

УДК: 615.284:339.13.012.024

Багатошарова штучна нейронна мережа в прогнозуванні ємності фармацевтичного ринку

З. М. Мнушко, Ю. В. Попова, І. В. Тіманюк

Національний фармацевтичний університет, Харків, Україна

Резюме

В статті надано характеристику етапів створення, принципів функціонування і архітектури розробленої багатошарової штучної нейронної мережі, що адаптована до її використання для прогнозування ємності фармацевтичного ринку на прикладі антигельмінтних лікарських препаратів. Наведено результати прогнозу обсягів реалізації антигельмінтних лікарських засобів, які свідчать про досить високу їх точність, що є підставою для практичного використання методу нейромережевого прогнозування у фармації.

Ключові слова: прогнозування, ємність фармацевтичного ринку, антигельмінтні лікарські препарати, багатошарові штучні нейронні мережі.

Клин. информат. и Телемед. 2009. Т.5. Вып.6. с.69–74

Вступ

На сучасному етапі в маркетингових та економічних дослідженнях отримали розповсюдження нові математичні інструменти як, наприклад, штучні нейронні мережі, що відносяться до інтелектуальних методів прогнозування і мають на увазі такі способи рішення задач, основою яких є алгоритми і дії, пов'язані з інтелектуальною діяльністю людини. Як математичні моделі штучні нейронні мережі призначені для опису соціально-економічних явищ і процесів різноманітної природи. В останні декілька років на основі нейронних мереж розроблено багато програмних систем для використання в таких питаннях, як операції на товарному ринку, оцінка вірогідності банкрутства банку, контроль за інвестиціями, діагностування захворювань [1, 2].

Аналіз останніх досліджень та публікацій показав, що застосування нейронних мереж у фармації досить обмежено. Сучасні публікації присвячені розробці, адаптації та практичному використанню одношарових штучних нейронних мереж для прогнозування попиту на лікарські препарати [5, 6]. Проте досліджень, спрямованих на розробку з подальшим практичним використанням багатошарових штучних нейронних мереж для прогнозування ємності фармацевтичного ринку не проводилось.

Мета роботи.

Метою даної роботи є розробка, адаптування і обґрунтування напрямів практичного застосування багатошарової штучної нейронної мережі (ШНМ) для прогнозування ємності фармацевтичного ринку на прикладі антигельмінтних лікарських препаратів.

Об'єкт та методи дослідження

Розробка ШНМ є процесом, що здійснюється за визначеним алгоритмом, який складається з декількох етапів. Нами запропоновано алгоритм створення ШНМ для прогнозування обсягів продажу лікарських препаратів, що наведено на рис. 1.

Функціонування ШНМ пов'язано з проведенням великих обсягів обчислень із вхідною інформацією, що передбачає збір та отримання високоякісних даних про досліджуваний об'єкт за досить тривалий проміжок часу, що надасть можливість забезпечити достовірність розрахунків, підвищити їх точність і, як наслідок, отримати працюючу ШНМ, яка буде надавати високоточні результати прогнозів.

При аналізі вхідної інформації необхідно звернути увагу на характеристики динаміки реалізації лікарських препаратів впродовж досліджуваного періоду, а саме: визначення порожніх осередків та відновлення пропущених даних, якщо це є необхідним; встановлення мінімального та максимального діапазону обсягів продажу препаратів; виявлення сезонної компоненти або значних коливань вхідних даних.

Розробка нейронної мережі

Для розробки нейронної мережі отримана та проаналізована інформація щодо обсягів реалізації 18 АГЛП за період з січня 2004 р. по червень 2008 р. Динаміка обсягів продажу наведена на прикладі п'ятих препаратів антигельмінтної дії (рис. 2).

Як свідчать дані рисунка, обсяги продажу АГЛП коливаються в залежності від пори року, тобто динаміка обсягів реалізації містить сезонну компоненту, результатом якої є нелінійність отриманих даних.

