

3. Golovko V., Vaitsekhovich L. Neural Network Techniques for Intrusion Detection // Proceedings of International Conference on Neural Networks and Artificial Intelligence (ICNNAI-2006). - 2006. - P. 65-69.
4. Головки В.А. Нейронные сети: обучение, организация и применение. Кн. 4: Учеб. пособие для вузов / Общая ред. А.И. Галушкина. – М.: ИПРЖР, 2001. – 256 с.
5. Drucker H., Schapire R. and Simard P. Improving performance in neural networks using a boosting algorithm // In S.J.Hanson, J.D.Cowan and C.L.Giles eds., Advanced in Neural Information Processing Systems 5, Denver, CO, Morgan Kaufmann, San Mateo, CA. - 1993. - P. 42-49.

НЕЙРОСЕТЕВАЯ АППРОКСИМАЦИЯ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ И АНАЛИЗЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ФЛУОРЕСЦЕНТНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Горошко В.В.

Белорусский государственный университет, г. Минск

Введение

Фотофизические процессы играют важную роль в природных и искусственных преобразователях энергии (хлоропласты растений, солнечные батареи). Часто фотофизические процессы в реальных системах весьма сложны и не могут быть адекватно описаны аналитически. В этом случае используют имитационное моделирование, позволяющее моделировать и анализировать поведение сколь угодно сложной системы при использовании соответствующих вычислительных ресурсов. Однако при применении на практике имитационного моделирования для анализа данных, исследователь сталкивается с рядом проблем, среди которых наиболее значимыми являются: (i) значительные временные затраты, так как имитационное моделирование, как правило, чрезвычайно громоздко в вычислительном плане; (ii) наличие не одного, а множества локальных минимумов ошибки (вследствие стохастичности имитационной модели), что делает необходимым многократный анализ данных с различными начальными приближениями неизвестных параметров.

Для решения этих проблем было предложено аппроксимировать имитационную модель некоторой гладкой зависимостью, которая бы отражала поведение, как экспериментальной системы, так и ее имитационной модели в зависимости от входных переменных и скрытых (искомых) параметров (Nazarov, 2004). В качестве аппроксиматора, способного заменить имитационную модель, было решено использовать искусственные нейронные сети (ИНС). Являясь универсальным аппроксиматором (Cybenko, 1989; Hornik, 1989), ИНС позволяют решать многие трудно формализуемые задачи.

Нами предложен метод замены имитационной модели системы искусственной нейронной сетью (ИНС) для ускорения алгоритмов оптимизации. Разработанный метод был применен для задачи моделирования флуоресценции молекулярной системы с двумя возбуждаемыми уровнями.

Теория

Основной проблемой анализа данных с использованием имитационной модели (simulation-based fitting) являются высокие временные затраты при подгонке параметров. Эта проблема может быть решена путем замены имитационной модели моделью "черного ящика" – нейронной сетью (Nazarov, 2004).

Большинство зависимостей в химии и физике могут быть представлены гладкими кривыми (если конкретная экспериментальная реализация такой зависимости будет носить стохастический характер – будем рассматривать средние значения). Это дает возможность аппроксимировать такие зависимости, а значит и имитационную модель, многослойным персептроном.

Перед началом работы необходимо, используя имитационную модель, создать обучающую выборку и обучить ИНС. Причём и генерацию обучающей выборки, и обучение приходится повторять при любом изменении модели, в том числе, при её коррекции либо усложнении. Корректность обученной сети можно проверить, создав некоторое контрольное множество.

Описание модели

Рассмотрим систему с двумя возбуждаемыми уровнями S_1^1 и S_1^2 . Примером такой системы может служить смесь флуорофоров, часть из которых находится в неполярном окружении (масло, липиды, и т.д.), а часть – в полярном (вода). Для простоты будем считать, что ширина уровней одинакова (следовательно – одинакова ширина спектров по частотам или волновым числам).

Времена жизни возбуждения обозначим τ_1 и τ_2 . Во временной области испускание каждого из уровней будем считать моноэкспоненциальным.

Общее спектрально-временное поведение флуоресценции системы может быть описано выражением (3.3).

$$F(t, \lambda) = \sum_{i=1}^2 a_i E_i(\lambda) D_i(t), \quad (1)$$

где a_i – относительная интенсивность эмиссии с уровня (квантовый выход).

Видно, что временная (D) и спектральная (E) части независимы и легко разделимы (для более сложных процессов, например, при переносе энергии $S_1^1 \rightarrow S_1^2$ это не выполняется).

Для простоты считаем, что спектральные уширения описываются функцией Гаусса. Тогда для спектральной составляющей, выраженной в длинах волн, получаем:

$$E_i(\lambda) = \exp \left[-\Delta\nu^{-2} \left(\frac{10^7}{\lambda} - \frac{10^7}{\lambda_i} \right)^2 \right], \quad (2)$$

где $\Delta\nu$ – ширина линий, $\lambda_{1,2}$ – положения максимумов эмиссии, выраженные в нм. Множитель 10^7 служит для перехода от длины волны в нм к волновому числу с см^{-1} . Временная составляющая выражается

$$D_i(t) = \exp(-t/\tau_i) \quad (3)$$

В результате получаем картину спектрально-временного поведения флуоресценции, представленную на рис. 1.

