znamená, že hocikto, kto neverí funkčnosti technológie, si ju môže preveriť pretože má k dispozícii zdrojový kód.

Licencia zároveň umožňuje meniť zverejnené zdrojové kódy. Táto vlastnosť má za následok to, že väčšina chýb, ktoré sa vyskytnú v aplikáciách zverejnených pod touto licenciou, je často veľmi skoro odstránená v zdrojovom kóde samotnými užívateľmi, ktorí tieto chyby objavili. Funkčné technológie zverejnené pod touto licenciou sa tak stávajú veľmi kvalitné, čoho dôkazom je ich stále väčšia popularita (Linux, Apache, GIMP, Mozilla, OpenOffice, Inkscape, PSPad, DBDesigner, a mnoho ďalších...<sup>11</sup>)

Veľmi diskutovanou podmienkou v komerčnom svete je takzvaná „infekčná podmienka“ tejto licencie, ktorá vyžaduje aby ľubovoľná aplikácia, ktorá používa nejakú technológiu na základe licencie GNU GPL, bola tiež zverejnená pod touto licenciou. V komerčnom svete to znamená, že by každý takýto program mal byť dostupný bez záruky zadarmo. V akademickom svete je táto podmienka skôr zárukou toho, že takto zverejnené technológie si nemôže niekto privlastniť a vydávať za svoje, respektíve predávať ako svoje.

Jednou z ďalších výhod tejto licencie je, že projekty ktoré boli pod ňou zverejnené nemusia zaniknúť ak pôvodný autor na nich prestal pracovať. U inak zverejnených projektov sa veľmi často stáva, že projekt zanikne ak pôvodný autor nemá ďalší záujem na ňom pracovať. Ak sa aj objaví niekto, kto oficiálne osloví pôvodného autora so žiadosťou na prevod autorských práv, pôvodný autor veľmi často začne robiť „drahoty“ a práva len tak zadarmo neprevedie, napriek tomu, že projekt inak zapadne prachom. V prípade, že pôvodný autor uverejní jeho projekt pod licenciou GNU GPL, je celkom možné, že sa ho niekto chytí a pôvodný autor sa dokonca stane slávnym ak projekt neskôr uspeje, pretože podmienkou licencie je aj

---

<sup>11</sup> <http://www.linuxsoft.cz>

to, že z projektu a zdrojových kódov nesmú byť odstránené nijaké podpisy identifikujúce kohokoľvek kto kedy na projekte pracoval.

Osobne momentálne neviem zhodnotiť nakoľko sa budem v budúcnosti venovať problematike projektu Neuroser. Keďže si myslím, že projekt má veľký potenciál a zároveň vidím, koľko rôznych vylepšení by sa v ňom dalo v budúcnosti ešte urobiť, zverejňujem celý projekt pod licenciou GNU GPL. Je to jednak dôsledok toho, že pri tvorení projektu boli použité rôzne technológie bezplatne na základe tejto licencie, a zároveň tým dávam voľnú ruku prípadným pokračovateľom, ktorí sa ujmú projektu v prípade, že ja stratím o projekt záujem.

### 5.1.3. Použité technológie

Stranu servera ako úložisko dát tvoria dve samostatné databázy. Ako technológiu pre uloženie dát bol použitý na základe *GNU GPL* licencie databázový server *MySQL* verzia *4.1.14*. V súčasnosti existuje už verzia rady *5.x*, ktorá by mala byť použiteľná rovnako bez akýchkoľvek úprav. Štruktúra projektu umožňuje dokonca použitie viacerých nezávislých databázových serverov. To znamená, že pri reálnom nasadení programu na rôznych miestach môžu byť tieto databázy vytvorené pre každé miesto zvlášť, alebo môžu užívatelia navzájom zdieľať údaje z vlastných databáz, bez toho aby ich do nich importovali.

Jednotlivé klientské moduly boli programované prostredníctvom jazyka *C#*. Ako vývojové prostredie bolo použité *ICS<sup>12</sup> Sharp Develop* verzia *2.0.0 beta release*. Je to grafické vývojové prostredie typu *RAD* (Rapid Application Development – rýchly vývoj aplikácií), ktoré umožňuje rýchlu tvorbu užívateľského prostredia prostredníctvom preddefinovaných ovládacích prvkov *Windows Forms* (prvky formulárov operačného systému Windows). Ako kompilátor bol použitý štandardný kompilátor jazyka *C#* obsiahnutý

---

<sup>12</sup> <http://www.icsharpcode.net>

v *Microsoft .NET Framework 2.0*. Zdrojový kód používa už objekty verzie *Microsoft .NET Framework 2.0*, takže s nižšími verziami ako *.NET Framework 1.0* alebo *.NET Framework 1.1* je nepoužiteľný. Jednotlivé moduly môžu byť skompilované do samostatných knižníc typu *\*.dll*, čo umožňuje ich použitie v rámci akéhokoľvek iného vývojového prostredia *.NET Framework* v iných aplikáciách používajúcich technológiu projektu.

Ako zastrešujúca klientská aplikácia je zatiaľ naprogramovaná len jedna aplikácia, ktorá je skompilovaná so všetkými knižnicami do jedného súboru *neuroser.exe*. V tomto formáte je prenositeľná a spustiteľná bez akejkoľvek inštalácie samostatne na ľubovoľný počítač s operačným systémom *Microsoft Windows 98* a vyššie, kde je nainštalovaný bezplatný upgrade systému *Microsoft .NET Framework 2.0*.

Pre prácu s dátami je treba aby počítač disponoval pripojením na internet, alebo lokálnu počítačovú sieť, prostredníctvom ktorého by sa napojil na databázový server. Pre spojenie s databázovým serverom je použitá knižnica *MySQL Connector Net* verzia *1.0.7*, ktorá umožňuje pripojenie prostredníctvom štandardného sieťového protokolu *TCP-IP*. Klientská aplikácia zatiaľ neumožňuje zmenu komunikačného portu, preto sa vyžaduje aby databázový server komunikoval na štandardnom porte *3306*.

Alternatívou na uloženie dát je inštalácia vlastného databázového serveru na jeden počítač s klientskou aplikáciou. V takom prípade treba do url adresy serveru v klientskej aplikácii zadať adresu „*localhost*“, ktorá sa odvolá späť na ten istý počítač.

K vytvoreniu oboch databáz postačujú inštalčné skripty v jazyku *SQL*, ktoré stačí spustiť ako bežný dotaz v prostredí databázového serveru. Samozrejme k tomu treba mať potrebné práva ktoré zabezpečí administrátor databázy.