Попередня обробка даних спрямована на забезпечення достовірності розрахунків і збільшення ефективності функціонування ШНМ, що розробляється. Масштабування даних (векторів входу) – це відображення проміжку значень їх координат, наприклад, $[X_{min}, X_{max}]$, де X_{min} (X_{max}) – найменша (найбільша) координата вхідних векторів на визначений діапазон значень. У процесі розробки ШНМ авторами відмасштабовані вхідні дані таким чином, що вони потрапляють у проміжок від 0 до 1 і зручні для подальшого перетворення.

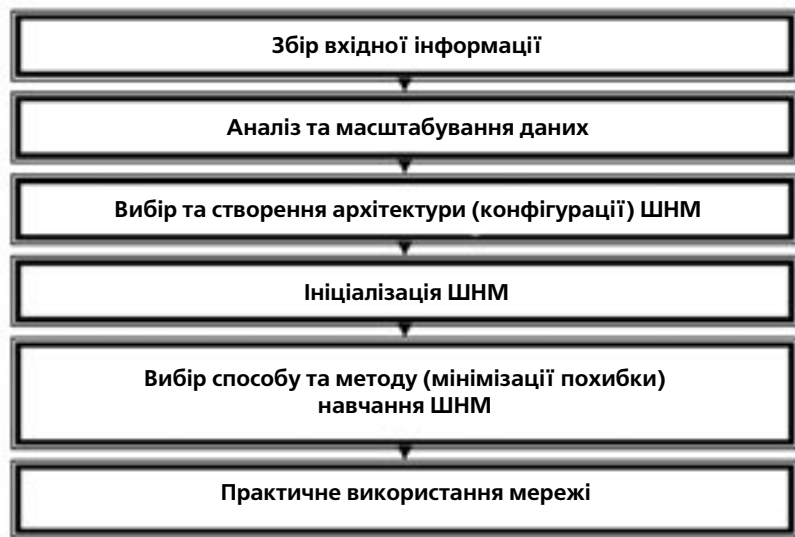


Рис. 1. Етапи створення штучної нейронної мережі.

Архітектура ШНМ

В залежності від обсягу та структури вхідних даних може бути обрана одношарова або багатшарова архітектура ШНМ. Під нейронним шаром із прямою передачею сигналу (з прямими зв'язками) розуміють декілька штучних нейронів (ШН) із загальним вектором входу, тобто коли сигнал, що відповідає кожній компоненті вхідного вектору, поступає на вхід всіх ШН. Вибір архітектури ШНМ залежить від типу задачі, яку повинна вирішити ШНМ, і в кожному окремому випадку розробляється експериментальним шляхом. Нейронний шар характеризується матрицею вадів W , зсувом b , операціями множення $W \times \bar{X}$, сумуванням і функцією активації f .

Кожен прихований шар (всі шари, окрім вихідного) нейронної мережі характеризують двома ваговими матрицями: матрицею вагів для сигналів, що поступають на вхід шару і матрицею вагів для сигналів, що виходять із шару. Коефіцієнти матриці вагів характеризують ступінь значущості елементів вхідного вектору у формуванні сумарного рівня сигналу.

