

Нейроинформатика, её приложения и анализ данных

XXVII Всероссийский семинар

**Красноярск
2019**

Министерство науки и высшего образования РФ
Сибирское отделение РАН
Российская ассоциация нейроинформатики
Институт вычислительного моделирования СО РАН

НЕЙРОИНФОРМАТИКА, ЕЁ ПРИЛОЖЕНИЯ И АНАЛИЗ ДАННЫХ

МАТЕРИАЛЫ
ДВАДЦАТЬ СЕДЬМОГО ВСЕРОССИЙСКОГО СЕМИНАРА
27 сентября – 29 сентября 2019 года

Красноярск 2019

УДК 007.52 (042.3)

Н 43

Нейроинформатика, её приложения и анализ данных: Материалы XXVII Всероссийского семинара, 27 сентября – 29 сентября 2019 года /

Под ред. А.Н.Горбаня, отв. за вып. М.Ю. Сенашова; – Красноярск:

Институт вычислительного моделирования СО РАН, 2019. – 153 с.

В сборнике представлены материалы XXVII Всероссийского семинара «Нейроинформатика, её приложения и анализ данных», проходившей в городе Красноярске 27 сентября – 29 сентября 2019 года.

Основной задачей конференции является всесторонний и высоко квалифицированный обмен новейшими достижениями в различных областях нейроинформатики (как теории нейросетей, так и в области различных практических приложений), а также в области нелинейного статистического анализа многомерных данных, обладающих нетривиальными структурами.

Большое внимание уделено анализу областей применимости и точности методов обработки многомерных данных, анализу устойчивости различных новых (нелинейных) методов кластеризации, разбор большого числа конкретных случаев, иллюстрирующих эти проблемы и достижения.

Материалы предназначены для научных работников, преподавателей, студентов и аспирантов соответствующих специальностей.

Редакционная коллегия:

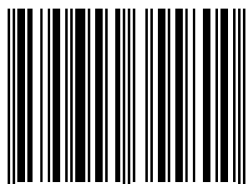
Горбань Александр Николаевич – ответственный редактор

Сенашова Мария Юрьевна – ответственный за выпуск

© ИВМ СО РАН, 2019

© Коллектив авторов, 2019

ISBN 978-5-6043558-0-0



9 785604 355800

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ АППРОКСИМАЦИИ НА СЕТЯХ РАДИАЛЬНЫХ БАЗИСНЫХ ФУНКЦИЙ, ОБУЧАЕМЫХ МЕТОДОМ ЛЕВЕНБЕРГА-МАРКВАРДА

М.М. Алкезуини, В.И. Горбаченко

Пензенский государственный университет,
факультет вычислительной техники,
кафедра "Компьютерные технологии", gorvi@mail.ru

Нейронные сети являются хорошими аппроксиматорами функций. В теории нейронных сетей известна универсальная теорема аппроксимации, или теорема Цыбенко [1]: нейронная сеть с одним скрытым слоем, содержащим нейроны с сигмоидальной функцией активации, и линейным выходным слоем может при достаточном количестве нейронов в скрытом слое аппроксимировать с любой степенью точности любую непрерывную функцию. В [2] показано, что при любой функции активации скрытых слоев и линейной функции активации в выходном слое многослойная сеть прямого распространения является универсальным аппроксиматором. Сети прямого распространения (многослойные персептроны) с одним скрытым слоем являются универсальными аппроксиматорами, но ширина (количество нейронов в слое) таких сетей является экспоненциально большой при аппроксимации функций многих переменных. Такие сети сложно, а зачастую практически невозможно обучать. Выход заключается в использовании сетей глубокой архитектуры, т.е. сетей большой глубины, содержащих большое число слоев ограниченной ширины. В [3] доказано, что сети с функцией активации ReLU [4] с шириной $n + 1$ достаточны для аппроксимации любой непрерывной выпуклой функции n -мерных входных переменных. Подходом, альтернативным использованию сетей прямого распространения, является использование сетей радиальных базисных функций (РБФ-сетей) [5]. Доказано [6], что РБФ-сеть является универсальным аппроксиматором. Наличие только двух слоев, из которых только один является нелинейным, сильно упрощает обучение РБФ-сетей и делает их популярным инструментом аппроксимации функций.

Для обучения РБФ-сетей обычно используется простейший метод градиентного спуска. В [7] предложено использовать для обучения РБФ-сетей современные градиентные методы первого порядка, популярные при обучении сетей глубокой архитектуры. В [8] при решении на РБФ-сетях уравнений в частных производных предложено использовать метод Левенберга-Марквардта. Целью настоящей работы является адаптация метода Левенберга-Марквардта для обучения РБФ-сетей при решении задач аппроксимации функций.

РБФ-сеть — это двухслойная сеть. Первый слой состоит из радиальных базисных функций (РБФ), второй является линейным сумматором [5]. Выход РБФ-сети описывается выражением

$$u(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m w_i \varphi_i(\mathbf{x}), \quad (1)$$

где $\mathbf{x}$ — входной вектор, w_i — вес i -й РБФ, $\varphi_i(\mathbf{x})$ — значение i -й РБФ для входного вектора $\mathbf{x}$, m — количество РБФ.

РБФ — это функция, значение которой в некоторой точке пространства зависит от расстояния между точкой и параметром РБФ, называемым центром. Известны различные РБФ [9]. Как и в [7–8] применим функцию Гаусса (Гауссиан)

$$\varphi_i(\mathbf{x}) = \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x}-\mathbf{c}_i\|^2}{2a_i^2}\right), \quad (2)$$

где $\mathbf{c}_i$ — вектор координат центра i -ой РБФ, a_i — ширина (параметр формы) РБФ, $\|\mathbf{x} - \mathbf{c}_i\|$ — евклидова норма (расстояние) между входным вектором и центром i -ой РБФ.

Рассмотрим задачу аппроксимации "рассеянных" (scattered) данных [10] для функции двух переменных (подход несложно обобщить на случай функций произвольного числа переменных). "Рассеянность" данных означает, что узлы интерполяции располагаются в области аппроксимации произвольным образом, а не на некоторой сетке. Методы аппроксимации при таком расположении узлов относятся к бессеточным (meshfree) методам [11]. Задачи аппроксимации "рассеянных" данных возникают во многих областях, например, в компьютерной графике при реконструкции рельефа местности. При решении задач аппроксимации входные векторы при обучении сети представляют собой координаты пробных точек, а целевые значения — значения функции в пробных точках. После обучения сеть при подаче координат произвольной точки области определения функции выдает значение функции в этой точке.

Наибольшее распространение для обучения РБФ-сетей получили градиентные методы. Среди градиентных методов выделяют три класса: методы нулевого порядка, использующие при оптимизации только значения оптимизируемой функции, но не значения ее производных, методы первого порядка, применяющие первые производные оптимизируемой функции (градиент функции), и методы второго порядка, применяющие вторые производные (матрицу Гессе или ее аппроксимацию). Как правило, для обучения РБФ-сетей применяют медленные методы первого порядка. Более быстрые методы второго порядка не получили распространения при обучении РБФ-сетей. Хотя наличие только одного слоя с нелинейными функциями и дифференцируемость большинства РБФ обеспечивают возможность применения методов оптимизации второго порядка при обучении РБФ-сетей. В [12] при решении задачи аппроксимации нелинейный слой обучался методом сопряженных градиентов, а веса — методом ортогональных наименьших квадратов. В [13–15] предложен и исследован быстрый способ обучения РБФ-сетей, основанный на методе доверительных областей. Но этот метод довольно сложен, так как требует на каждом шаге обучения решать задачу условной оптимизации. В [8] для обучения РБФ-сетей при решении краевых задач адаптирован метод Левенберга-Марквардта, который эквивалентен методу доверительных областей [16], но проще в реализации.

Метод Левенберга-Марквардта несложно адаптировать для решения задач аппроксимации функций на РБФ-сетях. Обучение РБФ-сети сводится к минимизации функционала ошибки, представляющий собой сумму квадратов ошибок в узлах интерполяции

$$I = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n (u(\mathbf{p}_j) - t_j)^2 = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n e_j^2, \quad (3)$$

где n — количество узлов интерполяции, $\mathbf{p}_j$ — координаты j -го узла интерполяции, t_j — значение функции в j -ом узле интерполяции (целевое значение), e_j — ошибка в j -ом узле интерполяции, множитель $1/2$ введен для упрощения вычислений.

Рассмотрим одновременную настройку весов сети и параметров Гауссиана на каждом шаге обучения РБФ-сети (возможна стратегия последовательной настройки [7]). Рассмотрим аппроксимацию функции двух переменных. Пусть вектор всех параметров сети имеет вид

$$\boldsymbol{\theta} = [w_1, w_2, \dots, w_m, c_{11}, c_{21}, \dots, c_{m1}, c_{12}, c_{22}, \dots, c_{m2}, a_1, a_2, \dots, a_m]^T, \quad (4)$$

где w_j — вес, c_{j1} и c_{j2} — координаты центра, a_j — ширина j -й РБФ ($j = 1, 2, \dots, m$).

На шаге (итерации) k обучения сети вектор (4) корректируется по формуле

$$\boldsymbol{\theta}^{(k)} = \boldsymbol{\theta}^{(k-1)} + \Delta\boldsymbol{\theta}^{(k)},$$

где $\Delta\boldsymbol{\theta}^{(k)}$ — вектор поправки, определяемый в методе Левенберга-Марквардта из решения системы линейных алгебраических уравнений

$$(\mathbf{J}_k^T \mathbf{J}_k + \mu_k \mathbf{E}) \Delta\boldsymbol{\theta}^{(k+1)} = -\mathbf{g}_k, \quad (5)$$

где $\mathbf{J}_k$ — матрица Якоби, вычисленная по значениям параметров сети на $(k-1)$ -й итерации, матрица $\mathbf{J}_k^T \mathbf{J}_k + \mu_k \mathbf{E}$ является аппроксимацией матрицы Гессе, $\mathbf{E}$ — единичная матрица, μ_k — параметр регуляризации, изменяющийся на каждом шаге обучения, $\mathbf{g} = \mathbf{J}^T \mathbf{e}$ — вектор градиента функционала (3) по вектору параметров $\boldsymbol{\theta}$, $\mathbf{e} = [e_1, e_2, \dots, e_n]^T$ — вектор ошибок в узлах интерполяции.

Матрица Якоби в блочной форме имеет вид $\mathbf{J} = [\mathbf{J}_w \mathbf{J}_{c_1} \mathbf{J}_{c_2} \mathbf{J}_a]$, где

$$\mathbf{J}_w = \begin{bmatrix} \frac{\partial e_1}{\partial w_1} & \dots & \frac{\partial e_1}{\partial w_m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial e_n}{\partial w_1} & \dots & \frac{\partial e_n}{\partial w_m} \end{bmatrix}, \mathbf{J}_{c_1} = \begin{bmatrix} \frac{\partial e_1}{\partial c_{11}} & \dots & \frac{\partial e_1}{\partial c_{m1}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial e_n}{\partial c_{11}} & \dots & \frac{\partial e_n}{\partial c_{m1}} \end{bmatrix}, \mathbf{J}_{c_2} = \begin{bmatrix} \frac{\partial e_1}{\partial c_{12}} & \dots & \frac{\partial e_1}{\partial c_{m2}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial e_n}{\partial c_{12}} & \dots & \frac{\partial e_n}{\partial c_{m2}} \end{bmatrix}, \mathbf{J}_a = \begin{bmatrix} \frac{\partial e_1}{\partial a_1} & \dots & \frac{\partial e_1}{\partial a_m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial e_n}{\partial a_1} & \dots & \frac{\partial e_n}{\partial a_m} \end{bmatrix}.$$

С учетом структуры РБФ-сети и дифференцируемости РБФ элементы матрицы $\mathbf{J}$ несложно вычислить аналитически. Так элементы матрицы $\mathbf{J}_w$ с учетом (1–3) имеют вид $\frac{\partial e_i}{\partial w_j} = \varphi_j(\mathbf{p}_i)$, где $\varphi_j(\mathbf{p}_i)$ — значение j -й РБФ в узле интерполяции $\mathbf{p}_i$. Элементы

матрицы $\mathbf{J}_{c_1}$ имеют вид $\frac{\partial e_i}{\partial c_{j1}} = w_j \varphi_j(\mathbf{p}_i) \frac{x_{i1} - c_{j1}}{a_j^3}$. Аналогично вычисляются элементы $\mathbf{J}_{c_2}$.