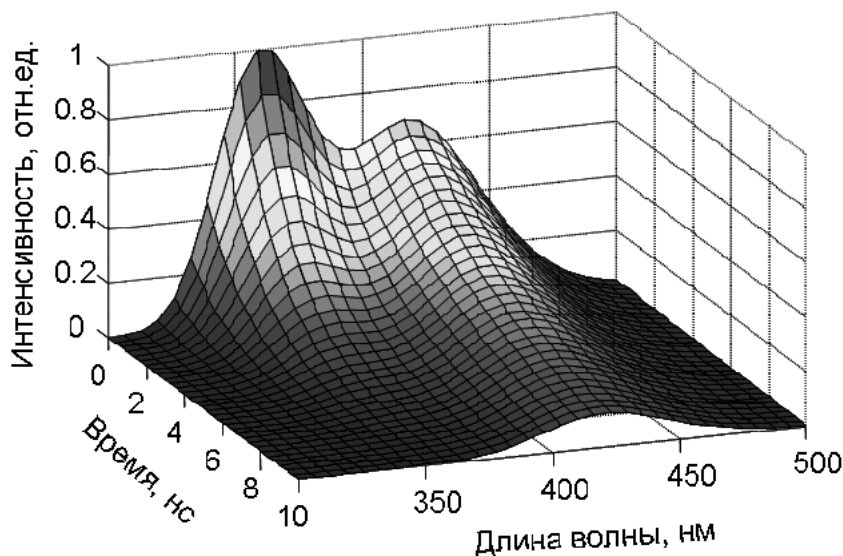


Рис. 1. Спектрально-временное поведение рассматриваемой системы. Считаем $a_1=0.6$, $a_2=0.4$

Для добавления физически оправданного шума следует учитывать природу эксперимента – для детектирования используют Streak-camera в режиме счета фотонов. Шум можно добавлять по следующей упрощенной формуле:

$$\tilde{F}(t, \lambda) = \left| F(t, \lambda) + \mathfrak{N}(0,1) \cdot \sqrt{\frac{F(t, \lambda) \cdot (a_1 \tau_1 + a_2 \tau_2)}{n}} \right|, \quad (4)$$

где \mathfrak{N} – нормально распределенная (Гауссова) случайная величина с математическим ожиданием 0 и дисперсией 1, n – число фотонов в одном временном канале (упрощенно). Итоговая флуоресценция является функцией t , λ , и a_i .

Результаты применения ИНС

Для замены имитационной модели было построено 2 реализации. Первой был трёх-слойный персептрон. Необходимое число нейронов в слоях устанавливалось экспериментальным путём. Сеть обучалась методом обратного распространения ошибки с использованием алгоритма оптимизации Левенберга-Марквардта (Hagan, 1989). А также модель аппроксимировалась РБФ-сетью. Необходимое число нейронов в слоях устанавливалось экспериментальным путём

Особенностью являлось то, что сеть обучалась на зашумленном множестве, что приближает эту модель к реальности. В итоге мы получали гладкую аппроксимацию. На рисунке 2 представлен результат расчета входных данных из этого множества зашумленной функцией. А на рисунке 3 – результат работы нейросетевого аппроксиматора. То есть можно сказать, что нейронная сеть сработала в качестве своеобразного фильтра – применение искусственной нейронной сети позволило получить гладкую незашумленную функцию.

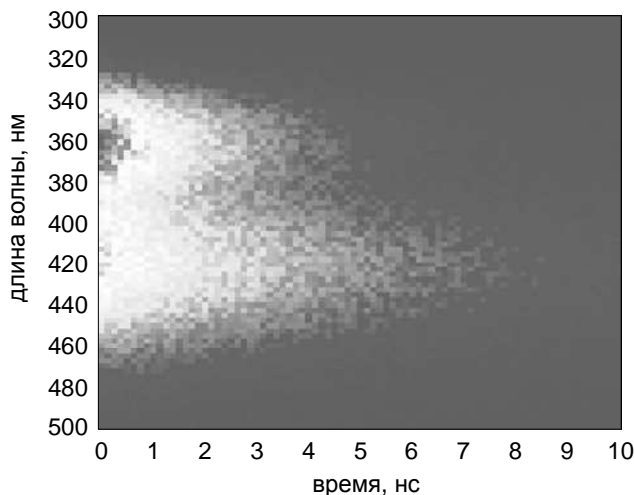


Рис. 2. Результат работы имитационной модели – спектр с разрешением по времени для двухуровневой системы (вид сверху, цвет характеризует интенсивность флуоресценции).