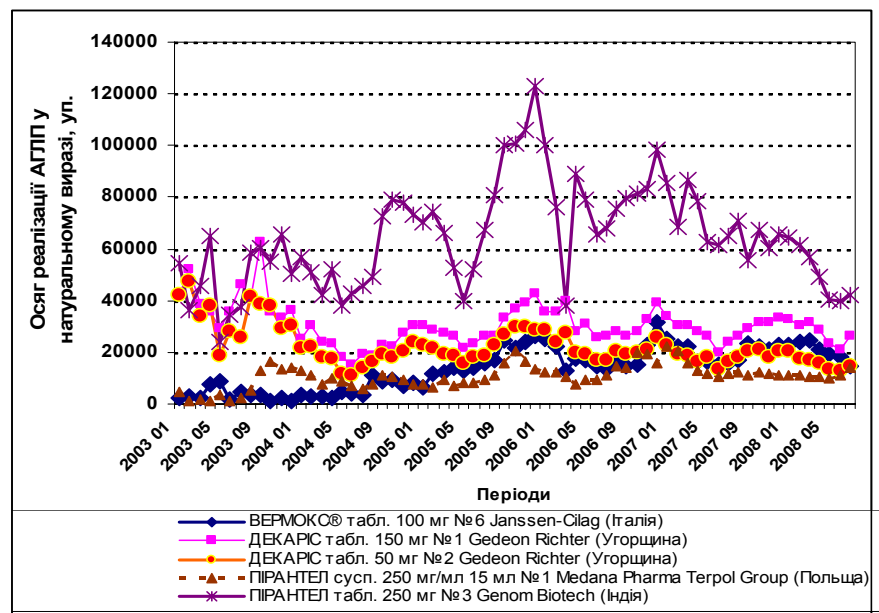


Рис. 2. Динаміка обсягу реалізації АГЛП у натуральному виразі.

Функції активації ШН

Під дією функції активації ШН перетворює зважену суму вхідних сигналів і виробляє вихідний сигнал. До функцій, що найчастіше використовуються в якості функцій активації, належать, наприклад, лінійна, позитивна лінійна (півлінійна), крокова, знакова, експоненціальна, логістична, гіперболічна, тангенціальна та інші. У більшості випадків застосовуються нелінійні функції активації, серед яких найбільш поширеною є сигмоїдальна (логістична). Її застосування зумов-

лено двома обставинами: по-перше, обмеженням величини сигналу після операцій помноження і сумування і, по-друге, простими співвідношеннями між функціями та їх першими похідними, що використовуються в методі навчання мереж. Функція активації встановлює допустимі межі значень вихідних даних. Інтервал допустимих значень вхідних сигналів повинен відповідати інтервалу зони чутливості функції активації нейрону. Логістична функція активації, що використана при створенні нейромережі, має наступний вид:

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (1)$$

і має дві горизонтальні асимптоти і одну точку перетину (рис. 3).

Під ініціалізацією нейронної мережі розуміють підбір початкових значень вагів (W) та зсувів (b). Наприклад, можна обрати нульові значення вагів та зсувів, випадкові ваги і зсуви, випадкові матриці вагів із нормованими стовбцями або рядками і інші.

Настройка нейромережі

Наступним етапом після розробки архітектури ШНМ та її ініціалізації є настройка нейромережі, тобто процес цілеспрямованої зміни початкових значень вагів та зсувів — параметрів мережі — таким чином, щоб вихідний вектор ШНМ давав рішення поставленої задачі. Розрізняють 3 способи навчання ШНМ: навчання з використанням учителя; навчання без використання учителя; змішане навчання. При створенні ШНМ авторами обраний спосіб навчання з використанням учителя.

При навчанні зазначеним способом кожен із циклів настройки (epoch) потребує подачі на вхід усіх елементів множини, що є навчальною; розрахунку вихідних значень мережі; порівняння значень виходу із цільовими значеннями; розрахунку значень критерію якості навчання. Дані, що використовуються для навчання ШНМ, розподіляються на дві категорії: перша група даних використовується для навчання мережі (множина, що є навчальною), а друга — для тестування ШНМ.

В якості методу навчання ШНМ обраний алгоритм зворотного розповсюдження похибки, який визначає два потоки в мережі: прямий потік від вхідного шару до вихідного і зворотній потік — від вихідного шару до вхідного. У цьому алгоритмі навчання відбувається шляхом коректування вагових коефіцієнтів до тих пір, поки похибка не стане досить малою для того, щоб задача вважалася вирішеною. Після завершення навчання значення вагових коефіцієнтів у мережі фіксуються, і мережа може бути застосована для вирішення необхідних задач в практичному прогнозуванні динаміки обсягів реалізації лікарських препаратів. При розробці ШНМ у якості множини, що є навчальною, нами використана інформація стосовно обсягів продажу АГЛП у період з 01.2004 р. по 06.2007 р. Для тестування нейромережі використані дані про обсяги продажу АГЛП у період з 07. 2007 р. по 06. 2008 р.