Элементы $\mathbf{J}_a$ вычисляются по формуле $\frac{\partial e_i}{\partial a_j} = w_j \varphi_j(\mathbf{p}_i) \frac{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{c}_j\|^2}{a_j^3}$.

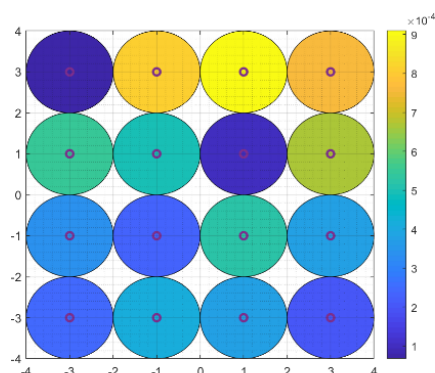
В процессе обучения параметр регуляризации μ должен уменьшаться по мере уменьшения функционала ошибки. Рекомендуется [17] начинать с некоторого значения μ_0 и использовать коэффициент $\nu > 1$. Текущее значение μ делится ν на, если функционал ошибки уменьшается, или умножается на ν , если функционал ошибки увеличивается.

Недостатком метода Левенберга-Марквардта является плохая обусловленность системы (5). Обусловленность зависит от начальных значений ширины РБФ и увеличивается с увеличением точности обучения сети. Для функции Гаусса с ростом ширины значения РБФ в матрице $\mathbf{J}_w$ стремятся к единице, а элементы матриц $\mathbf{J}_{c_1}$, $\mathbf{J}_{c_2}$ и $\mathbf{J}_a$ стремятся к нулю, обусловленность матрицы $\mathbf{J}$ ухудшается. Параметр регуляризации улучшает обусловленность. Но с уменьшением параметра μ при уменьшении погрешности обучения обусловленность ухудшается. Имеются проблемы с выбором параметра регуляризации: малое значение параметра приводит к низкой скорости сходимости, большое приводит к негладкому характеру уменьшения погрешности.

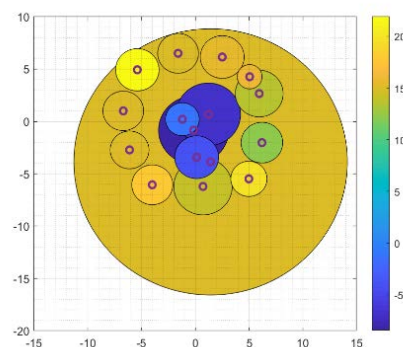
Экспериментальное исследование разработанных алгоритмов проводилось в системе MATLAB. В экспериментах использовался компьютер с процессором Intel Core i5-8500 частотой 3,0 GHz и оперативной памятью 16,0 GB. Сначала рассматривался пример аппроксимации несложной функции $z = x^2 + y^2$ в области $x = -3 \dots + 3$, $y = -3 \dots + 3$. Функция известна в 100 узлах интерполяции, расположенных случайным

образом. Количество РБФ равно 16. В качестве начальных значений весам присваивались случайные равномерно распределенные числа от 0 до 0,001 числа.

На рис. 1 показано расположение центров, условное обозначение ширины (в виде окружностей с радиусами, равными ширине) РБФ и значения весов с использованием цветовой палитры MATLAB перед и после обучения сети алгоритмом Левенберга-Марквардта. Результаты обучения сети при решении первой задачи с использованием алгоритмов первого порядка [7] и метода Левенберга-Марквардта показаны в таблице. Итерационный процесс обучения продолжался до достижения значения средней квадратической ошибки, равной 0,01. Так как число итераций и время решения зависят от случайных начальных значений весов, то для каждого метода проводилось 10 экспериментов. В таблице для каждого метода представлен средний результат по 10 экспериментам.



а) перед обучением сети



б) после обучения сети методом Левенберга-Марквардта

Рис. 1. Центры и ширина РБФ при решении первой задачи аппроксимации

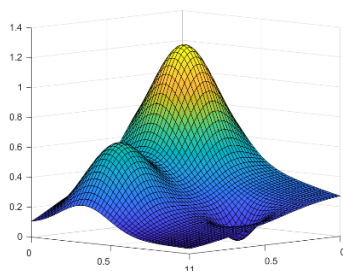
Таблица

Результаты экспериментов при решении задачи 1

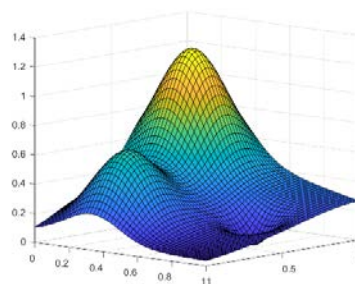
Алгоритм	Число итераций	Время решения, С
Градиентный спуск	60000	3500
Градиентный спуск с импульсом	1800	60
Метод Нестерова	350	20
Метод Левенберга-Марквардта	8	2

Метод Левенберга-Марквардта показал большое преимущество перед другими алгоритмами. Методы первого порядка практически не позволили обучать сеть до меньшей средней квадратической ошибки, в то время как метод Левенберга-Марквардта позволил в среднем за 20 итераций получить среднюю квадратическую погрешность, равную 10^{-6} . Недостатками метода Левенберга-Марквардта являются негладкий характер уменьшения погрешности по мере повышения точности обучения сети. Было проведено тестирование предложенных алгоритмов с использованием популярной в аппроксимации функции Франке [18] (рис. 2а)

$$f(x, e) = 0,75 \exp \left(-\frac{(9x-2)^2}{4} - \frac{(9y-2)^2}{4} \right) + 0,75 \exp \left(-\frac{(9x+1)^2}{4} - \frac{1}{4} \right) + \\ + 0,5 \exp \left(-\frac{(9x-7)^2}{4} - \frac{(9y-3)^2}{4} \right) - 0,2 \exp \left(-(9x-4)^2 - (9x-7)^2 \right).$$



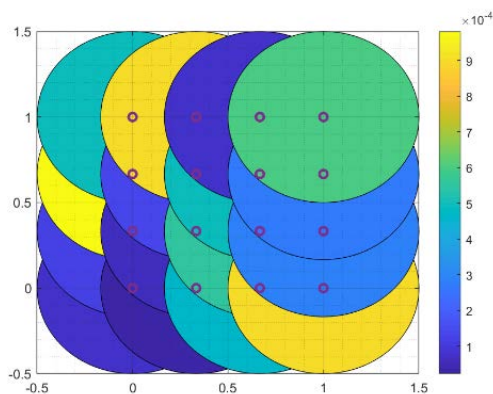
а) аналитическая функция



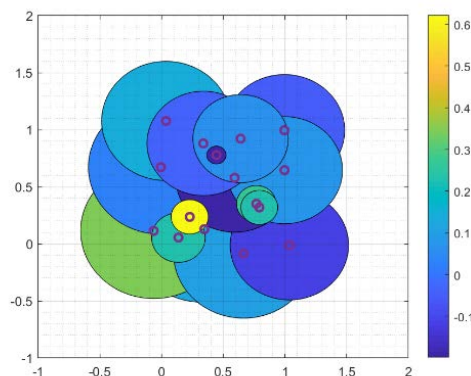
б) после обучения сети методом
Левенберга-Марквардта

Рис. 2. Функция Франке

Методы первого порядка при аппроксимации функции Франке не позволили получить среднюю квадратическую погрешность менее 10^{-1} . Метод Левенберга-Марквардта в среднем за 15 итераций позволил достичь средней квадратической погрешности, равной 10^{-6} . Аппроксимация проводилась в области $x = 0 \dots 1$, $y = 0 \dots 1$. Функция известна в 100 узлах интерполяции, расположенных случайным образом. Количество РБФ равно 16. Перед обучением сети центры РБФ располагались в узлах сетки (рис. 6а). В качестве начальных значений весам присваивались случайные равномерно распределенными от 0 до 0,001 числа. Начальная ширина всех РБФ равна 0,5. Лучшие результаты получены при $\mu = 2$ и $\nu = 1,5$. На рис. 3 показаны расположения центров, условное обозначение ширины РБФ и значения весов перед обучением и после обучения сети. Рис. 1 и 3 показывают радикальное изменение координат центров, ширины и весов в процессе обучения сети. Поэтому важно в процессе обучения РБФ-сетей настраивать не только веса, но и параметры РБФ.



а) перед обучением сети



б) после обучения сети методом
Левенберга-Марквардта

Рис. 3. Центры и ширина РБФ при аппроксимации функции Франке

Таким образом, метод Левенберга-Марквардта для обучения сетей радиальных базисных функций показал явные преимущества по сравнению с другими методами.

Список литературы

1. Cybenko G. Approximation by Superposition of a Sigmoidal Function // Mathematics of Control, Signals and Systems. — 1989. — Vol. 2. — P. 303–314.

2. Hornik K. Approximation capabilities of multilayer feedforward networks // Neural Networks. — 1999. — Vol. 4. — No 2. — P. 251–257.
3. Hanin B. Universal Function Approximation by Deep Neural Nets with Bounded Width and ReLU Activations. E-print: <https://arxiv.org/abs/1708.02691>
4. Гудфеллоу Я., Бенджио И., Курвиль А. Глубокое обучение. — М.: ДМК Пресс, 2018. — 652 с.
5. Осовский С. Нейронные сети для обработки информации. — М.: Горячая линия-Телеком, 2016. — 448 с.
6. Park J., Sandberg I.W. Universal Approximation Using Radial-Basis-Function Networks // Neural Computation. — 1991. — Vol. 3. — No. 2. — P. 246–257.
7. Алкезуини М.М., Горбаченко В.И. Ускоренные методы первого порядка обучения сетей радиальных базисных функций // Нейроинформатика, её приложения и анализ данных. Материалы XXV Всероссийского семинара. 2017 (Красноярск, 29.09.2017–01.10.2017). — Красноярск, Институт вычислительного моделирования СО РАН, 2017. — С. 3–7.
8. Алкезуини М.М., Горбаченко В.И. Решение краевых задач на сетях радиальных базисных функций // Нейроинформатика, её приложения и анализ данных. Материалы XXVI Всероссийского семинара. 2018 (Красноярск, 28.09.2018–30.09.2018). — Красноярск, Институт вычислительного моделирования СО РАН, 2018. — С. 9–15.
9. Buhmann M.D. Radial Basis Functions: Theory and Implementations. — Cambridge University Press, 2009. — 272 p.
10. Wendland H. Scattered Data Approximation. — Cambridge University Press, 2010. — 348 p.
11. Fasshauer G.F. Meshfree Approximation Methods with MATLAB. — World Scientific Publishing Company, 2007. — 520 p.
12. Zhang L., Li K., Wang W. An improved conjugate gradient algorithm for radial basis function (RBF) networks modelling // Proceedings of 2012 UKACC International Conference on Control. — P. 19–23.
13. Горбаченко В.И., Жуков М.В. Решение краевых задач математической физики с помощью сетей радиальных базисных функций // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 2017, том 57. — № 1. — С. 133–143.
14. Efficient solving of boundary value problems using radial basis function networks learned by trust region method / М.М. Algezweeni, V.I. Gorbachenko, M.V. Zhukov, M.S. Jaafar // Hindawi. International Journal of Mathematics and Mathematical Sciences. Article ID 9457578.
15. Елисов Л.Н., Горбаченко В.И., Жуков М.В. Обучение методом доверительных областей сетей радиальных базисных функций при решении краевых задач // Автоматика и телемеханика. — 2018. — № 9. — С. 95–105.
16. Marquardt D.W. An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters // Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics. — 1963, Vol. 11. — No 2. — P. 431–441.
17. Wild S.M. Regis R. G., Shoemaker C.A. ORBIT: optimization by radial basis function interpolation in trust-regions // SIAM Journal on Scientific Computing. — 2008. — Vol. 30. — No. 6. — P. 3197–3219.
18. Franke R. Scattered data Interpolation: Tests of some Methods// Mathematics of Computation. — 1982. — Vol. 38. — No 157. — P.181–200.