## 5.2. Implementácia databázového servera

### 5.2.1. Databáza spektier

Hneď pri začatí riešenia problematiky analýzy infračervených spektier som narazil na problém nedostatku množstva potrebných vzoriek v digitalizovanom formáte. K dispozícii bolo množstvo identifikovaných spektier v rôznych spektrálnych katalógoch vytlačených na papieri, ktoré bolo možné naskenovať. Taktiež na internete je veľké množstvo kvalitných obrázkov obsahujúcich infračervené spektrum organických zlúčenín. Tieto obrázky síce boli v digitálnom formáte, no digitalizácia spektra znamená transformáciu týchto obrazov do tabuľky údajov, ktoré dokáže spracovať počítač a takýchto dát v potrebnom formáte bolo veľmi málo.

Keďže neurónová sieť vyžaduje pre uspokojujúci tréning relatívne veľké množstvo dát, rádovo stovky až tisíce, bolo potrebné takéto dáta nejakým spôsobom získať a následne uložiť v nejakom štandardizovanom formáte, odkiaľ by boli kedykoľvek dostupné na analýzu bez ďalšieho spracovania.

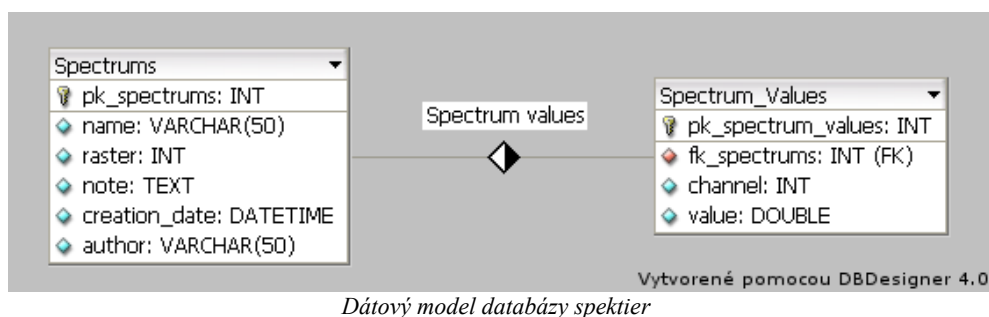
Pre počiatočné uchovanie dát po digitalizovaní bol použitý formát *XML*, ktorý vie v súčasnosti spracovať množstvo programov, bez dodatočného konvertovania. Zároveň v technológii *.NET Framework* je priamo implementovaná knižnica funkcií, ktoré dokážu ľahko pristupovať k dátam uloženým v súbore vo formáte *XML*.

```
<SPECTRUM>
  <NAME>Názov zlúčeniny</NAME>
  <RASTER>9</RASTER>
  <CHANNELS>
    <CHANNEL number="1" value="0.123456">
    <CHANNEL number="2" value="0.098765">
      ...
    <CHANNEL number="7000" value="0.0">
  </CHANNELS>
</SPECTRUM>
```

*Ukážka XML súboru s digitalizovaným spektrom*

**Obrázok 18**

Tento formát ale nebol vhodný pre automatické spracovanie viacerých spektier naraz, pretože by bolo potrebné určovať buď manuálne názvy súborov so spektrami pri načítaní každého nového spektra, alebo pomenovávať súbory so spektrami určitou postupnosťou, čím sa strácala prehľadnosť názvov jednotlivých spektier. Každý súbor mal názov podľa zlúčeniny, ktorej spektrum obsahoval, čo umožňovalo prehľadávanie spektier bez potreby otvárania súboru. Otvorenie a načítanie súboru, ktorý obsahuje bežne 7000 tagov<sup>13</sup> s údajmi chvíľu trvá aj najrýchlejšiemu prehliadaču XML súborov. Preto vznikla myšlienka ukladať spektrá do referenčnej databázy, odkiaľ ich bolo možné kedykoľvek získať.



Dátový model databázy spektier

Obrázok 19

V referenčnej databáze sú dáta spektier rozložené do dvoch tabuliek, kde v jednej tabuľke sú uložené primárne informačné údaje o spektre a v druhej tabuľke údaje hodnôt jednotlivých kanálov. Takéto rozdelenie umožňuje pomerne rýchle prehľadávanie spektier prostredníctvom prvej tabuľky bez potreby načítavania hodnôt kanálov. Zároveň má každé spektrum priradené jednoznačné identifikačné číslo z rady po sebe idúcich prirodzených čísel, ktoré môže byť použité pri automatickom načítavaní jednotlivých spektier pri učení neurónovej siete.

Databáza spektier je samostatne použiteľný modul, v ktorom môže byť uložené akékoľvek infračervené spektrum. V tabuľke *Spectrums* môžu byť dodefinované ešte ďalšie dodatočné údaje. Podstatný údaj je uložený v stĺpci *Raster* a to záporný násobok indexu

<sup>13</sup> tag – značka jazyka XML ohraničená <> zátvorkami

mernej jednotky kanálu. Keďže štandardne je kanálový raster nastavený na nanometre je predvolená hodnota 9 ( $1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$ ). Nastavenie tejto hodnoty umožňuje uložiť spektrum namerané v ľubovoľne detailnom akomkoľvek rasti.

```
CREATE TABLE Spectrums (  
  pk_spectrums INT NOT NULL AUTO_INCREMENT,  
  name VARCHAR(50) NULL,  
  raster INT NOT NULL DEFAULT 9,  
  note TEXT NULL,  
  creation_date DATETIME NULL,  
  author VARCHAR(50) NULL,  
  PRIMARY KEY(pk_spectrums)  
);  
  
CREATE TABLE Spectrum_Values (  
  pk_spectrum_values INT NOT NULL AUTO_INCREMENT,  
  fk_spectrums INT NOT NULL,  
  channel INT NULL,  
  value DOUBLE NULL,  
  PRIMARY KEY(pk_spectrum_values)  
);
```