Результати дослідження

Враховуючи вищевикладене, нами розроблено архітектуру багатозарової ШНМ, проте, якщо зобразити всі складові-нейрони розробленої архітектури багатозарової ШНМ, то при великій

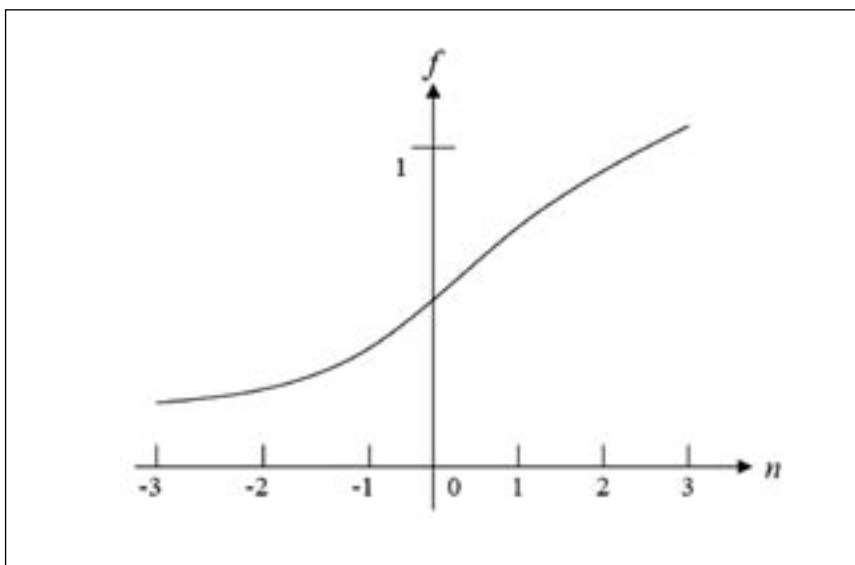


Рис. 3. Геометричне зображення логістичної функції активації.

кількості штучних нейронів розгорнута структурна схема виглядає досить громіздко. Тому її представлено більш укрупнено, що зображено на рис. 4.

Розроблена архітектура нейронної мережі складається з трьох шарів, тобто з двох прихованих шарів та вихідного шару. Вхід шару зображають у якості темної вертикальної риси, під якою вказують кількість елементів входу X . У нашому випадку кількість елементів входу X дорівнює 13. Перший вхід X_1 — номер місяця. Тобто, при прогнозуванні обсягів продажу АГЛП враховується фактор сезонності, який притаманний динаміці обсягу реалізації препаратів антигельмінтної дії. Інші 12 входів мережі представлені обсягами продажу АГЛП за рік ($X_2 - X_{13}$).

Наносять символи векторів \bar{X} , \bar{H} , \bar{G} , n^1 , n^2 , n^3 , b^1 , b^2 , b^3 , Y , позначення матриць вагових коефіцієнтів W^1 , W^2 , W^3 , де вказуються нижче їх розміри. Розмір першої матриці вагових коефіцієнтів дорівнює 15×13 , що свідчить про те, що перший нейронний шар складається з 15 штучних нейронів на вхід кожного з яких поступає 13 сигналів. Розмір другої матриці вагових коефіцієнтів дорівнює 10×15 , тобто другий нейронний шар складається з 10 нейронів, на вхід яких потрапляють 15 вхідних сигналів з першого нейронного шару. Третій нейронний шар є вихідним і представлений 1 штучним нейроном, тобто матриця вагових коефіцієнтів для нього виглядає 1×10 і на нього поступають 10 вхідних сигналів другого нейронного шару, що є вхідними для останнього шару. Вказують також константу 1, що розглядається як елемент входу.