РЕКУРСИВНЫЕ И МНОГОСЛОЙНЫЕ НЕЙРОННЫЕ СЕТИ, ИГРАЮЩИЕ В ЧЕТ-НЕЧЕТ: РЕФЛЕКСИЯ ПРОТИВ РЕГРЕССИИ

С.И.Барцев^{1,2}

¹Институт биофизики СО РАН, bartsev@yandex.ru

²Сибирский федеральный университет,
Институт фундаментальной биологии и биотехнологии

Вопрос о природе сознания является одной из фундаментальных проблем науки и философии. В настоящее время когнитивная нейробиология активно развивается с целью выявления нейронных коррелятов, лежащих в основе когнитивных явлений. Долгосрочная цель таких исследований - установить, какие неврологические события соотносятся с теми или иными состояниями и содержанием сознания. Этот подход называется концепцией «нейронных коррелятов сознания» (НКС) [1, 2]. Ориентация концепции НКС на выявление минимальных нейронных структур, сопровождающих некоторый сознательный опыт, оправдывает отход от изучения сложных функций человеческого мозга [3-8] к исследованию отдельных явлений сознания, реализуемых простыми системами.

Теоретический аргумент в пользу возможности предельно простого формального описания явлений сознания привел В.Лефевр [9]. Он утверждает, что субъективность (сознание, разум) связана с наличием внутреннего представления о внешнем мире, включая образ самого субъекта. Лефевр назвал этот тип внутреннего представления «рефлексией». Используя простую математическую модель рефлексии, построенную на основе простых аксиом, Лефевр объяснил результаты ряда психологических экспериментов, которые ранее не были удовлетворительно объяснены. Этот опыт успешного моделирования эмпирически сложного свойства сознания, известного как рефлексия, с помощью простой математической модели приводит к предположению, что свойства сознания, включая рефлексия, могут изучаться с помощью простых естественных и искусственных нейронных сетей. Действительно, эксперименты с пчелами и шмелями, имеющими не более 1 миллиона нейронов [10-12], продемонстрировали, что эти организмы способны оперировать понятиями и абстракциями, а также манипулировать позициями восприятия, что является указанием на наличие рефлексии.

Чтобы раскрыть сущность рефлексивных процессов, имеет смысл исследовать такое поведение, которое содержит минимальный вклад других когнитивных функций, например логических рассуждений, распознавания образов, памяти и др. Рефлексивные игры почти полностью соответствуют этим требованиям [13-14], представляя собой особый вид игр с равновесием Нэша при смешанных стратегиях [14]. Эти игры не имеют фиксированных выигрышных стратегий, и каждый игрок, чтобы выиграть, должен постоянно менять свою стратегию в зависимости от стиля игры противника.

Искусственные нейросети (НС) являются очень удобными моделями игроков, поскольку свободны от усталости, эмоций, жадности и т.п. В принципе участвовать в игре могут как рекуррентные, так и многослойные НС. Если для рекуррентных НС обработка временных паттернов является естественной, то для многослойной НС временной паттерн ходов противника можно задавать с помощью сдвигового регистра, в котором очередной ход противника заносится в крайний разряд, а содержимое регистра сдвигается на одну позицию. Рефлексия невозможна без сопоставления имеющейся оперативной информации с поступающей, и именно это сопоставление может иметь место в рекуррентных НС. В случае же многослойной НС, мы имеем дело с нелинейной

регрессией – задача НС состоит в прогнозе очередного хода противника на основе выстроенной закономерности.

Запуская рефлексивную игру между рекуррентной и многослойной НС мы можем оценить эффективность рефлексии и регрессии при данном типе взаимодействия. Кроме того, можно ожидать, что в ходе рефлексивной игры новые игровые стратегии постоянно генерируются в зависимости от предыдущих ходов противника. Поскольку начальное состояние (весовая матрица) НС формируется генератором случайных чисел, а игровая динамика представляет собой взаимодействие двух стратегий, то можно ожидать, что число различных игровых паттернов игровой динамики велико. Эксперименты с НС могут ответить на вопрос о воспроизводимости игровой динамики, т.е. о существовании типичных игровых паттернов.

Чтобы получить ответ на эти вопросы, использовались рекуррентная полносвязная и многослойная НС с различным (небольшим, <20) числом нейронов и разной глубиной распространения ошибки для рекуррентной НС или длиной сдвигового регистра, отображающего предыдущие ходы противника, для трехслойной НС. НС играли друг с другом в «чет-нечет». Это игра для двоих. Каждый игрок скрытно выбирает «0» или «1», а затем его выбор представляется и сравнивается. Четная сумма означает, что один игрок получает одно очко, тогда как нечетная сумма означает, что очко получает другой игрок. «Чет-нечет» - это пример рефлексивной игры, в которой нет фиксированной выигрышной стратегии, а ничейная стратегия - случайный выбор. Если игроки не могут выбирать случайным образом или пытаться избежать ничейного результата, игра становится нетривиальной: тот, кто лучше предсказывает ходы своего противника, становится победителем.

Для вычислительных экспериментов использовалось открытое ПО «Lazarus» (<https://www.lazarus-ide.org/>). Функционирование нейронной сети определяется матрицей коэффициентов связи, которая описывает ее структуру, а в качестве переходной функции нейрона использована следующая функция [15]:

$$\alpha_i^{n+1} = \frac{\rho_i^n}{a + |\rho_i^n|}, \quad \rho_i^n = \sum_j w_{ij} \alpha_j^n + A_i^n$$

где α_i^n - выходной сигнал i -го нейрона в n -ый момент времени; w_{ij} – матрица весовых коэффициентов (для рекуррентной НС эта матрица единственная, а для слоистой сети их несколько); A_i^n – входной сигнал, поступающий на i -ый нейрон в n -ый момент времени.

Информация о выборе партнера подается через два входных нейроны рекуррентной НС. Соотношение уровней выходных нейронов каждой сети определяют выбор хода нейросетью - «0» или «1». Целевые функции для НС отличаются, поскольку одна НС выигрывает, когда её ход совпадает с ходом второй НС, а вторая НС выигрывает, когда делает ход, отличный от хода противника:

$$H_1(\alpha_i^n, n) = \frac{1}{2} \left[(\alpha_3^n - \text{move2})^2 + (\alpha_4^n - (1 - \text{move2}))^2 \right] \text{ и}$$

$$H_2(\alpha_i^n, n) = \frac{1}{2} \left[(\alpha_3^n - (1 - \text{move1}))^2 + (\alpha_4^n - \text{move1})^2 \right].$$

Модификация синапсов НС происходила после каждого шага по широко известному алгоритму обратного распространения ошибки, описание которого можно найти во множестве первоисточников и учебников по НС, например [16, 17].

На первый взгляд кривые счета в игре (паттерн игры) выглядят весьма разнообразно (рис.1) (отметим, что в начале каждой игры синапсы каждой НС случайны). Причем внешний вид паттернов игры рекуррентной и многослойной НС кажется более простым.

Перед тем, как сравнивать игровые способности рекуррентной и многослойной НС были исследованы зависимости игровых способностей рекуррентных НС от их параметров – числа нейронов и глубины распространения ошибки в прошлое (Рис.2). Контрольная НС имел 10 нейронов и глубину распространения ошибки – 5 тактов времени. Это сложилось исторически, именно такая минимальная нейросеть успешно играла против человека [18]. Каждая точка на графике есть результат усреднения от 1500 до 3000 игр (в зависимости от выраженности результата).

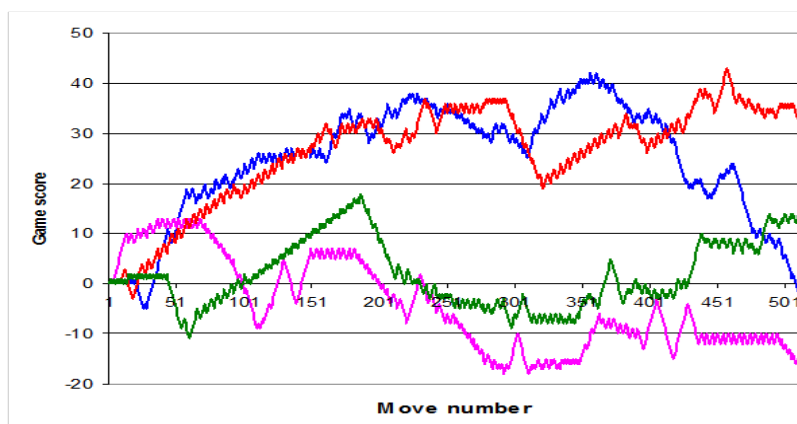


Рис. 1. Примеры игровых паттернов двух рекуррентных НС.

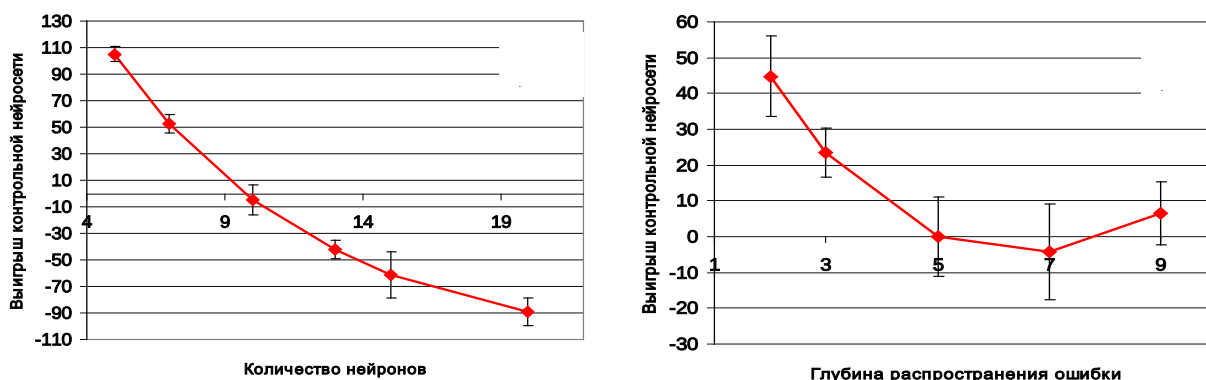


Рис.2. Зависимость эффективности игры НС от количества нейронов (А) и глубины распространения ошибки (Б).

В принципе, приведенные результаты не оказались неожиданными, поскольку, если мы связываем успешность в рефлексивной игре с наличием рефлексии соответствующего ранга (на единицу больше, чем у противника), то большее число нейронов позволяет организовать более качественную рефлексию – для рефлексии нужны мозги. А наличие оптимума глубины распространения ошибки можно объяснить, что для эффективной игры в ситуации, когда партнер может быстро менять свои стратегии, слишком глубокое проникновение в прошлое уменьшает возможность оперативного реагирования на изменения ситуации.