*Inicializačný skript databázy spektier*

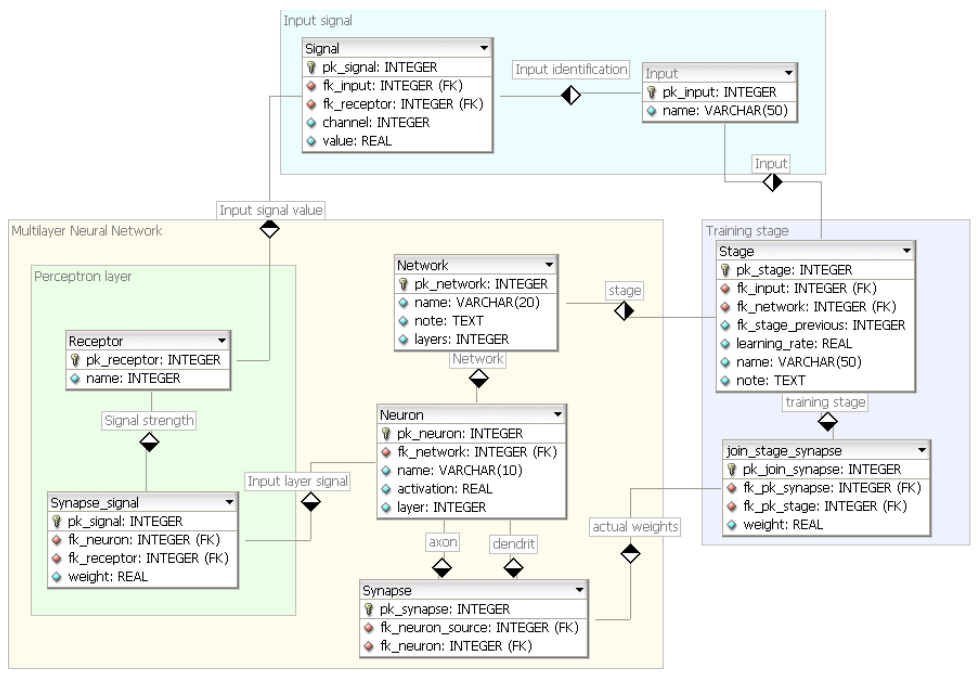
**Obrázok 20**

### 5.2.2. Databáza neurónových sietí

Pri navrhovaní optimálnej štruktúry neurónovej siete sa stretávame s problémom, že nevieme ako presne by mala vyzeráť takáto štruktúra. Väčšinou sa kvalita štruktúry overí až po implementácii a tréningu. V prípade zvolenia zlej štruktúry a zadefinovania novej, treba celý cyklus učenia znova opakovať. Niekedy proces učenia treba prerušiť a uložiť aktuálny stav synaptických váh.

Preto vznikla potreba uloženia stavov určitej neurónovej siete a jej celého tréningového procesu aby tieto dáta mohli byť potom využité neskôr pre iný typ neurónovej siete, alebo pre pokračovanie tréningového procesu existujúcej siete.





Dátový model databázy neurónových sietí

Obrázok 21

Na uloženie rôznych štruktúr neurónových sietí a ich aktuálnych tréningových stavov bola opäť použitá SQL relačná databáza. Možnosť využitia relácií medzi rôznymi entitami údajov bola v tomto prípade ešte ideálnejšia ako pri spektrálnej databáze. Jednotlivé entity sú označené regiónmi v dátovom modeli.

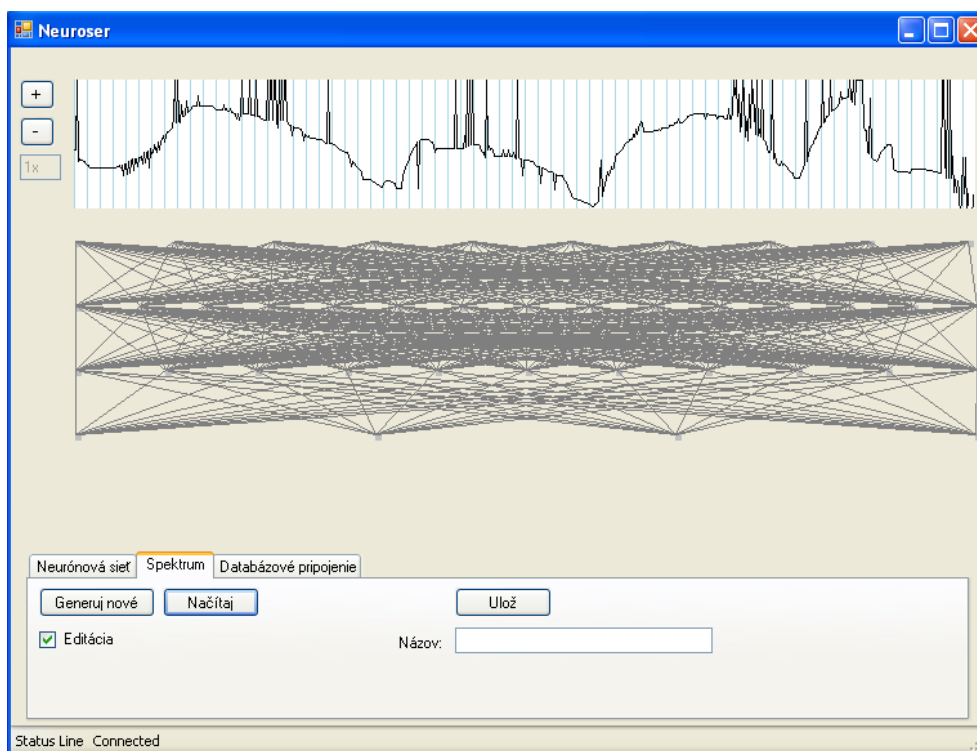
-*Neurónová sieť (Multilayer Neural Network)*- tabuľky slúžiace na uloženie štruktúry neurónových sietí. Tabuľka *Network* slúži na ukladanie primárnych informácií o uložených neurónových sieťach. Pomocou nej môžeme prehľadávať zoznam sietí uložených v databáze. Tabuľky *Neuron* a *Synapse* držia informáciu o štruktúre danej siete. *Perceptron layer* – tabuľky vstupnej (nultej) vrstvy neurónovej siete. Princíp uloženia dát je podobný ako pri neurónoch a synapsiách.

-*Vstupný signál (Input signal)* – tabuľky držiace rôzne vstupné dáta použité pri tréningu, alebo priamo pri analýze dát neurónovej siete. Ide o podobné tabuľky ako pri databáze spektier, až na to že teraz sú uložené v kontexte vstupných dát. Ako už bolo spomenuté skorej, projekt Neuroser je schopný rozoznávať akýkoľvek typ spektra

a infračervené spektrum je len jednou z podmnožín celkových možných vstupných dát. Preto boli použité dve samostatné databázy, ktoré umožňujú modul neurónovej siete použiť aj na iné účely ako analýzu infračerveného spektra.

-*Tréningové stavy (Training stage)*– tieto tabuľky sú vlastne pamäťou neurónovej siete, bez ktorej by nebola schopná vyhodnocovať signál ani sa ďalej učiť. Sú v nich držané synaptické váhy, ktoré predstavujú niečo ako „vedomie“ danej neurónovej siete. Uloženie každého zo stavov do ktorých sa neurónová sieť pri tréningovom procese dostane, umožňuje experimentovať s rôznymi učebnými procesmi u jednej neurónovej siete. Relácie tréningových stavov zároveň prepájajú neurónovú sieť s údajmi vstupného signálu.

### 5.3. *Klientské moduly*



*Program Neuroser*

**Obrázok 22**

Užívateľ pri práci s programom Neuroser samozrejme nepoužíva priamo databázové servery s dátami, ale dáta spracováva na klientskej strane prostredníctvom klientských aplikácií, ktoré obsahujú

grafické užívateľské prostredie, pre jednoduchú prácu prostredníctvom myši a klávesnice.