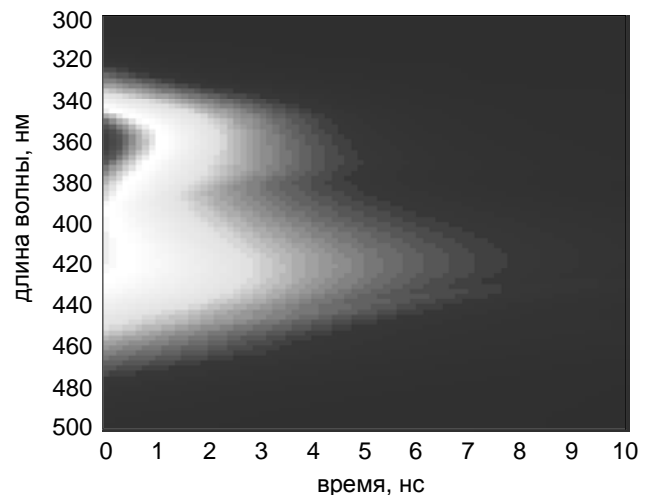


Рис. 3. Нейросетевая аппроксимация спектра (вид сверху, цвет характеризует интенсивность флуоресценции). Результат практически полностью аналогичен теоретической зависимости (рис.1).

Также отметим, что применение нейросетевого моделирования позволило ускорить получение результата в 10^4 - 10^5 .

К недостаткам метода можно отнести то, что количество варьируемых параметров ограничено. Это связано с необходимостью обучения сети на значительной репрезентативной выборке данных, растущей экспоненциально с увеличением количества изменяемых параметров модели. Также существует опасность переобучения.

Несмотря на это, метод может быть использован для быстрого получения начальных оценок при изучении функциональных зависимостей выходов систем от её входов.

Литература

1. Nazarov, P.V.; Apanasovich, V.V.; Lutkovski, V.M.; Yatskou, M.M.; Koehorst, R.B.M.; Hemminga, M.A. (2004) Artificial neural network modification of simulation-based fitting: application to a protein-lipid system. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, 44(2), 568-574.
2. Cybenko, G. (1989) Approximations by superpositions of sigmoidal functions. *Math. Contr. Signals Syst.*, 2, 303-314.
3. Hagan, M.T.; Menhaj, M. (1994) Training feedforward networks with the marquardt algorithm. *IEEE Trans. Neural Networks*, 5(6), 989-993.
4. Hornik, K.; Stinchcombe, M.; White, H. (1989) Multilayer feedforward networks are universal approximators. *Neural Networks*, 2(5), 359-366.

МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМЫ ПОДДЕРЖКИ ПРИНЯТИЯ РЕШЕНИЙ ДЛЯ БИОЛОГИЧЕСКОЙ ОЧИСТКИ СТОКОВ В АЭРОТЕНКАХ НА ОСНОВЕ МНОГОСЛОЙНЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

Давыденко А. А.

Брестский государственный технический университет, г. Брест

Ключевые слова: система поддержки принятия решений, биологическая очистка, нейронная сеть, алгоритм обратного распространения ошибки.

За последние годы в жизни общества роль и место персональных компьютеров и информационных технологий коренным образом изменились. Расширился перечень сфер общественной жизни, где применяются такие технологии, помимо персонального использования людьми, также осваиваемого быстрыми темпами.

Не исключением для использования передовых технологий стали и очистные сооружения, и, в частности, участок биологической очистки в аэротенках, как один из этапов компьютеризации производства. Более общей предпосылкой для этого является напряжённая экологическая обстановка в стране, а более локальной причиной явилась необходимость оперативного реагирования на изменения в работе системы очистки.

Процесс биологической очистки может быть описан как непосредственный контакт загрязнений с оптимальным количеством организмов активного ила в присутствии соответствующего количества растворенного кислорода в течение необходимого периода времени с последующим эффективным отделением активного ила от очищенной воды [1].

Аэротенк - это резервуар прямоугольного сечения, по которому протекает сточная жидкость, смешанная с активным илом. Воздух, вводимый с помощью пневматических или механических устройств, перемешивает обрабатываемую жидкость с активным илом и насыщает ее кислородом, необходимым для жизнедеятельности бактерий [1].

Главной целью системы является помощь диспетчеру при принятии решений в любых текущих и особенно в нестандартных ситуациях в реальном режиме времени для качественно-го контроля и управления технологическим процессом биологической очистки в аэротенках.

Задачами системы являются:

1. Оптимизация расхода воздуха.
2. Выравнивание концентрации растворённого кислорода по аэротенкам.
3. Минимизации расхода электроэнергии на подачу воздуха.

Для достижения поставленной цели и решения вышеперечисленных задач предполагается использование многослойной нейронной сети. Одной из самых главных причин, по которой была выбрана нейронная сеть – её весьма эффективная способность обучаться на примерах и «узнавать» в наборе противоречивой информации приметы ранее встреченных образов и ситуаций. Так же многослойная нейронная сеть способна осуществлять любое отображение входных векторов в выходные [2].