Паралельно зображують стрілками зв'язки між входами кожного з нейронних шарів (\bar{X} , \bar{H} , \bar{G}) і матрицями вагових коефіцієнтів (W^1 , W^2 , W^3), між 1 і векторами зсувів (\bar{b}^1 , \bar{b}^2 , \bar{b}^3). Кругом зі знаком + усередині підкреслюють, що входами n^1 , n^2 , n^3 функцій активації F^1 , F^2 , F^3 є сума зсувів b^1 , b^2 , b^3 і помноження $W^1 \times \bar{X}$, $W^2 \times \bar{H}$, $W^3 \times \bar{G}$.

Ініціалізація розробленої багатозарової нейронної мережі відбувалась шляхом підстроювання вагових коефіцієнтів таким чином, щоб мережа характеризувалася мінімальною помилкою при здійсненні прогнозу обсягів продажу АГЛП. Матриці вагових коефіцієнтів наведено на рис. 5.

При функціонуванні кожен із нейронів розробленої багатозарової ШНМ отримує безліч вхідних сигналів одночасно. Кожен із входів має свій синаптичний зв'язок, що впливає на нього та є необхідним для функцій помноження і сумування, що відбуваються у суматорі. Вага є мірою значущості вхідних сигналів і моделює поведінку синапсів біологічних нейронів. Першою дією нейрону є обчислення зваженої суми всіх вхідних сигналів. Помноження векторів входів на відповідні їм вагові коефіцієнти є загальним вхідним сигналом. Функцією суматора є помноження векторів входів на відповідні їм вагові коефіцієнти і обчислення суми всіх помножень. Результат функції суматора оброблюється функцією активації і перетворюється у вихідний сигнал.

Створена мережа пройшла етап навчання, а для перевірки правильності роботи мережі одержаний прогноз обсягів продажу АГЛП за кожним із

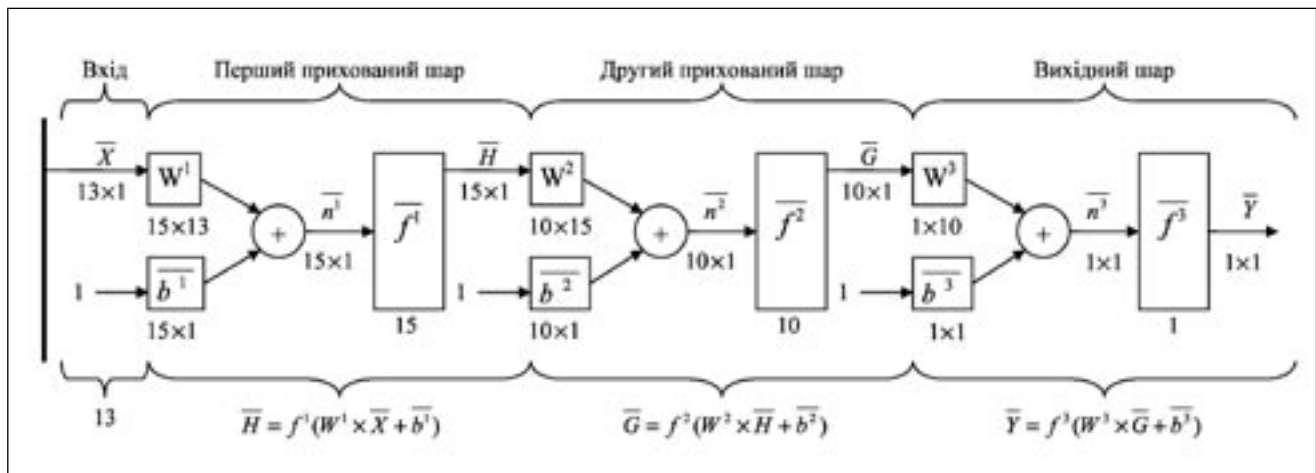


Рис. 4. Укрупнена трьохшарова нейронна мережа з прямою передачею сигналів.