Результаты игры рекуррентной НС против многослойной НС (рефлексия против регрессии) оказались достаточно неожиданными (рис.3). Против рекуррентной сети исходно играла НС с тремя слоями (4:4:2) и длиной сдвигового регистра – 5. То есть формально количество нейронов этой НС совпадало с числом нейронов контрольной НС, а глубина памяти совпадала с глубиной распространения ошибки. Однако оказалось, что рекуррентная нейросеть одерживает победу даже имея минимальное число нейронов – 4 (два входных и два выходных нейрона) (рис.3А). Зависимость от глубины

распространения ошибки тоже достаточно необычна – рекуррентная НС проигрывает, только при глубине 1, т.е. когда меняются только синапсы выходных нейронов (рис.3Б). Оказалось, что многослойная НС может выиграть у четырех нейронной рекуррентной с глубиной распространения ошибки 2, если увеличить число нейронов, например, во втором слое (рис.3В).

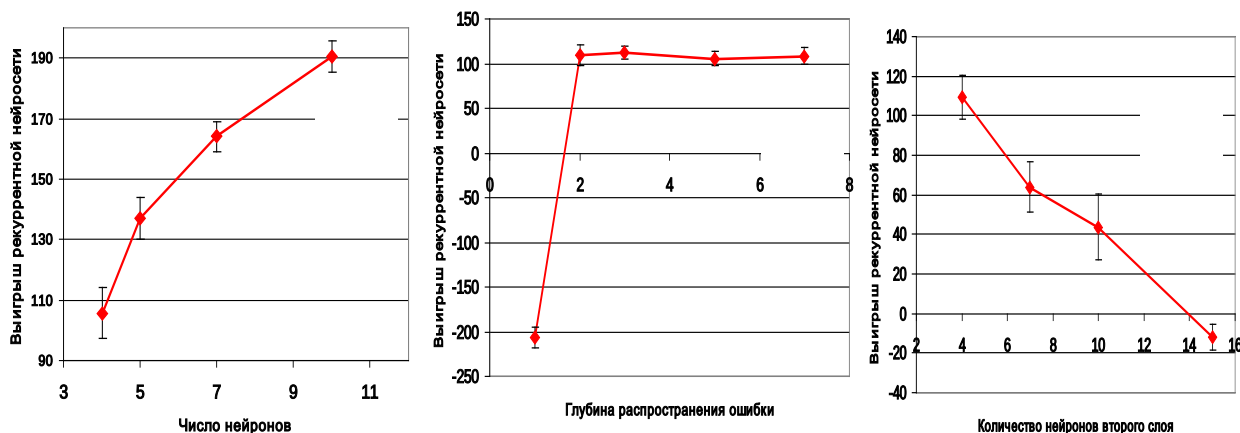


Рис. 3. Зависимости выигрыша контрольной НС от количества в ней нейронов (А), глубины распространения ошибки (Б) и в зависимости от количества нейронов во втором слое многослойной НС (рекуррентная НС имеет 4 нейрона и глубину распространения ошибки – 2).

Анализ повторяемости паттернов проводился для рекуррентных НС имеющих 10 нейронов и глубину распространения ошибки – 5. Многослойная НС имела структуру 5:5:2 и длину сдвигового регистра – 5. Для обработки паттернов игры использовалось быстрое преобразование Фурье пакета анализа MS Excel, а для кластерного анализа спектров Фурье использовалось открытое ПО Tanagra (<http://eric.univ-lyon2.fr/~ricco/tanagra/en/tanagra.html>).

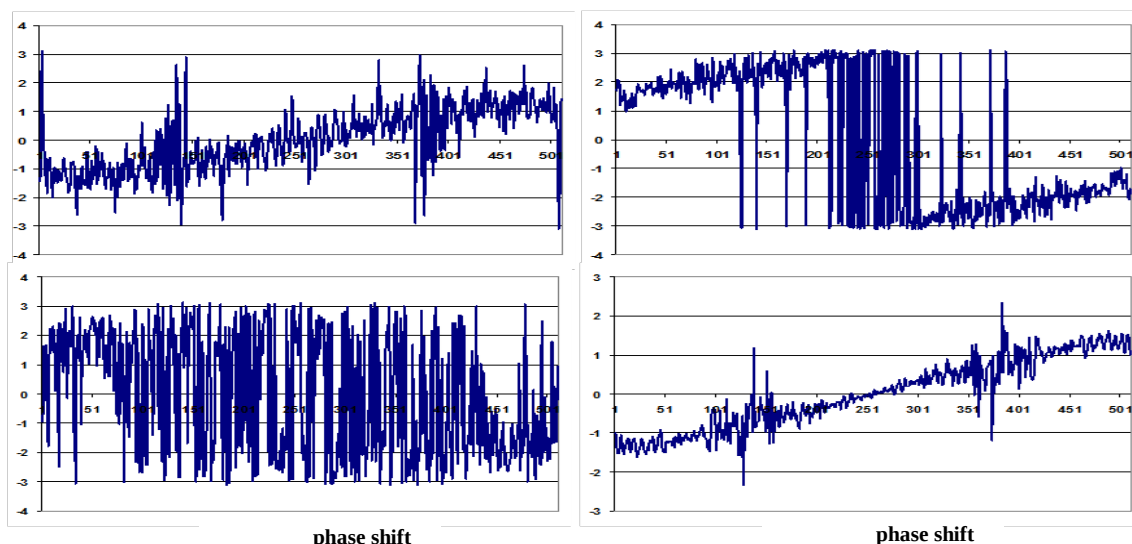


Рис. 4. Некоторые примеры фазовых изменений игровых паттернов, полученных с помощью преобразования Фурье.

Если амплитуда спектральных компонент на совокупности проведенных игр не показала никаких особенностей, то спектр фаз продемонстрировал достаточно большое

разнообразие (рис. 4). Возник естественный вопрос о степени разнообразия игровых паттернов, поскольку не было обнаружено полностью похожих реализаций игры.

Кластерный анализ (иерархическая кластеризация, критерий Уорда) неожиданно показал, наличие только двух очень разных закономерностей динамики игровых показателей, как для частот, так и для фаз преобразований Фурье (рис. 5). Это выглядит необычно, поскольку это существенное различие возникло на фоне непрерывного генерирования новых стратегий в зависимости от шагов партнера, которые, в свою очередь, зависят от предыстории игры, как и ожидалось, сложным образом.

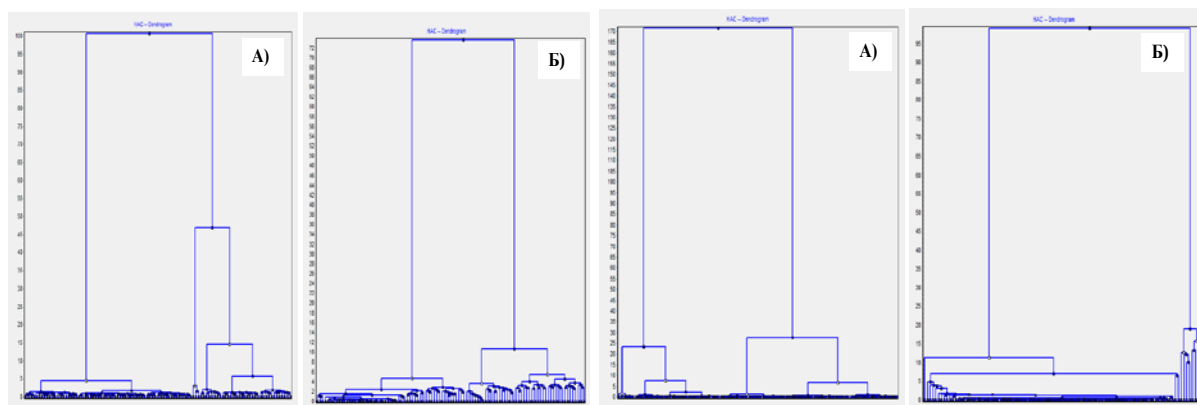


Рис. 5. Иерархическое дерево близости частотных (А) и фазовых (Б) спектров преобразования Фурье паттернов игры между рекуррентными (левая пара) и рекуррентной и многослойной (правая пара) НС.

Интересно, что подобное расщепление на две качественно отличные группы наблюдалось при массовых исследованиях принятия решений в некооперативных стратегических взаимодействиях [19]. Испытуемые играли в игру «камень-ножницы-бумага». Исследование выявило наличие двух типов стратегий у людей: 1) «выиграл – повторил, проиграл - изменил», характерная для большинства субъектов; 2) стратегия, основанная на знании вышеописанной стратегии «типичного человека». Вторая стратегия заключается в переходе на позицию противника, что, является рефлексивным действием, позволяющим игроку преобладать над первой стратегией.

В случае рефлексивных игр равновесие по Нэшу является случайным выбором одного из вариантов, но типичные нейронные сети после обучения являются детерминированными системами, и их реакция зависит только от входных данных и предыдущего опыта, и теоретически может быть предсказана. Однако появление рефлексии, как ожидается, делает поведение нейронной сети более изощренным, поскольку каждый из ее ходов зависит не только от текущего хода оппонента и предыдущего опыта, но также от внутреннего рефлексивного представления стратегии оппонента.

Было показано, что игровые паттерны предсказуемо очень изменчивы. Однако их бинарное разбиение на два кластера по разным признакам довольно удивительно. Наблюдаемое значительное различие в этих группах паттернов указывает на качественное различие в динамике игры, по-видимому, из-за качественно различных динамических паттернов нейронных возбуждений сетей. Игра рекуррентной НС против многослойной НС показала весьма малую долю проигрышей рекуррентной сети, при этом одна из ветвей иерархического дерева имеет примерно такое же наполнение.

Отсюда можно предположить, что причиной такой большой разницы в игровых моделях является наличие рефлексивного представления оппонента у одного или обоих игроков нейронной сети. Этот очень интересный вопрос требует дальнейшего изучения.

Список литературы

- [1] Crick F. Towards a neurobiological theory of consciousness / F.Crick, C.Koch // *Seminars in Neuroscience*. — 1990. — V.2. P. 263 – 275.
- [2] Crick F. Framework for consciousness / F.Crick, C.Koch // *Nature Neuroscience*. — 2003. — V.6. — № 2. P.119 – 126.
- [3] Dehaene S. Conscious and Nonconscious Processes: Distinct Forms of Evidence Accumulation? / S.Dehaene // *Seminaire Poincare*. — 2009. — V.XII. P.89 – 114.
- [4] Dehaene S. Towards a cognitive neuroscience of consciousness: basic evidence and a workspace framework / S.Dehaene, L.Naccache // *Cognition*. — 2001. — V.79. P.1 – 37.
- [5] Dehaene S. Experimental and Theoretical Approaches to Conscious Processing / S.Dehaene, J-P.Changeux // *Neuron*. — 2011. — V.70. P.200 – 227.
- [6] Kiefer M. Conceptual representations in mind and brain: Theoretical developments, current evidence and future directions / M.Kiefer, F.Pulvermüller // *Cortex*. — 2012. — V.48. P.805 – 25.
- [7] Mehta N. General and specific consciousness: a first-order representationalist approach / N.Mehta, G.Mashour // *Frontiers in Psychology: Consciousness Research*. — 2013. — V.4. P.407 – 410.
- [8] Tononi G. Integrated information theory: from consciousness to its physical substrate / G.Tononi, M.Boly, M.Massimini, C.Koch // *Nature Reviews: Neuroscience*. — 2016. — V.17. P.450 – 461.
- [9] Лефевр В. Рефлексия / В.Лефевр. — М.:Когито-Центр, Россия, 2003. — 496 с.
- [10] Alem S. Associative Mechanisms Allow for Social Learning and Cultural Transmission of String Pulling in an Insect / S.Alem, C.Perry, X.Zhu, O.J.Loukola, T.Ingraham, E.Søvik, et al // *PloS Biol*. — 2016. — V.14. — №10. 28 p.
- [11] Avargués-Weber A. Conceptual learning by miniature brains / A.Avargués-Weber, M.Giurfa // *Proc R Soc B*. — 2013. — V.280. 9 p.
- [12] Giurfa M. Behavioral and neural analysis of associative learning in the honeybee: a taste from the magic well / M.Giurfa // *J Comp Physiol A*. — 2007. — V. 193. — №8. P.801 – 824.
- [13] Camerer C. A Cognitive Hierarchy Model of Games / C.Camerer, T-H. Ho, J-K. Chong // *The Quarterly Journal of Economics*. — 2004. — V.119. — №3. P. 861 – 898.
- [14] Новиков Д.А. Рефлексия и управление: математические модели / Д.А.Новиков, А.Г.Чхартишвили. — М.: Физматлит, 2013. — 412 с.
- [15] Барцев С.И. Эвристические нейросетевые модели в биофизике: приложение к проблеме структурно-функционального соответствия / С.И.Барцев, О.Д.Барцева. — Красноярск: Сибирский федеральный ун-т, 2010.— 115 с.
- [16] Хайкин С. Нейронные сети: полный курс, 2-е издание. / С.Хайкин. — М. Издательский дом "Вильямс", 2006. — 1104 с. (пер. с англ.).
- [17] Rumelhart D. Learning representations by error back-propagating errors / D.Rumelhart, G.Hinton // *Nature*. — 1988. — V.323. P.533 – 536.
- [18] Bartsev S.I. Self-learning neural networks playing "Two coins" / S.I.Bartsev, V.A.Okhonin // *In Proc. of International Workshop "Neurocomputers and attention II"*. — Manchester Univ.Press. — 1991. — P.453 – 458.
- [19] Wang Z. Social cycling and conditional responses in the Rock-Paper-Scissors game / Z.Wang, B.Xu, H-J.Zhou // *Scientific reports*. — 2014. — V.4. — №5830. 7 p.