Takýmto spôsobom môže k dátam pristupovať nielen aplikácia *Neuroser* ale aj ľubovoľné iné aplikácie, ktoré by mohli využiť dáta uložené na serveri. Vďaka licencií GNU GPL a rozdeleniu funkcionality klienta do viacerých modulárnych knižníc môžu iné aplikácie využiť priamo tieto knižnice, nad ktorými môžu vystavať omnoho komplexnejšie aplikácie.

### **5.3.1. Modul databázového pripojenia**

Je to knižnica funkcií, ktoré zabezpečujú pripojenie na databázový server. Jej implementácia bola uskutočnená kvôli zabezpečeniu možnej kompatibility s inými typmi databázových serverov. Všeobecne projekt používa na spracovanie dát z databáze technológiu *Microsoft ADO.NET*, ktorá má v sebe implementované dátové štruktúry na prácu s ľubovoľnou relačnou databázou. Avšak táto technológia má v sebe implementované len prostriedky na pripojenie štandardných databázových serverov firmy *Microsoft*. Keďže projekt používa databázový server *MySQL* bolo potrebné implementovať knižnicu *MySQL Connector Net*, ktorá je schopná komunikovať s databázovým serverom *MySQL* a plniť dátové štruktúry *Microsoft ADO.NET*.

V prípade že by vznikla požiadavka použiť iný databázový server (*Oracle, Postgres, FoxPro, ...*), stačí preprogramovať iba modul databázového pripojenia. Ak by sme túto medzivrstvu neimplementovali a naprogramovali príkazy na prácu s databázou priamo do ostatných modulov, bola by požiadavka použitia iného databázového serveru nerealizovateľná bez preprogramovania všetkých modulov.

### **5.3.2. Modul spektra**

Hlavnou úlohou tohto modulu je pripraviť dáta analyzovaného spektra tak aby bolo možné ho dať na vstup neurónovej siete. Objekt

spektra pri inicializácii má nastavené všetky hodnoty kanálov na nulovú hodnotu.

Pri natiahnutí spektra uloženého v databáze sa nastaví na správne hodnoty iba tie kanály, ktoré boli uložené. Všetky ostatné ostávajú nulové. Rovnako aj pri natiahnutí týchto hodnôt z XML súboru. Preto je možné spektrum v každom okamihu editovať a upravovať jednotlivé hodnoty kanálov. Keby ostali hodnoty niektorých kanálov chybou v digitalizácii nastavené na nulu, zatiaľ čo hodnoty okolitých kanálov by sa pohybovali v iných dimenziách, mohlo by to pôsobiť rušivo na schopnosť neurónovej siete analyzovať správne dané spektrum. Aj keď majú neurónové siete schopnosť odlíšiť drobné odchýlky od predpokladaného vzoru, mala by byť neurónová sieť trénovaná na správnych vzoroch.

Modul má v sebe ďalej implementované funkcie, ktoré umožňujú uložiť upravené hodnoty spektra späť do databázy spektier alebo do súboru typu *XML* pre prenos pomocou iných médií.

### **5.3.3. Modul neurónovej siete**

Pri programovaní tohto modulu bolo naplno použité objektovo orientované programovanie v jazyku *C#*. Základom modulu je objekt neurónu (definíciu triedy *Neuron* možno nájsť v kapitole 4.2.1.2.), ktorému boli nadefinované potrebné vlastnosti. Každý neurón obsahuje pole objektov typu *synapsia*, ktoré určujú štruktúru neurónovej siete. Keďže takáto štruktúra dokáže byť prehl'adávaná iba jedným smerom, treba aby boli v sieti neuróny identifikované aj podľa vrstiev. To umožňuje pri vyhodnocovaní signálu alebo učení pomocou „back propagation“ postupovať po jednotlivých vrstvách.

#### **5.3.3.3. Štruktúra neurónovej siete**

Pri návrhu štruktúry neurónovej siete je dôležité zohľadniť k čomu má byť sieť určená. Je dobré brať do úvahy ako k analýze daného problému pristupuje prirodzená predloha a snažiť sa rovnaký

postup implementovať aj do neurónovej siete prostredníctvom nadefinovania správnej štruktúry.

K analýze spektra môžeme pristupovať viacerými spôsobmi. Pôvodná myšlienka nadefinovania štruktúry neurónovej siete sa snažila čo najvernejšie kopírovať spôsob analýzy infračerveného spektra človekom (zhrnutý v kapitole 2.3.). Predpokladom samozrejme bolo, že ide o spektrum nejakej organickej zlúčeniny.

V takomto prípade sa snaží človek najprv nájsť charakteristické pásy (intervaly kanálov), či sa tam nachádza nejaký „zaujímavý“ signál. Ak v týchto pásoch nájde niečo zaujímavé venuje sa ďalej jednotlivo skúmaniu týchto pásov. Potom dá dohromady výsledky skúmania jednotlivých zaujímavých pásov a následne môže vysloviť nejakú hypotézu o skúmanej zlúčenine. Tento hypotetický výsledok sa následne snaží overiť tým, že v spektre hľadá ďalšie charakteristické znaky, ktoré by sa tam mali vyskytovať pri danej hypotetickej zlúčenine. Týmto procesom potvrdí či ide o danú zlúčeninu.

Tento proces pozostáva z niekoľkých krokov. Pri analýze prostredníctvom neurónovej siete nie je problém rozdeliť vyhodnocovanie do niekoľkých krokov, kedy každý krok analyzuje iná neurónová sieť, ktorej výstup je zároveň vstupom nasledujúcej siete. Problémom pri nadefinovaní takejto štruktúry sa stal v tomto prípade hneď prvý krok a to nájdenie "zaujímavých" okien v spektre.

Prvé pokusy pozostávali z toho nadefinovať čo vlastne znamenajú „zaujímavé“ oblasti v rámci spektra, aby sme túto schopnosť boli schopní pretransformovať do vstupnej matice pre neurónovú sieť. Tento problém sa mi však nepodarilo uspokojivo vyriešiť.

Na základe tohto neúspechu som dospel k tomu, že človek ktorý analyzuje spektrum vie kde má „zaujímavé“ oblasti hľadať. Odtiaľ vznikla myšlienka možnosti manuálnej definície sub-neurónových sietí, kde každá takáto sieť by analyzovala len dopredu určenú časť spektra a hľadala v nej stopy po danom type väzby.

Každá z týchto neurónových subsietí by bola potom vytrénovaná samostatne za účelom identifikovania konkrétneho pásu. Tréning však môže byť vykonávaný pre všetky subsiete nad tou istou vzorkou dát.