Ваги входів першого прихованого шару:

0,586	0,344	1,412	0,077	-1,486	1,686	1,565	-2,181	-1,692	-0,070	-0,232	-1,643	0,114		-0,117
-0,152	0,181	-0,068	0,001	0,405	-0,303	-0,217	-0,136	0,277	0,123	0,273	0,752	0,571		0,131
-0,086	-0,177	-0,193	0,293	0,295	-0,136	0,370	-0,192	0,007	0,209	-0,023	0,593	0,502		0,112
-0,088	0,004	-0,185	0,087	0,335	-0,264	0,105	-0,203	0,134	0,175	0,059	0,658	0,753		0,121
0,093	0,885	0,433	-0,159	0,570	0,384	-0,559	0,443	0,573	0,399	0,674	1,061	1,860		0,512
-0,062	0,109	-0,112	-0,077	0,262	-0,256	-0,231	-0,111	0,186	0,120	0,115	0,695	1,075		0,132
-0,115	0,101	-0,104	0,145	0,241	-0,169	0,112	-0,272	0,060	0,199	0,095	0,622	0,601		0,117
0,221	0,129	0,080	0,011	0,211	0,065	-0,349	-0,150	-0,115	-0,092	0,012	0,289	1,432	=	0,134
-0,037	0,495	0,019	-0,393	0,251	0,021	-0,652	0,140	0,401	0,089	0,332	0,610	1,002		0,175
-0,084	-0,211	-0,213	0,264	0,348	-0,161	0,363	-0,215	0,042	0,189	-0,010	0,680	0,537		0,118
0,170	0,266	-0,004	-0,318	0,335	-0,110	-0,622	-0,125	0,175	-0,021	0,177	0,598	1,181		0,131
-0,151	0,222	-0,107	-0,012	0,310	-0,316	-0,124	-0,271	0,215	0,189	0,216	0,786	0,810		0,136
-0,602	-0,253	-0,648	-0,614	-1,061	-0,074	-0,169	1,536	0,433	-0,082	0,125	0,139	1,129		-0,011
-0,127	0,171	-0,123	-0,100	0,330	-0,336	-0,201	-0,190	0,231	0,206	0,287	0,760	0,849		0,135
-0,166	-0,513	-0,322	0,620	0,378	-0,009	0,830	0,017	0,001	0,320	-0,329	0,558	0,460		0,142

Ваги входів другого прихованого шару:

-1,079	-0,020	-0,132	-0,031	-0,365	-0,114	0,012	-0,307	-0,142	-0,118	-0,205	-0,078	-0,711	-0,111	-0,380		-0,252
0,154	0,088	0,112	0,037	0,110	0,055	0,047	-0,003	0,089	0,114	0,112	0,071	0,033	0,062	0,104		0,079
-0,117	-0,393	-0,139	-0,272	-0,935	-0,330	-0,249	-0,212	-0,644	-0,187	-0,437	-0,444	-0,870	-0,324	-0,200		-0,384
-0,379	-0,267	-0,133	-0,167	-0,726	-0,242	-0,178	-0,193	-0,482	-0,114	-0,313	-0,226	-0,773	-0,279	-0,179		-0,31
-0,814	-0,085	-0,105	-0,154	-0,331	-0,160	-0,068	-0,257	-0,225	-0,143	-0,277	-0,156	-0,613	-0,189	-0,383	=	-0,264
-0,148	-0,282	-0,190	-0,167	-0,699	-0,232	-0,269	-0,162	-0,506	-0,205	-0,339	-0,304	-0,623	-0,353	-0,193		-0,311
-0,667	-0,172	-0,107	-0,137	-0,601	-0,200	-0,125	-0,207	-0,312	-0,032	-0,329	-0,208	-0,855	-0,200	-0,146		-0,287
0,829	0,203	0,202	0,161	0,111	0,123	0,148	0,221	0,104	0,279	0,196	0,115	0,275	0,111	0,488		0,238
-0,767	-0,096	-0,097	-0,113	-0,492	-0,205	-0,086	-0,237	-0,216	-0,133	-0,307	-0,124	-0,695	-0,144	-0,278		-0,266
1,446	0,258	0,519	0,370	-0,161	0,255	0,246	0,447	-0,210	0,556	0,152	0,191	0,163	0,211	1,011		0,364