ЭКСТРЕМАЛЬНАЯ И ДИВЕРГЕНТНАЯ КОМПОНЕНТЫ ЭВОЛЮЦИИ ФОРМИРУЮТ ЛАНДШАФТ ПРИСПОСОБЛЕННОСТИ ЭВРИСТИЧЕСКИХ НЕЙРОСЕТЕВЫХ ОБЪЕКТОВ

С.И. Барцев^{1,2}, П.М. Батурина^{1,2}

¹Сибирский федеральный университет,
Институт фундаментальной биологии и биотехнологии, каф. биофизики

²Институт биофизики СО РАН
bartsev@yandex.ru, lina_bat@mail.ru

Вопрос о детерминированности эволюции в настоящее время является нерешенным. Неизвестно также, какую долю вносит в этот процесс случайность. Что было бы, если бы мы повернули вспять процесс развития и изменения жизненных форм, и запустили заново «пленку жизни»? Насколько сильно отличался бы результат от того, что мы имеем сейчас? Возможно ли предсказать, как будут развиваться события и с какой вероятностью? Поиск ответов на эти вопросы привычными для экспериментальной биологии способами является затруднительным, так как биологические системы уникальны, чрезвычайно сложны, а исследователям доступны только существующие формы, являющиеся лишь небольшой частью всех потенциально возможных.

Возможность ответа на этот вопрос видится в применении эвристического метода, который заключается в построении абстрактных моделей для поиска удобных понятий и общих принципов, о которых фон Нейман писал следующее: «...можно надеяться получить ответ или хотя бы попытаться исследовать такие вопросы: по каким принципам составляются из этих элементарных частей функционирующие организмы, каковы черты таких организмов и каковы их основные количественные характеристики...» [1] Результаты, полученные с помощью таких моделей, могут быть экстраполированы на реальные системы с учетом того, насколько они соответствуют описанию модели.

Эволюцию формально можно определить как оптимизацию целевой функции $H(\alpha_j)$ с учетом ограничений Φ_i :

$$W = H(\{\alpha_j\}, A_k) + \sum_i \mu_i \Phi_i(\{\alpha_j\}, A_k, \{\beta_m\}) \quad (1)$$

где α_j – фенотип; A_k – внешние воздействия; β_m – структурные параметры, влияющие на фенотип; μ_i – неопределенные множители Лагранжа; Φ_i – функции, описывающие структурные ограничения.

Такое определение делает равноправными любые системы, соответствующие данному определению, а значит, оно дает право на установление между этими системами отношения оригинал-модель. Исходя из того, два процесса рассматриваются как эквивалентные. Первый из них – эволюция биологических систем – сложный процесс, зависящий от многих факторов, но при этом очень важный для практических задач и требующий моделирования [2]. Биологическая эволюция – это стремление биологической системы достигнуть наилучшей приспособленности в существующих условиях. Второй – процесс обучения сети формальных нейронов, в ходе которого достигается минимальное значение ошибки функционирования. Феноменологическая эквивалентность этих процессов подкрепляется теоремой о бесплатных завтраках, гласящей, что эффективности любых двух алгоритмов поиска экстремума в среднем (по всем возможным целевым функциям) идентичны, и любая система, подчиняющаяся некоторому принципу оптимальности, может служить моделью биологической

эволюции [3]. Для нейронной сети структура известна, можно задать множества вариантов функций, легко создаются ансамбли для сбора статистики – все это делает искусственные нейронные сети удобным инструментом для моделирования.

Метафорой биологической эволюции является ландшафт приспособленности – отображение генотипа в фенотип [4]. Ландшафты реальных систем очень сложны для построения, для визуализации и для интерпретации, так как зависят от многого числа переменных. В настоящий момент для изучения процесса эволюции реальных систем работают с небольшим числом варьируемых участков генотипов, используя методы молекулярной биологии: сайт-направленный мутагенез, секвенирование и другие [5,6]. Общим моментом этих работ является тот факт, что пространство идеально функционирующих структур является достаточно вырожденным [7]. Вырожденным также получается набор структур, полученных в процессе обучения нейронных сетей, функционирующих одинаково хорошо. Важно то, что были найдены инвариантные преобразования, с помощью которых можно осуществить переход от одной нейросетевой структуре к другой [8]. Эти инварианты приводят к существованию множества эквивалентных исходов, а также к множеству экстремальных траекторий, приводящих к этим исходам.

Экстремальную компоненту формирования траекторий можно описать по аналогии экстремальным принципом в физике, который выражен в понятии действия:

$$S(q_i) = \int_{t_1}^{t_2} L(q_i, \dot{q}_i, t) dt \quad (2)$$

где q_i – обобщенные координаты.

Механическая система движется таким образом, что действие принимает экстремальное значение. Для того, чтобы функционал принимал экстремальное значение необходимо выполнение уравнения Лагранжа-Эйлера:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \quad (3)$$

Если модификация структуры эволюционирующей системы происходит по градиенту функции приспособленности $\Phi(q_i)$,

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial \Phi}{\partial q_i} \quad (4)$$

то функция Лагранжа, удовлетворяющая уравнению Лагранжа-Эйлера (3), имеющего вид уравнения движения по градиенту (4), будет иметь вид (5).

$$L(q_i, \dot{q}_i, t) = \frac{1}{2} q_i \dot{q}_i - \Phi(q_i) \equiv \frac{1}{4} (q_i^2)' - \Phi(q_i) \quad (5)$$

Физическую систему малые возмущения незначительно отклоняют от экстремальной траектории [9]. Однако это не наблюдается у систем с избытком сложности структуры над сложностью функции, таких, как биологические системы [10] или модельные нейронные сети [11]. Эволюционные траектории таких систем формируют ландшафт приспособленности.

Оценкой характера ландшафтов модельной нейронной в области стартовой точки является параметр близости траекторий друг к другу, который выражается через средний угол отклонения линейно аппроксимированных траекторий от усредненной линейно аппроксимированной траектории всего пучка (Рис.1А). Оценки были получены для разного числа пройденных тактов, условно обозначенных как A_j (Рис.1Б), а также для

различных положений на исходной материнской траектории, условно обозначенных G_i (Рис.1В)

Для исходной трехнейронной материнской сети, обученной функции $F_1 = [0.0.2.0.5.0.3]$, были получены усредненные значения параметра близости для 500 траекторий, представленные на Рис.2А в виде $G_i = \bar{\varphi}(A_j)$. Полученные точки были аппроксимированы степенной функцией $y = a/\sqrt{x}$ и представлены в виде $A_j = \varphi(G_i)$ для получения приближенного представления о поведении пучков на ландшафте. Полученные графики говорят о неоднородности ландшафта на протяжении всего пути обучения от исходной материнской сети до сети с идеальным функционированием. На Рис. 2Б в точках с абсциссой G_6 наблюдается некоторое ландшафтное ограничение.

Также для обученных до конца сетей были построены и интерполированы функцией двумерного нормального распределения срезы ландшафта по данным 10^3 траекторий обучения, где каждое значение ошибки H в точке рассчитывается по формуле (6).

$$H(x, y) = \frac{\sum_{i,j} H_{ij}(x, y) P_{ij}(x, y)}{\sum_{i,j} P_{ij}} \quad (6)$$

где P_{ij} – функция плотности вероятности двумерного нормального распределения (7).

$$P_{ij}(x, y) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}((x_i-x)^2 + (y_j-y)^2)} \quad (7)$$

Срезы осуществлялись по наиболее значимым синапсам, полученным методом главных компонент. На Рис.3 представлены наиболее часто встречающиеся формы срезов – А) однопиковый, Б) многопиковый и В) «склон». Исходный неинтерполированный срез на самом деле не представляет собой поверхность, а скорее заполняет некоторый объемный слой в пространстве ошибки, а траектории могут проходить немного выше или ниже полученной в результате интерполяции поверхности.

Результаты эксперимента с определением близости траекторий вблизи стартовой точки показали, что степень близости траекторий в пучках не коррелирует с величиной ошибки H , соответствующей этой точке, а связано с её исходной структурой, которая была сформирована случайно, но была отобрана в процессе обучения в соответствии с оптимальным принципом.

Интерполированные срезы иллюстрируют неоднородность ландшафта, его изрезанность – доступные для эволюции достаточно узкие участки отделены друг от друга обширными недоступными ей областями. Наряду с экстремальным спуском к минимальному значению ошибки H , наблюдается радиальное удаление траекторий от точки генерации в плоскости синапсов, что является проявлением инвариантных вариаций. На рассмотренных срезах видно, что не все области ландшафтного пространства в принципе могут быть доступны эволюции: форма «склон» получается из-за того, что значения одного из синапсов, соответствующих запрашиваемой функции, лимитируются и принадлежат полуинтервалу.

Наличие инвариантных вариаций приводит к постоянному расхождению пучков траекторий. Это указывает на то, что модельная воспроизведенная «пленка жизни» не пошла бы такому же историческому пути изменения структуры, причем, чем дальше во времени назад будет «отмотана пленка», тем дальше друг от друга будут находиться структуры на ландшафте. Ландшафт наряду с глобальным минимумом может иметь локальные минимумы, и неизвестно, в какую область может привести повторный

«запуск пленки». Застревание реальной системы в локальном минимуме в ожидании случайного выхода из него может привести к её гибели. Поэтому одной из задач, которую можно поставить эволюционирующей системе – это эффективное распознавание области локального минимума и своевременный и эффективный уход в сторону от этой области, который мог бы быть реализован в том числе с помощью инвариантного преобразования. Такие преобразования были найдены для нейронных модельных объектов, поэтому возникает вопрос о существовании подобных преобразований для структур реальных систем, возможных их проявлениях на разных уровнях организации.