Potom môžeme vytvoriť takzvanú „finálnu“ neurónovú sieť, ktorej vstupom by neboli vstupné receptory, ale výstupné neuróny subsietí. Keď zjídeme do extrému, štruktúra nadefinovania neurónovej siete nám umožňuje dokonca za seba pospájať aj niekoľko finálnych sietí, čím dokážeme namodelovať ľubovoľný postup lineárneho rozhodovania v klasických algoritmoch.

Celá štruktúra siete stále spadá do kategórie klasických viacvrstvových neurónových sietí s dopredným šírením (Feed Forward Multilayer Neural Network), ktorých funkcionality bola už mnohokrát overená v praxi.

#### ***5.3.3.1. Analógovo digitálny vstup***

Funkcionality použitej umelej neurónovej siete sa od klasických umelých neurónových sietí líši najmä vstupom. U klasických neurónových sietí je pre vstup používaná zvyčajne vrstva s perceptronom, kde vstup tvorí vektor binárnych hodnôt. V prípade vstupu ktorý tvorí napríklad 2D matica s určitým čiernobielym rastrom, nie je binárny vstup žiadnym problémom. V prípade analógového spektra sa už vynárajú určité ťažkosti s prevodom analógových hodnôt do binárneho vektoru.

Takmer od začiatku projektu som počítal s tým, že rozvoj výpočtovej techniky umožňuje nadefinovať relatívne veľký vstupný vektor. Pôvodná myšlienka bola dokonca vytvoriť 2D maticu, ktorá by pokrývala obraz celého spektra, pričom horizontálny raster by mal hustotu počtu kanálov spektra. Infračervené spektrum obsahuje rádovo niekoľko tisíc kanálov. Každý  $cm^{-1}$  vlnovej dĺžky tvorí jeden kanál pričom rozsah meranej oblasti spektra je zhruba od  $500$  do  $4000\ cm^{-1}$ .

Otázne bolo aký raster zvoliť pre % absorbovaného spektra. Pri zvolení hustého rastra veľmi narastá veľkosť vstupného vektora, čo vyžaduje rovnaký nárast objemu množiny tréningových dát, čo bolo v našom prípade neprijateľné. Pri nízkom rastrovi zase môžeme strácať informáciu. Podstatné však je, že v každom kanáli by bola aktivovaná len jedna súradnica vektora a ostatné by ostali neaktívne.

Vznikla tak myšlienka nahradiť binárny vstupný vektor analógovým, ktorý by mal počet súradníc zhodný z počtom kanálov spektra. Každá súradnica vektora by potom nadobúdala hodnotu absorbovaného žiarenia. Vo vstupnej vrstve perceptronu by potom receptory nenadobúdali binárne hodnoty z množiny  $[0,1]$  ale analógové hodnoty z intervalu  $\langle 0,1 \rangle$ . Tieto hodnoty by pri vyhodnocovaní neuróny z prvej vrstvy násobili váhou synapsií napojených na receptory. Táto modifikácia vstupnej masky nahradila pravdepodobne vstupný perceptron, ktorý by obsahoval rádovo sto až tisícnásobne viac receptorov a vyžadoval by si veľmi veľkú množinu vstupných dát na relevantné vytrénovanie.

Podobnú myšlienku som sa pokúšal nájsť pri iných implementáciách neurónových sietí na Internete, ale nepodarilo sa mi zatiaľ nájsť obdobnú implementáciu vstupného vektora neurónovej siete. Aj keď ide o pomerne jednoduchú myšlienku, jej dosah môže byť veľký. Keďže som nikde nenašiel ani vyvrátenie funkčnosti tejto myšlienky rozhodol som sa ju aplikovať.

Pri jednoduchých tvaroch kriviek sa funkčnosť tejto myšlienky potvrdila a tak nevidím problém v tom aby bola aplikovaná aj pri zložitejších tvaroch kriviek. Rovnako sa osvedčila aj pri identifikácii jednotlivých pásov spektra priamo v programe, ktoré majú svojim spôsobom tiež len jednoduché tvary kriviek. Dokonalé overenie tejto myšlienky by bolo možno vhodnou témou inej diplomovej práce skôr z oblasti informatiky.

## 5.4. Súčasná funkcionálnosť

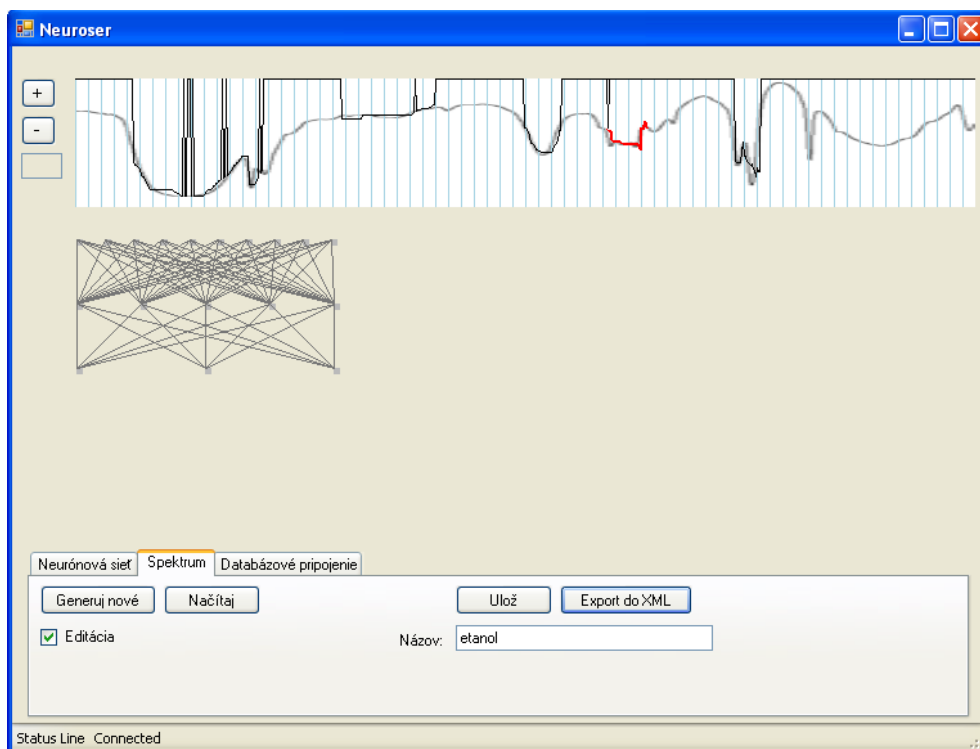
### 5.4.1. Proces digitalizácie spektra

Spektrum môžeme vložiť niekoľkými spôsobmi. Najjednoduchšou cestou je získať už digitalizované spektrum ako súbor dát v elektronickej forme. Takéto dáta je potrebné skonvertovať do štandardizovaného formátu XML popísaného v kapitole 5.2.1. Databáza spektier. Následne je takto skonvertovaný súbor možné otvoriť napríklad v programe *MySQL Query Browser*, pomocou ktorého ho môžeme uložiť do databázy spektier, alebo priamo otvoriť v programe *Neuroser*.