Ваги входів вихідного нейронного шару:

$$\left[-1.767 \ 0.631 \ -1.657 \ -1.513 \ -1.556 \ -1.282 \ -1.666 \ 1.943 \ -1.584 \ 2.903 \right] = \left| -5,548 \right|$$

Рис. 5. Матриці вагових коефіцієнтів для багатошарової ШНМ.

Табл. 1. Порівняльна характеристика фактичних обсягів продажу АГЛП із прогнозованими обсягами реалізації АГЛП за методом нейромережевого прогнозування.

№ з/п	Торгове найменування АГЛП	Фактичні обсяги продажу АГЛП у червні 2008р., уп.	Прогнозовані обсяги продажу АГЛП на червень 2008 р. за допомогою нейромережі, уп.	Похибка, %
1	Вермокс табл. 100 мг №6 Gedeon Richter (Угорщина)	31 968	31 981	0,04
2	Вермокс® табл. 100 мг №6 Janssen-Cilag (Італія)	17 999	17 785	-1,19
3	Гельмінтокс сусп. 50 мг/мл 15 мл №1 Innothera Chouzi (Франція)	1 066	1 031	-3,29
4	Гельмінтокс табл. 125 мг №6 Innothera Chouzi (Франція)	930	958	2,98
5	Гельмінтокс табл. 250 мг №3 Innothera Chouzi (Франція)	2 067	2 006	-2,95
6	Декаріс табл. 150 мг №1 Gedeon Richter (Угорщина)	21 227	21 416	0,89
7	Декаріс табл. 50 мг №2 Gedeon Richter (Угорщина)	13 032	13 149	0,90
8	Левамізол табл. 150 мг №1 ТОВ «ФК «Здоров'я» (Україна)	19 727	19 532	-0,99
9	Немоцид™ сусп. 10 мл №1 IPCA (Індія)	531	549	3,30
10	Немоцид™ табл. 250 мг №3 IPCA (Індія)	2 347	2 415	2,89
11	Немоцид™ табл. 250 мг №30 IPCA (Індія)	214	207	-3,30
12	Пижма квітки 75 г №1 ЗАТ «Ліктрави» (Україна)	844	871	3,21
13	Піперазину адипінат табл. 200 мг №10 ТОВ «Агрофарм» (Україна)	11 676	11 866	1,63
14	Піперазину адипінат табл. 500 мг №10 ВАТ «Луганський ХФЗ» (Україна)	6 084	5 960	-2,03
15	Піперазину адипінат табл. 200 мг №10 ЗАТ «Дарниця» (Україна)	11 002	11 104	0,93
16	Пірантел сусп. 250 мг/мл 15 мл №1 Medana Pharma Terpol Group (Польща)	11 214	11 014	-1,78
17	Пірантел сусп. 50 мг/мл 15 мл №1 Genom Biotech (Індія)	16 489	16 636	0,89
18	Пірантел табл. 250 мг №3 Genom Biotech (Індія)	39 990	39 618	-0,93

торгових найменувань лікарських препаратів (табл. 1).

Слід зазначити, що мінімальна похибка прогнозу складає 0,04%, максимальна – (-3,3%). Тобто середня помилка методу нейромережевого прогнозування з використанням трьохшарової штучної нейронної мережі у випадку здійснення прогнозу обсягів продажу АГЛП становить близько 2,0%.