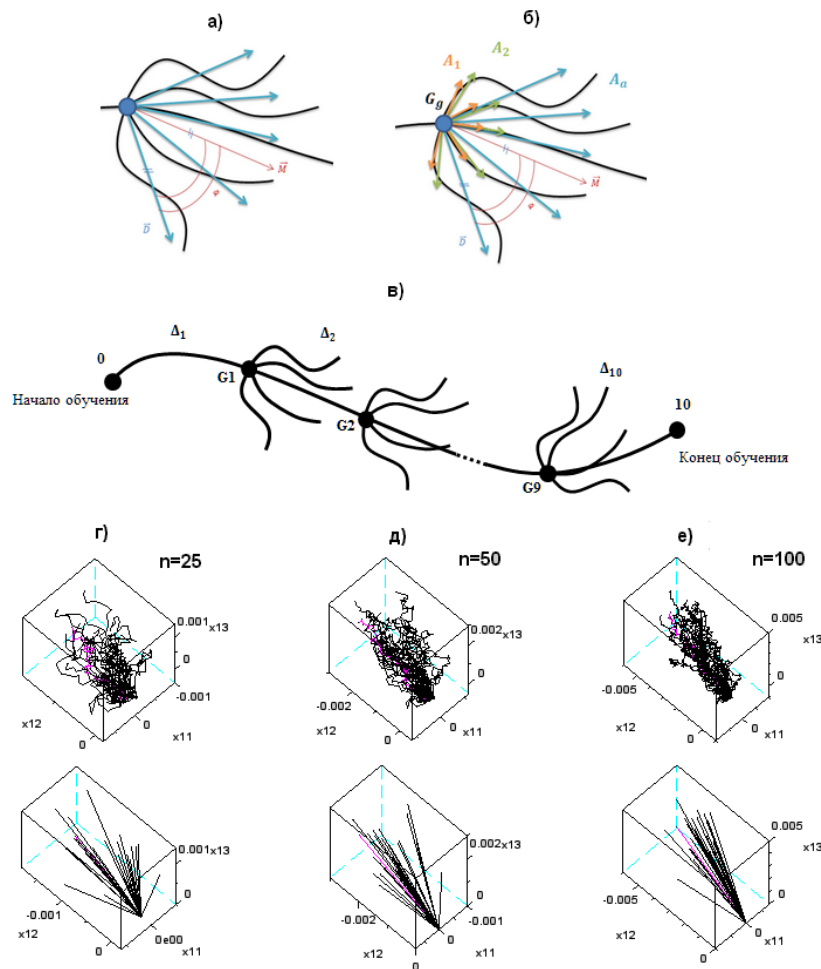


Рис. 1. Линейная аппроксимация участков эволюционных траекторий вблизи стартовой точки: А) схематичное изображение параметра близости траекторий через угол отклонения φ от вектора усреднения пучка траекторий $\vec{M}$; Б) схематичное изображение пучков векторов A_a , полученных линейной аппроксимацией, для разного числа пройденных тактов от стартовой точки; В) схематичное изображение пучков, полученных из разных точек на кривой обучения, соответствующих различной величине ошибки функционирования H ; Г-Е) проекции траекторий на трехмерное пространство синапсов и изображение пучков векторов, полученных линейной аппроксимацией для $n = \{25, 50, 100\}$ тактов.

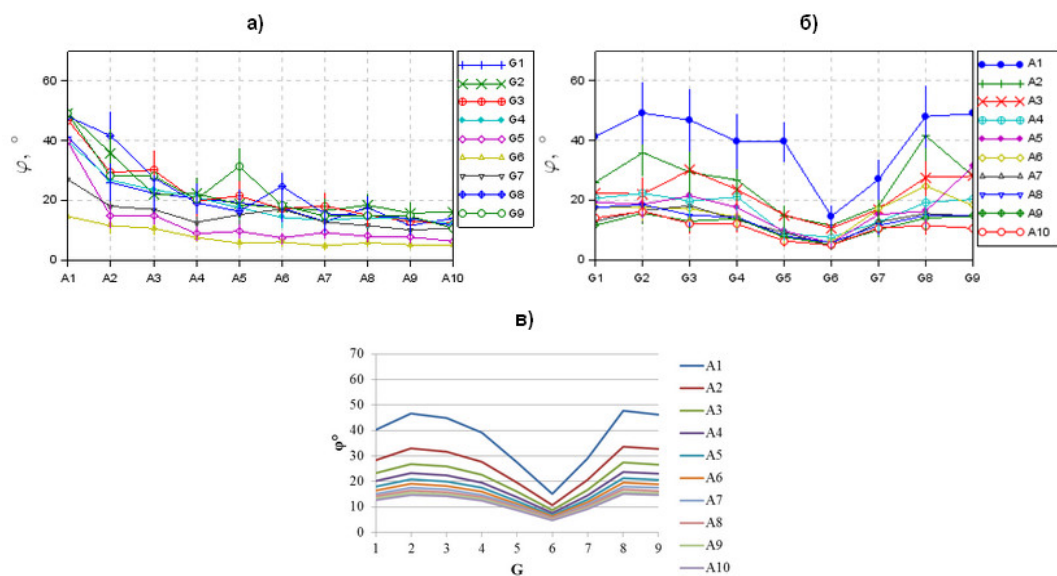


Рис. 2. Экспериментально полученные значения среднего угла отклонения. А) Полученные значения угла представлены в виде $G_i = \bar{\varphi}(A_j)$ вместе с указанием величины среднеквадратичного отклонения; Б) то же самое в виде $A_j = \varphi(G_i)$; В) Представление $A_j = \varphi(G_i)$ после аппроксимации $G_i = \bar{\varphi}(A_j)$ функцией вида $y = a/\sqrt{x}$.

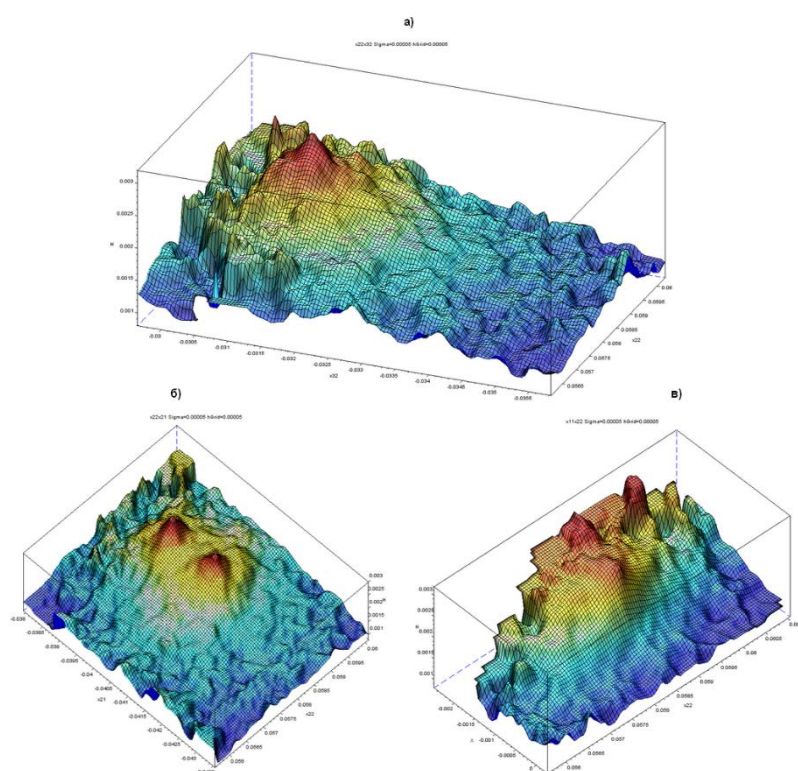


Рис. 3. Интерполированные с помощью функции нормального распределения срезы ландшафтов. Синапсы для построения были получены методом главных компонент. Характерные формы: А) однопиковый; Б) многопиковый; В) «склон»

Список литературы

1. Von Neumann J. Theory of self-reproducing automata / J. Von Neumann, A.W. Burks // IEEE Transactions on Neural Networks — 1966. — Т. 5. — №. 1. — С. 3-14.
2. Fischer H.P. Mathematical modeling of complex biological systems: from parts lists to understanding systems behavior / H.P. Fischer // Alcohol Res. Health. — 2008. — Vol. 31. — № 1. — P. 49–59.
3. Wolpert, D.H. No free lunch theorems for optimization / D.H. Wolpert, W.G. Macready // IEEE transactions on evolutionary computation. – 1997. — Т. 1. — №. 1. — С. 67-82.
4. Wright S.G. The roles of mutation, inbreeding, crossbreeding, and selection in evolution / S.G. Wright // Proceedings of the VI International Congress of Genetics. — 1932. — Vol. 1 — № 8 — P. 356–366.
5. Podgornaia A. I. Pervasive degeneracy and epistasis in a protein-protein interface / A. I. Podgornaia, M. T. Laub // Science. – 2015. — Vol. 347. — № 6222 — P. 673-677 с.
6. 21. Starr T. N. Alternative evolutionary histories in the sequence space of an ancient protein. / T. N. Starr, L. K. Picton, J. W. Thornton // Nature. — 2017. — Vol. 549. — 7672. — P. 409
7. Lobkovsky A.E. Replaying the Tape of Life: Quantification of the Predictability of Evolution / A.E. Lobkovsky, E. V. Koonin // Front. Genet. — 2012. — Vol. 3. — P. 1–8.
8. Барцев С.И. Эвристические нейросетевые модели в биофизике: приложение к проблеме структурно-функционального соответствия / С.И. Барцев, О.Д. Барцева — Красноярск: Сибирский федеральный университет — 2010. — 115 с.
9. Барцев С.И. Эвристические нейросетевые модели и ключевые проблемы биофизики/ С.И. Барцев, Гительзон И.И., Дегерменджи А.Г. // V Съезда биофизиков России. — 2015. — С. 11.
10. Povolotskaya I.S. Sequence space and the ongoing expansion of the protein universe / I.S. Povolotskaya, F.A. Kondrashov // Nature. — 2010. — Vol. 465. — № 7300. — P. 922–926.
11. Нейросетевые эвристические модели в исследовании свойств эволюционных траекторий/ С.И. Барцев., П.М. Батурина // Сложные системы в экстремальных условиях. — 2018. — С. 33–36.

ИЗМЕНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ТОЧЕК ПОСРЕДСТВОМ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Г.Р. Баширов, Н.М. Богатов, А.Н. Богатова, С.А. Сухих

Кубанский государственный университет, bogatov@phys.kubsu.ru

Введение

Организм человека является открытой энергетической системой. Агрессивное действие внешней среды требует от человека адаптации к современным социально-экономическим условиям, техногенным факторам, возрастающим психофизиологическим, информационным нагрузкам.

Процессы регуляции организма реализуются как на уровне отдельных функциональных систем, так и посредством их взаимодействия [1], они оказываются важнейшим фактором достижения физиологической, психологической и социальной адаптации. Способность к саморегуляции посредством управления психоэнергетическим потенциалом является индивидуальной характеристикой человека. Положительное влияние психотехник на саморегуляцию функциональных состояний человека продемонстрировано в работах [2 – 4].

Биологически активные точки (БАТ), представляют собой проецируемые на кожу участки наибольшей активности системы взаимодействия, объединяющей покровы тела, нервную систему, внутренние органы. В них на разной глубине (от нескольких миллиметров до нескольких сантиметров) расположены нервные рецепторы, воспринимающие воздействие и передающие их к внутренним органам [5]. Функциональные свойства БАТ позволяют участвовать им в процессах регулирования энергетического равновесия организма. Физические свойства БАТ отличаются от свойств окружающих их участков кожи. БАТ имеют относительно низкое по сравнению с окружающей кожей электрическое сопротивление. Через эти точки постоянно проходит слабый переменный электрический ток, характеристики которого зависят от параметров внешнего электрического поля, физиологического состояния самих точек и организма в целом. В норме между поверхностью кожи и подлежащими тканями существует разность потенциалов. Теплоотдача с поверхности кожи в зонах БАТ происходит более интенсивно, вследствие более интенсивных обменных процессов по сравнению с другими участками кожи [6]. Изучение физических свойств БАТ при различных воздействиях актуально для создания методик регуляции состояния организма.

Цель исследования – определить изменение физических параметров БАТ, участвующих в процессах биоэнергетического обмена и саморегуляции организма, при воздействии лазерным излучением.