Ďalšou možnosťou je spektrum digitalizovať z analógovej predlohy. Predloha môže byť naskenovaná, alebo rovno uložená do nejakého štandardného grafického formátu (BMP, PNG, GIF). V tomto formáte môže byť načítaná do pozadia digitalizačného okna. V tomto okne prispôbime obrázok tak aby sme nakalibrovali správne jeho hraničné hodnoty do správnych pozícií.

Následne obkreslíme tvar spektra v popredí obrázku. Na to treba mať zaškrtnuté políčko „Editácia“, ktoré pôsobí ako poistka proti neželanému editovaniu načítaného spektra. Každý kanál spektra sa dá samostatne editovať kliknutím ľavého tlačítka myši nad pozíciou píku v danom kanáli, alebo počas stáleho stlačenia môžeme plynulým pohybom prejsť na jeden ťah viacerými kanálmi. Tvar spektra sa dá stále dodatočne editovať.





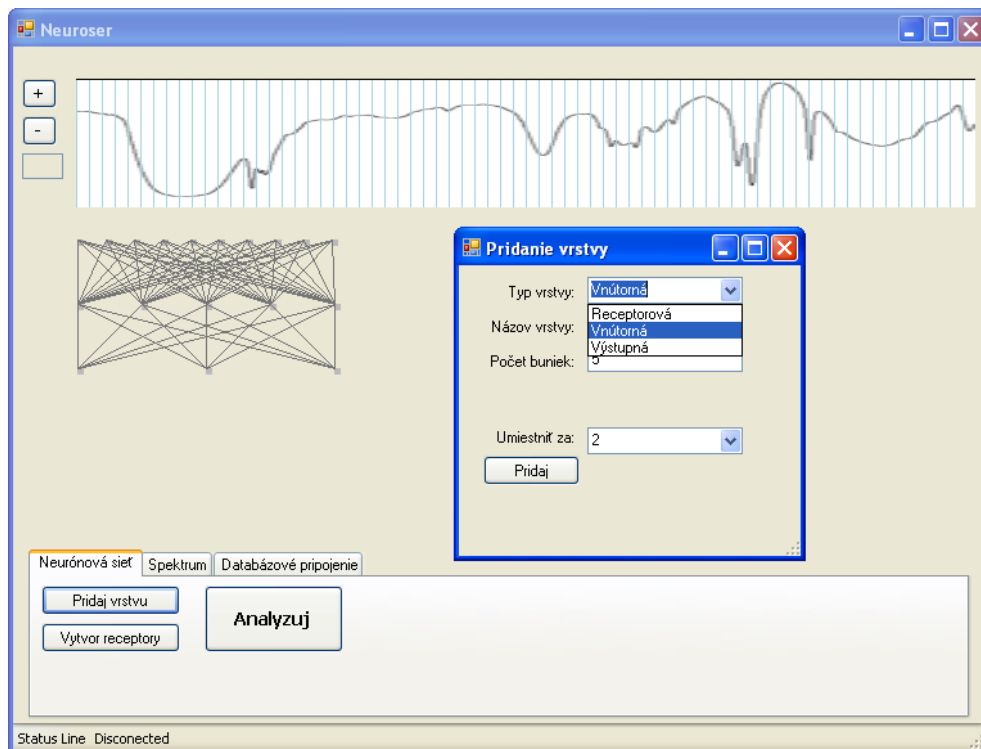
Obrázok 18

Po zeditovaní do požadujúcej podoby môžeme spektrum uložiť prostredníctvom kliknutia na tlačítko „Ulož“. Treba byť samozrejme pripojený na databázový server. Alebo môžeme spektrum uložiť do súboru vo formáte *XML* prostredníctvom stlačenia tlačítka „Export do XML“.

#### 5.4.2. Proces definície novej siete

Keďže používame viacvrstvovú neurónovú sieť je inicializácia základnej štruktúry veľmi jednoduchá a vyžaduje len zdefinovať počet neurónov v jednotlivých vrstvách.

### 5.4.2.2. Vloženie novej vrstvy



Obrázok 19

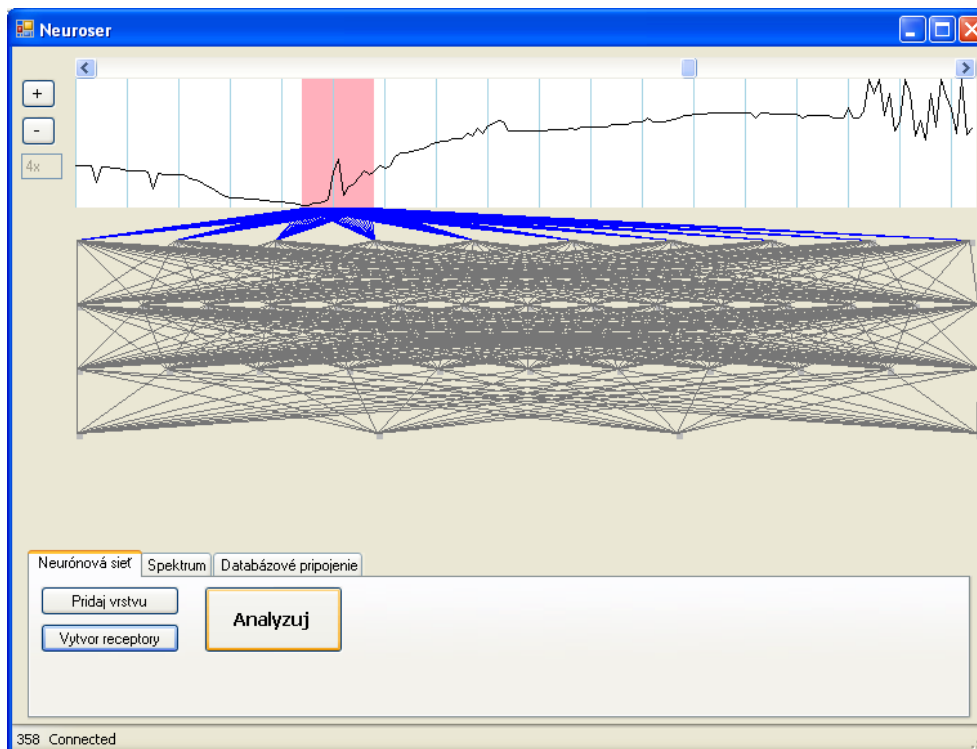
Existujúcu sieť je možné editovať prostredníctvom pridávania ďalších vrstiev do aktuálne natiahnutej siete po stlačení tlačítka „Pridať vrstvu“, ktoré vyvolá dialógové okno kde je možné zadať príslušné parametre novej vrstvy.