Застосування нейромережевого прогнозування у фармації надає можливість скоротити час дослідження, значно полегшує роботу вчених, знижує або доводить до мінімального значення похибку прогнозу, що дозволяє отримувати точну та високоякісну оперативну інформацію, яка, в першу чергу, є основою для прийняття раціональних управлінських рішень.

Висновки

1. Охарактеризовано основні етапи створення штучних нейронних мереж і надано необхідні рекомендації щодо їх розробки для прогнозування ємності фармацевтичного ринку.

2. Розроблено архітектуру багатшарової штучної нейронної мережі

для прогнозування обсягів продажу лікарських засобів на прикладі антигельмінтних препаратів.

З. Наведено результати прогнозу обсягів реалізації лікарських препаратів антигельмінтної дії, які свідчать про досить високу їх точність, що є підставою для практичного використання методу нейромережевого прогнозування у фармації.

Література

1. Каллан Р. Основные концепции нейронных сетей.: Пер. с англ. – М.: Издательский дом «Вильямс», 2003. – 288с.
2. Кизим Н. А., Ястремская Е. Н., Сенчуков В. Ф. «Нейронные сети: теория и практика применения»: Монография. – Х.: ИД «ИНЖЕК», 2006. – 240с.
3. Кричевский М. Л. Интеллектуальные методы в менеджменте. – СПб.: Питер, 2005. – 304с.
4. Мнушко З. М. Визначення та аналіз споживчого потенціалу ринку антигельмінтних лікарських препаратів / З. М. Мнушко, Ю. В. Попова // Клінічна фармація. – 2008. – Т. 12. – №2. – с. 30 – 34.
5. Мнушко З. М. Можливість використання нейронних мереж в прогнозуванні доступності лікарських засобів / З. М. Мнушко, І. В. Тиманюк // Матеріали наук.-практ. Конф. до 10-річчя спеціальностей «Економіка підприємства» та «Маркетинг» / М-во охорони здоров'я України; М-во освіти та науки України, НФаУ. – Х., 2007. – С.327–328.
6. Тиманюк І. В. Науково-методичне обґрунтування маркетингової доступності протигрибкових лікарських препаратів: Автореферат дисс.....канд. фарм. наук. – Харків, 2008. – 22 с.

Multi-layer artificial neural network in predicting the capacity of the pharmaceutical market

Z. M. Mnushko, Yu. V. Popova,
I. V. Timanyuk
National pharmaceutical university,
Kharkov, Ukraine

Abstract

The article describes the stages of creation, the principles of operation and architecture of the developed multi-layer artificial neural network, adapted to its use to predict the capacity of the pharmaceutical market by the example of antigelminth drugs. The results of forecasting the supply of antigelminth drugs, which showed high accuracy, and this is the basis for the practical use of neural network like forecasting method in pharmacy.

Key words: forecasting, capacity of the pharmaceutical market, antigelminth drugs, multi-layer artificial neural networks.

Многослойная искусственная нейронная сеть в прогнозировании емкости фармацевтического рынка

З. Н. Мнушко, Ю. В. Попова,
И. В. Тиманюк
Национальный фармацевтический
университет, Харьков, Украина

Резюме

В статье охарактеризованы этапы создания, принципы функционирования и архитектура разработанной многослойной искусственной нейронной сети, адаптированной к ее использованию для прогнозирования емкости фармацевтического рынка на примере

антигельминтных лекарственных препаратов. Приведены результаты прогноза объемов реализации антигельминтных лекарственных средств, которые свидетельствуют о высокой их точности, что является основой для практического использования метода нейросетевого прогнозирования в фармации.

Ключевые слова: прогнозирование, емкость фармацевтического рынка, антигельминтные лекарственные препараты, многослойные искусственные нейронные сети.

Переписка

к.фарм.н. **И. В. Тиманюк**
тел.: +380 (57) 67-91-72
эл. почта: timanjuk@rambler.ru