Изменение состояния биологически активных точек

Для активации БАТ использовалось внешнее воздействие – лазерное излучение с длиной волны $0,63 \div 0,65$ мкм, выходной мощностью не более 5 мВт, диаметр пятна ~1 мм, время воздействия 4 мин.

Состояние БАТ оценивалось методами функциональной диагностики, основанными на измерении электрических потенциалов (метод Фоля) и регистрации инфракрасного излучения поверхности тела (тепловизионный метод).

Методика исследования включала три этапа: 1 – определение физических параметров БАТ до воздействия лазерным излучением: радиационной температуры при помощи тепловизора Testo 885-2 и электрического потенциала при помощи прибора «Дека – Фолль», 2 – воздействие на БАТ низкоэнергетическим излучением лазера

«ВедаЛазер», 3 – определение радиационной температуры и электрического потенциала БАТ после воздействия лазерным излучением.

Прибор «Дека – Фолль» показывает значение электрического потенциала φ в БАТ. В норме это значение находится в интервале от $\varphi_1 = 50$ мкВ до $\varphi_2 = 65$ мкВ. На первом этапе с помощью «Дека – Фолль» выявлялись «проблемные» БАТ, у которых φ находится вне интервала нормы.

Продemonстрируем результаты внешнего энергетического воздействия излучением «ВедаЛазер» на примере одного из испытуемых. Воздействие осуществлялось на следующие БАТ левой руки: 1) РС-99 (у внутренней ульнарной стороны корня ногтя первого пальца), симметричной Р-11, 2) МС-9 (у корня ногтя третьего пальца со стороны второго пальца), 3) С-7 (у локтевого края проксимальной лучезапястной складки, у лучевого края сухожилия локтевого сгибателя запястья, в щели между гороховидной и локтевой костями), 4) МС-6 (выше лучезапястной складки, между сухожилиями длинной ладонной мышцы и лучевого сгибателя запястья).

Исходные значения электрического потенциала φ и радиационной температуры t данных точек приведены в таблице 1.

Таблица 1

Физические параметры БАТ до воздействия лазерного излучения

БАТ	φ , мкВ	t , °C	Меридиан
РС-99	35	32,2	Лёгочный
МС-9	35	26,4	Перикарда
С-7	25	30,7	Сердечный
МС-6	20	30,6	Перикарда

Значения электрического потенциала φ и радиационной температуры t БАТ после воздействия приведены в таблице 2.

Таблица 2

Физические параметры БАТ после воздействия лазерного излучения

БАТ	φ , мкВ	t , °C	Меридиан
РС-99	45	28,8	Лёгочный
МС-9	50	24,6	Перикарда
С-7	65	30	Сердечный
МС-6	20	30,3	Перикарда

На рис.1 и рис.2 показаны термограммы первого, а на рис.3 и рис.4 показаны термограммы третьего пальца левой руки.

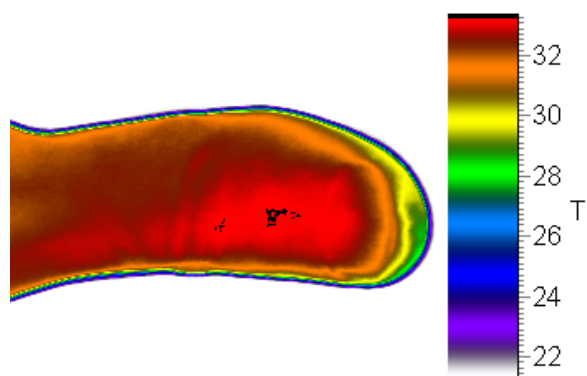


Рис.1. Термограмма первого пальца до воздействия.

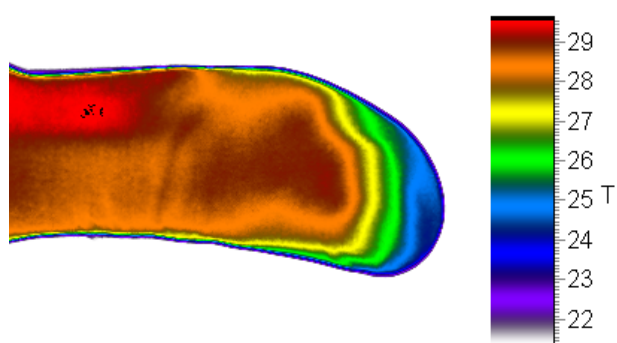


Рис.2. Термограмма первого пальца после воздействия.

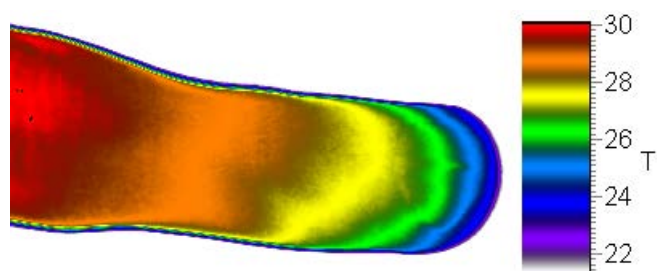


Рис.3. Термограмма третьего пальца до воздействия.

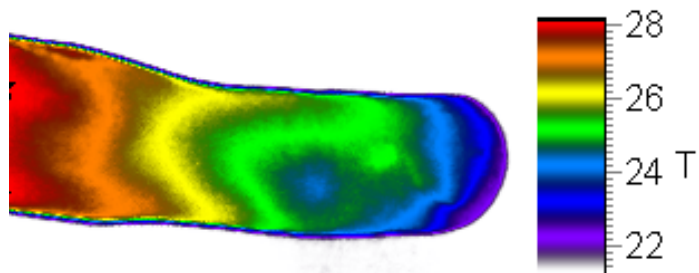


Рис.4. Термограмма третьего пальца после воздействия.

В результате воздействия электрический потенциал БАТ РС-99 приблизился к коридору нормы, БАТ МС-9 и С-7 вошел в коридор нормы, а БАТ МС-6 не изменился. Температура в каждой исследуемой точке уменьшилась. Уменьшение температуры является нелокальным, а происходит во всей термографируемой области.

Обсуждение результатов

Сравним результаты двух способов стимуляции механизмов саморегуляции организма и достигнутое влияние на физиологические параметры. Первый способ заключался в использовании психотехник [2 – 4]. В этом случае достигнуто воздействие на функциональные системы организма в целом. Повышение электрического потенциала и температуры БАТ отражает активизацию процессов метаболизма внутренних органов и систем а также кровообращения вследствие висцерокожного симпатического рефлекса. В этом случае процессы развиваются в направлении от центра к периферии.

Во втором случае низкоинтенсивное лазерное излучение возбуждает биологически активные точки, тем самым, изменяя проницаемость мембраны клетки, так что происходит изменение мембранного потенциала, а, следовательно, электрического потенциала БАТ. Гармонизирующее воздействие активизирует внутриклеточные механизмы и ускоряет метаболизм внутри клеток, количество кислорода, поглощаемого клетками, увеличивается. В отличие от первого случая энергия распространяется в направлении от БАТ к внутренним органам, температура поверхности тела снижается.

Несмотря на различия механизмов воздействия, оба способа приводят к одинаковым результатам – повышению адаптационных способностей и нормализации функционального состояния организма. Тепловизионный метод является средством объективного контроля результатов энергоинформационного обмена в организме. Тепловое поле поверхности тела отражает индивидуальные особенности организма. Изменение параметров теплового поля в результате процессов саморегуляции имеет индивидуальные отличия, связанные с физиологическим и психологическим состоянием человека.

Список литературы

1. Анохин П.К. Очерки по физиологии функциональных систем / П.К.Анохин. М.: Медицина, 1975. 448 с.
2. Богатов Н.М. Исследование процессов саморегуляции организма тепловизионным методом / Н.М. Богатов, А.Н. Богатова, С.А. Сухих // Нейроинформатика, её приложения и анализ данных: Материалы XXIV Всероссийского семинара, 30 сентября – 2 октября 2016 г. Красноярск. — Красноярск: Институт вычислительного моделирования СО РАН. — 2016. — С.9 – 12.
3. Богатов Н.М. Влияние техник саморегуляции на показатели здоровья студентов / Н.М. Богатов, А.Н. Богатова, В.С. Ляхин, С.А. Сухих // Нейроинформатика, её приложения и анализ данных: Материалы XXV Всероссийского семинара, 29 сентября – 1 октября 2017 г. Красноярск. — Красноярск: Институт вычислительного моделирования СО РАН. — 2017. — С.27 – 30.
4. Богатов Н.М. Снижение напряжения функциональных систем организма с помощью саморегуляции / Н.М. Богатов, А.Н. Богатова, С.А. Сухих, В.В. Филимонов / Нейроинформатика, её приложения и анализ данных: Материалы XXVI Всероссийского семинара, 28 сентября – 30 сентября 2018 г. Красноярск. — Красноярск: Институт вычислительного моделирования СО РАН. — 2018. — С.16 – 22.
5. Колтовой Н.А. Биологически активные точки / Н.А. Колтовой. Москва, 2018. — 338 с.
6. Якупов Р.А. Электростимуляционная рефлексотерапия / Р.А. Якупов // Альтернативная медицина. — 2005. — №1. — С.9 – 12.

АДАПТИВНОЕ УПРАВЛЕНИЕ С ИДЕНТИФИКАЦИЕЙ ТЕМПЕРАТУРНЫМИ РЕЖИМАМИ ЖИДКИХ СРЕД

В.С.Воронов¹, А.И.Рубан²

Сибирский федеральный университет,
Институт космических и информационных технологий, каф. информатики

¹voronov.volodya2013@yandex.ru

²ai-rouban@mail.ru

Задачи адаптивного управления широко распространены в различных сферах деятельности человека. Особый интерес представляет решение задачи в совокупности с задачей идентификации, что позволяет конструировать эффективные и относительно простые регуляторы с идентификатором. Важным аспектом при этом становится выбор алгоритмов, обеспечивающих нужные свойства устройствам управления и учитывающих свойства объектов управления. В данной работе впервые дается описание свойств и границ применимости алгоритмов адаптивного управления с идентификацией, также приводится модель процесса фракционной дистилляции с чистым запаздыванием и закон управления, синтезированный на ее основе.

Задача идентификации заключается в определении неизвестных параметров модели объекта, для ее решения в настоящее время разработано большое количество методов параметрической идентификации [1 – 5]. Одним из основных является семейство подходов идентификации по ошибке предсказания, методы которого рассмотрены в работе [1]. В данной работе будут рассматриваться проекционные адаптивные алгоритмы и алгоритмы метода наименьших квадратов, они приведены в работах [3, 5].

Особый интерес для идентификации и адаптивного управления представляют распределенные объекты, для которых характерно наличие чистого запаздывания. Пусть поведение объекта в динамическом режиме описывается разностным уравнением:

$$x(t) = \varphi^T(t)a + e(t) = f(x(t-1), u(t-\tau-1), a) + e(t), \quad t = 1, 2, \dots,$$

где a – неизвестные параметры, $f(\cdot)$ – известная функция, $e(t)$ – центрированная помеха, τ – величина чистого запаздывания, $\tau \geq 0$, а вектор $\varphi(t)$ размерностью $d = n_x + n_u + 1$,

$$\varphi(t) = [1, x(t-1), \dots, x(t-n_x), u(t-\tau-1), \dots, u(t-n_u-\tau)]^T. \quad (1)$$

Тогда линейный относительно параметров предсказатель будет иметь вид

$$y(t | \alpha(t)) = \varphi^T(t)\alpha(t) = f(x(t-1), u(t-\tau-1), \alpha(t)), \quad (2)$$

где $\alpha(t)$ – вектор неизвестных параметров, размерностью d .