Nová vrstva môže nahradiť aj existujúcu receptorovú (prvú) vrstvu ktorá je napojená priamo na spektrum. V takom prípade sa všetky existujúce receptorové synapsie vymažú a je potrebné vytvoriť nové. Ak predtým existovala receptorová vrstva, tá bude napojená na všetky neuróny novej receptorovej vrstvy nezávisle od toho aké receptorové synapsie predtým obsahovala.

Všetky nové vrstvy obsahujú synapsie s náhodnými váhami. To znamená, že naučené vlastnosti predtým existujúcej neurónovej siete sa jej editáciou rušia. Editáciou neporušené synapsie obsahujúce vytrénované váhy synapsií môžu v novej sieti pôsobiť ako inštinktívne vrodene vedomosti. Podobný efekt je využitý pri *Creativity Machine*,

ktorá bola spomenutá v kapitole 4.2.2.5, a mohlo by byť zaujímavé preskúmať deje, ktoré nastanú po zeditovaní už vytrénovanej siete.

### 5.4.3. Proces učenia novej siete



Obrázok 20

Proces učenia novej siete začína nadefinovaním pásu ktorý má daná sieť analyzovať. Tento proces sa vykoná stlačením pravého tlačítka myši nad pásom spektra, ktorý chceme analyzovať. Potom stlačením tlačítka „Vytvor receptory” sa vytvorí synapsie spájajúce prvú vrstvu receptorov s označeným pásom kanálov spektra. Tento proces je možné viacnásobne opakovať a tak dať do kontextu na vstupe viacero pásov spektra.

Samotné učenie siete môže byť prevedené po vykonaní procesu analýzy, ktorý je spustený po stlačení tlačítka „Analyzuj“. Neuróny poslednej vrstvy sa potom môžu dostať do excitovaného stavu, ktorý zmení ich farbu na zelený kruh.

Po kliknutí ľavým tlačítkom myši na príslušný neurón sa potvrdí jeho hodnota, čo vyvolá proces „back propagation“ spätného šírenia sa signálu, ktorý zvýši alebo zníži príslušné váhy synapsií.

Opačný proces vyvolá stlačenie pravého tlačítka myši, ktoré znamená, že informácia bola vyhodnotená zle a zmení váhy príslušných synapsií opačným spôsobom.

Zatiaľ nie je v programe nadefinované užívateľské prostredie, ktoré zobrazuje výsledok analýzy v zrozumiteľnej forme. Interne boli siete tréované na identifikáciu určitého typu väzby. Výstupná vrstva je tvorená 3 neurónmi. Neurón vľavo mal byť aktivovaný v prípade, že ide o danú väzbu, neurón vpravo, že nejde a stredný neurón znamená, že sieť nevie jednoznačne identifikovať prítomnosť danej väzby.

#### **5.4.3.2. Bootstrap**

*„Repetitio est mater studiorum“*

Je to kontroverzná metóda, ktorá eliminuje nedostatok vstupných dát. Veľa o nej povie história samotného názvu metódy, ktorý znamená šnúрку od topánok. Metóda sa v prenesenom význame snaží o to „zdvihnúť“ sám seba zo zeme ťahaním za šnúrky od topánok“.

Princíp metódy je taký, že zoberieme malú množinu existujúcich vstupných dát. Z nich vytvoríme veľkú množinu tým, že tie isté dáta vložíme do množiny duplicitne mnohokrát tak ako keby to boli úplne odlišné dáta. Týmto množina vstupných dát nadobudne na početnosti no nezmení sa nijako ich význam pre metódu spracovania. Je to ako keby sme pri reálnom meraní vstupných dát namerali viac krát po sebe tie isté hodnoty, čo sa v skutočnosti veľmi často stáva.

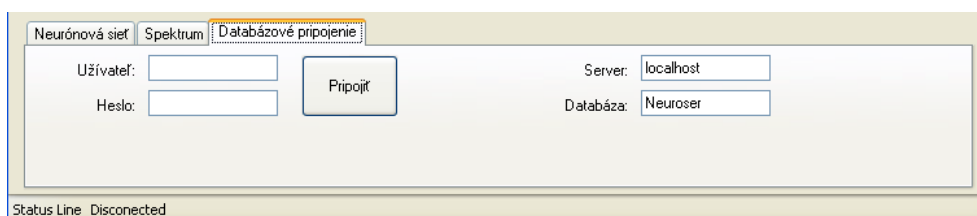
Táto metóda môže byť rovnako použitá pri tréovaní neurónovej siete. Pri každom učebnom cykle sa zmenia váhy synapsií o malú časť v závislosti od správnosti vyhodnotenia vstupu. Ak v učebnom cykle použijeme len malé množstvo rozličných vstupných dát, sieť sa nemusí vytréovať natoľko aby bola schopná správne

reagovať na neznáme vstupy. Preto môžeme už použité vstupné dáta použiť znova a znova.

Princíp bootstrapu je v tom, že poradie akým sa vyberajú vstupné dáta z množiny je náhodné. Keby sme totižto použili najprv tie isté vstupné dáta niekoľkokrát po sebe, je možné že váhy synapsii by sa dostali do takého bodu, že by sieť nebola schopná vyhodnocovať iné vstupy ako tie z prvého vstupu.

Metóda bootstrapu bola úspešne použitá pri adaptácii na karbonylovú väzbu. Celý proces bootstrapu bol naprogramovaný v rámci modulu neurónovej siete na konkrétne zadanie a zatiaľ ho nie je možné ovládať z prostredia klientskej aplikácie.

#### 5.4.4. Pripojenie k databázovému serveru



*Užívateľský interface pre pripojenie k databáze*

**Obrázok 17**

Ako vidíme na *Obrázku 17*, modul databázového pripojenia nám umožňuje pripojiť sa na akýkoľvek dostupný databázový server na internete. Stačí len do textového poľa „Server:“ zadať správnu IP alebo DNS adresu servera a do textového poľa „Databáza:“ zadať príslušné meno databázy (každý databázový server môže obsahovať viacero databáz, ktoré sú identifikované práve menom databázy). Po zadání prístupového mena a hesla k požadovanému databázovému serveru stačí len stlačiť tlačítko „Pripojiť“ a v prípade úspešného pripojenia sa v ľavom dolnom rohu zmení status z „Disconnected“ na „Connected“.

Klientský program štandardne pracuje s dvoma databázami. Jedna databáza uskladňuje informácie digitalizovaných spektier.

Druhá databáza obsahuje informácie o rôznych neurónových sieťach. Tieto databázy nemusia byť uložené na jednom serveri. Štruktúra programu umožňuje, aby existovalo paralelne neobmedzené množstvo serverov, poskytujúcich buď databázu spektier, alebo neurónových sietí, alebo oboje.

To umožňuje užívateľovi pomocou klientského programu, natiahnúť si pre analýzu nejakého spektra konkrétny typ siete, vytrénovanej na určitý typ spektra.

Táto štruktúra zároveň umožňuje, aby sa na tréningu neurónových sietí mohlo podieľať nezávisle viacero ľudí súčasne.

## 6. Diskusia

Najväčším prínosom tejto diplomovej práce je pravdepodobne naštartovanie softvérového projektu *Neuroser*, ktorý sa snaží uviesť teoretické predpoklady uvedené v tejto práci do praxe.

Projekt je vyvíjaný ako Free software<sup>14</sup> pod licenciou *GNU GPL* na ktorom sa môže oficiálne podieľať neobmedzené množstvo ľudí. Momentálne neviem posúdiť nakoľko sa projektu budem venovať v budúcnosti, ale predpokladám, že potenciál projektu je zaujímavým lákadlom pre iných ľudí, či už z oblasti informatiky alebo infračervenej spektroskopie. Dúfam, že sa v budúcnosti nájdu ďalší študenti, ktorí budú môcť napríklad v rámci svojej diplomovej práce preskúmať detailnejšie otázky, ktoré vznikli a ostali nezodpovedané v tejto práci.

V rámci projektu *Neuroser* boli implementované dve diskutabilné myšlienky, ktoré možno nie sú úplne korektné z pohľadu teórie neurónových sietí, ale pri konkrétnej problematike vykazovali správne výsledky.

Prvou myšlienkou je implementácia vstupného vektora neurónovej siete s analógovými hodnotami namiesto binárnych. Binárny vstupný vektor perceptronu je rokmi overená idea, ktorá bola nasadená v mnohých implementáciách neurónových sietí a jej funkcionálnosť je preukázaná. Zámena perceptronu za vstupný vektor s analógovými hodnotami je nová myšlienka. Je možné, že nie som sám, kto niečo podobné vymyslel a implementoval v rámci neurónových sietí. Každopádne pri hľadaní obdobnej implementácie u iných som neuspel, no výsledky ktoré dáva táto implementácia v projekte *Neuroser* sú nadmieru uspokojivé a porovnateľné s klasickým perceptronovým vstupom.

---

<sup>14</sup> <http://www.fsf.org>

Druhá myšlienka je použitie neurónových subsietí pre identifikáciu jednotlivých pásov pri identifikácii špecifických väzieb a následné vyhodnotenie výsledkov týchto sietí prostredníctvom ďalšej neurónovej siete. Táto myšlienka nie je nová. Otázne však je či najvhodnejším vyhodnotením neurónových subsietí je ďalšia neurónová sieť, respektíve či by nebolo vhodnejšie použiť na ďalšie spracovanie klasické lineárne algoritmy. Použitie finálnej neurónovej siete v programe Neuroser vyplýva z toho, že táto možnosť je už automaticky implementovaná v samotnom programe, zatiaľ čo ďalší vyhodnocovací algoritmus by bolo potrebné doprogramovať.

Je možné, že použitie hybridného prístupu by mohlo byť zaujímavé najmä pre potreby koncových užívateľov, ktorí by sa už nemuseli venovať trénovaniu neurónovej siete, ale by len zozbierali výsledky vyhodnotené počítačom prostredníctvom už vytrénovanej neurónovej siete a nad ňou postaveným vyhodnocovacím lineárnym algoritmom.



## 7. Záver

Pri práci na projekte Neuroser som samozrejme hľadal podobné typy softvéru zaoberajúce sa problematikou analýzy infračerveného spektra. Je zrejmé, že podobnej problematike sa na svete venuje viacero ľudí<sup>15</sup>, ale zatiaľ neexistuje žiadny softvér, ktorý by túto problematiku dokonale zvládal či už s použitím neurónových sietí alebo iných technológií. Implementácia nasadenia neurónových sietí respektíve iných expertných systémov a výpočtovej techniky v oblasti infračervenej spektroskopie je stále predmetom skúmania.

Úspešné nasadenie projektu Neuroser pre analýzu infračervených spektier si momentálne vyžaduje najmä postupné tréovanie jednotlivých subsietí. Na to treba získať pre každý typ väzby dostatočne veľkú množinu digitalizovaných spektier. Táto práca už môže byť vykonávaná aj ľuďmi, ktorí nemajú až také znalosti v oblasti informatiky. Teda projekt je predbežne pripravený na to aby ho začali používať experti z oblasti infračervenej spektroskopie, bez požiadavky na špeciálne znalosti z oblasti neurónových sietí.

---

<sup>15</sup> <http://biospec.net/highs.htm>

## 8. Použitá literatura

- [1] Mirko Novák a Kolektiv (1998) Umělé neuronové sítě teorie a aplikace, C.H.Beck
- [2] Mirko Novák, Josef Faber, Olga Kufadaki (2002) Neurónové sítě a informační systémy živých organismů, Grada
- [3] M. Horák, D.Papoušek (1976) Infračervená spektra a struktura molekul, Academia Praha
- [4] Š. Kováč, D. Ilavský, J.Leško (1987) Spektrálne metody v organickej chémii a technológii, Alfa Bratislava
- [5] Mark Maslakowski (2001) Naučte se MySQL za 21 dní, Computer Press
- [6] Tom Archer (2002) Myslíme v jazyku C#, Grada
- [7] Dalibor Kačmář (2001) Programujeme .NET aplikace, Computer Press

### Internetové stránky:

<ftp://ftp.sas.com/pub/neural/FAQ.html>

<ftp://ftp.sas.com/pub/neural/FAQ2.html>

<http://www.imagination-engines.com/>

<http://www.mindfully.org/Technology/2004/Creativity-Machine-Thaler24jan04.htm>

<http://biospec.net/default.htm>

<http://www.estrellamountain.edu/faculty/farabee/biobk/biobooktoc.html>

[http://en.wikipedia.org/wiki/Infrared\\_spectroscopy](http://en.wikipedia.org/wiki/Infrared_spectroscopy)

[http://www.aist.go.jp/RIODB/SDBS/cgi-bin/cre\\_index.cgi](http://www.aist.go.jp/RIODB/SDBS/cgi-bin/cre_index.cgi)

<http://www.800mainstreet.com/irsp/eir.html>

<http://www.chem.ucla.edu/~webspectra/index.html>

<http://www.cem.msu.edu/~reusch/VirtualText/Spectrpy/InfraRed/infrared.htm>

<http://www.google.sk>