Тогда проекционный адаптивный алгоритм можно представить в следующем виде:

$$\alpha(t) = \alpha(t-1) + [X(t) - \alpha(t-1)\Phi(t)]\Phi^+(t),$$
$$\Phi(t) = \begin{bmatrix} \varphi^T(t) \\ \vdots \\ \varphi^T(t-p+1) \end{bmatrix}, \quad X(t) = \begin{pmatrix} x(t) \\ \vdots \\ x(t-p+1) \end{pmatrix}, \quad 1 \leq p \leq t. \quad (3)$$

Здесь p – величина глубины памяти, $+$ – знак операции псевдообращения матриц. При $p = 1$ алгоритм (3) становится простейшим, т.е. используется только текущее измерение для перестройки параметров. В (3) также можно использовать модель в приращениях.

Алгоритм (3) не критичен к определению начальных условий. Если в наличии нет экспериментальных данных о работе объекта и при использовании $p > 1$ в (3) можно инициализировать матрицу $X(0)$ значениями $x(0)$, которое появляется в момент первого измерения. Однако для улучшения качества идентификации на начальных этапах работы можно применять заранее подготовленные данные для инициализации матриц $\Phi(0)$ и $X(0)$. Кроме этого в процессе поступления новой информации можно постепенно увеличивать p до достижения необходимого уровня.

Стандартный алгоритм адаптивного метода наименьших квадратов подробно описан в работах [1, 4]. Его можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned}\alpha(t) &= \alpha(t-1) + \gamma(t)[x(t) - y(t | \alpha(t-1))], \quad \gamma(t) = \frac{K_{\alpha(t-1)}\varphi(t)}{\beta(t)\lambda + \varphi^T(t)K_{\alpha(t-1)}\varphi(t)}, \\ K_{\alpha(t)} &= (E - \gamma(t)\varphi^T(t))K_{\alpha(t-1)}\lambda^{-1}, \quad t = t_0 + 1, t_0 + 2, \dots, \\ K_{\alpha(0)} &= \left(\sum_{i=1}^{t_0} \beta^{-1}(i)\varphi(i)\varphi^T(i) \right)^{-1}, \quad 0 < \lambda \leq 1.\end{aligned}\quad (4)$$

Здесь β – весовой коэффициент, λ – коэффициент забывания информации, E – единичная матрица.

В алгоритме (4) аналогично с (3) можно использовать модель в приращениях.

Целью адаптивного управления является обеспечить движение объекта по заданной траектории x^* , для этого требуется по имеющейся информации на момент времени t ($x(t)$; $x(t-1)$, $u(t-1)$; ...), вычислить управляющее воздействие $u(t)$, которое бы обеспечило наименьшее отклонение от целевой траектории.

Для задачи управления с идентификацией характерен подход непрямого управления, при котором происходит перестройка параметров модели, а не регулятора. Рассмотрим один из его методов – метод управления с предсказателем [3, 5]. Для этого используем предсказатель вида (2).

Если запаздывание в векторе (1) отсутствует, т.е. $\tau = 0$, необходимо составить прогноз на такт вперед

$$y(t+1 | \alpha(t)) = \varphi^T(t+1)\alpha(t) = f(x(t), u(t), \alpha(t)),$$

при этом вектор регрессоров $\varphi^T(t+1)$ будет содержать искомое воздействие $u(t)$. Если же $\tau > 0$, то необходимо последовательно проделывать эту процедуру, заменяя появляющиеся неизвестные значения $x(t+1)$ на известные $y(t+1 | \alpha(t))$, т.е.

$$y(t+2 | \alpha(t)) = f(y(t+1 | \alpha(t)), u(t-\tau+1), \alpha(t)),$$

и т.д. пока не будет сделан прогноз на момент времени $t + \tau + 1$, т.е. получено $y(t + \tau + 1 | \alpha(t))$. Используя критерий наименьших квадратов

$$J(u) = (y(t + \tau + 1) - x^*(t + \tau + 1))^2 = \min_{u_1 \leq u(t) \leq u_2}$$

и учитывая ограничения ($u(t) \in [u_1, u_2]$) на управление, находим $u(t)$.

Стоит упомянуть, что данный подход к синтезу регулятора довольно прост по сравнению с аналогами. Использование же модели с переменными параметрами и соответственно идентификатора в устройстве управления позволяет избавиться от необходимости строить эталонную модель объекта как, например, в адаптивном управлении с эталонной моделью, а также позволяет отслеживать нестационарные параметры.

Для исследования свойств вышеописанных алгоритмов рассмотрим распространенную задачу контроля температурно-временных режимов жидких сред, а именно процесс фракционной дистилляции. Объект, с помощью которого он осуществляется, схематично представлен на рис. 1Б. Нагрев жидкости осуществляется с помощью нагревательного элемента, управление которым происходит путем изменения подаваемой мощности с помощью разработанного устройства управления. Управляющее воздействие ограничено, т.е. $u(t) \in [0,100]$. Смешивание жидкости происходит за счет естественной конвекции.

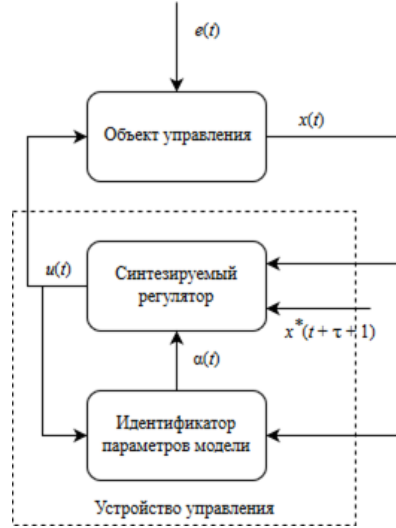


Рис.1А

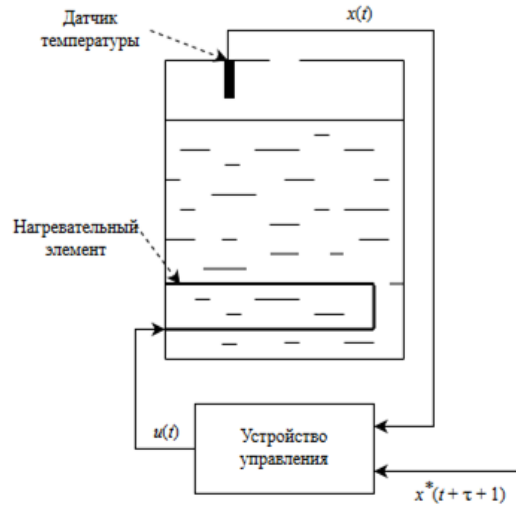


Рис.1Б

Рис.1. Устройство и объект управления, 1А – структурная схема управления с предсказателем, 1Б – объект управления

Процесс фракционной дистилляции можно описать линейным разностным уравнением с чистым запаздыванием

$$y(t|\alpha(t)) = \alpha_0(t) + \alpha_1(t)x(t-1) + \alpha_2(t)x(t-2) + \alpha_3(t)x(t-3) + \alpha_4(t)x(t-4) + \alpha_5(t)u(t-\tau-1) + \alpha_6(t)u(t-\tau-2). \quad (5)$$

Здесь чистое запаздывание $\tau = 2$ тактам.

Для проведения имитации параметры a объекта были рассчитаны с помощью ретроспективного метода наименьших квадратов на основе экспериментальных данных, полученных с реального объекта при нормальном функционировании. Были получены следующие значения: $a_0 = -1.585 \cdot 10^{-2}$, $a_1 = 1.1816$, $a_2 = 6.794 \cdot 10^{-2}$, $a_3 = -1.258 \cdot 10^{-2}$, $a_4 = -0.2376$, $a_5 = 1.103 \cdot 10^{-3}$, $a_6 = 3.059 \cdot 10^{-4}$.

Технологический процесс фракционной дистилляции можно описать кусочно-заданной функцией

$$x^*(t) = \begin{cases} 75.5^\circ\text{C}, & t \leq 200, \\ 80^\circ\text{C}, & 200 < t \leq 300, \\ 40^\circ\text{C}, & 300 < t \leq 312, \\ 0.02397t + 72.5217^\circ\text{C}, & 312 < t \leq 992. \end{cases}$$

Закон управления синтезируется на основе модели (5) и описанного выше метода синтеза регулятора. Строится прогноз на 3 такта вперед ($y(t+1|\alpha(t))$, $y(t+2|\alpha(t))$, $y(t+3|\alpha(t))$), после чего исходя из критерий наименьших квадратов и ограничений $u(t) \in [0,100]$, находится управление $u(t)$.

Начальные условия имитации описывают объект в выключенном состоянии, т.е. начальная температура $x(0) = 31.5^{\circ}\text{C}$, управляющее воздействие отсутствует $u(0) = 0$, начальные значения коэффициентов приняты $\alpha_i = 1$, $i = \overline{0..d-1}$, имитация длится $t = 992$ дискреты, что при интервале дискретизации $\Delta = 10$ сек. соответствует ($t' = t\Delta$) $t' \approx 165.3$ мин.

Не смотря на простоту реализации, простейший алгоритм показал свою неработоспособность на модели (5). Это связано с большой инерцией объекта, $n_x = 4$, $n_u = 2$. Кроме этого наличие любой случайной помехи делает алгоритм неработоспособным, так как эти алгоритмы представляют собой решение систем уравнений, составленных по наблюдаемому выходу.

Использование модификации с моделью в приращениях приводит к сильным колебаниям параметров, особенно свободного члена, что сказывается на отслеживании заданной траектории.

Таким образом, применение простейшего алгоритма и его модификации рекомендуется для простых моделей, где $n_x, n_u \leq 2$, а также в условиях отсутствия помех случайного характера.

Существенное улучшение качества идентификации обеспечивает использование проекционных алгоритмов при $p > 1$. Оптимальной глубиной памяти p является число неизвестных параметров, т.е. $p = d$ (рис. 2А). При этом достигается максимальная скорость сходимости и качество отслеживания. Использование $p < d$ приводит к худшему качеству идентификации, а $p > d$ не дает видимый прирост, но требует хранение большего числа данных в памяти. Стоит отметить, что при постепенном увеличении p до уровня $p = d$ происходит постепенное увеличение качества идентификации и скорости сходимости параметров. Отрицательным эффектом увеличения памяти является увеличение задержки до начала перестройки параметров, это обуславливается необходимостью накопления данных. Этот недостаток можно устранить, используя при инициализации алгоритма экспериментальные данные, накопленные в ходе предыдущих циклов работы объекта. Одним из свойств этого алгоритма является возможность повысить помехоустойчивость (при наличии центрированной равномерно распределенной помехи) путем увеличения p . Однако, чтобы добиться этого требуется существенно увеличивать глубину памяти (в разы) даже при малом уровне помех (Рис. 3А). Этот алгоритм имеет смысл использовать с моделями любой сложности и при отсутствии помех.

Сравнимого качества при использовании простейшего адаптивного алгоритма с памятью можно добиться и применяя алгоритмы адаптивного метода наименьших квадратов (МНК). Стандартный адаптивный метод наименьших квадратов дает хорошее качество управление, динамика входной и выходной переменной, а также идентификация параметров α_0 и α_2 модели (5) приведены на рис.2. При этом проявляется одно из его свойств, а именно определение отличных от «истинного» набора параметров с обеспечением хорошего качества приближения выхода модели и объекта. За счет этого обеспечивается хорошее приближение уже на первых тактах работы алгоритма. Об этом свидетельствует более быстрый выход объекта на заданную траекторию. Также это свойство позволяет использовать алгоритм на моделях, где используются нестационарные параметры или наблюдается их дрейф. Кроме этого алгоритм производит разбиение процесса фракционной дистилляции на два этапа: выход на траекторию (до 165 такта) и контролируемый нагрев. Однако стоит упомянуть, что

алгоритм чувствителен к определению начальных условий, адаптивный МНК требует обязательного наличия экспериментальных данных о работе объекта для расчета начального значения матрицы $K_{\alpha(0)}$. Подробнее о методах определения начальных условий, применяемых для алгоритмов этого семейства, приводится в монографии [1].

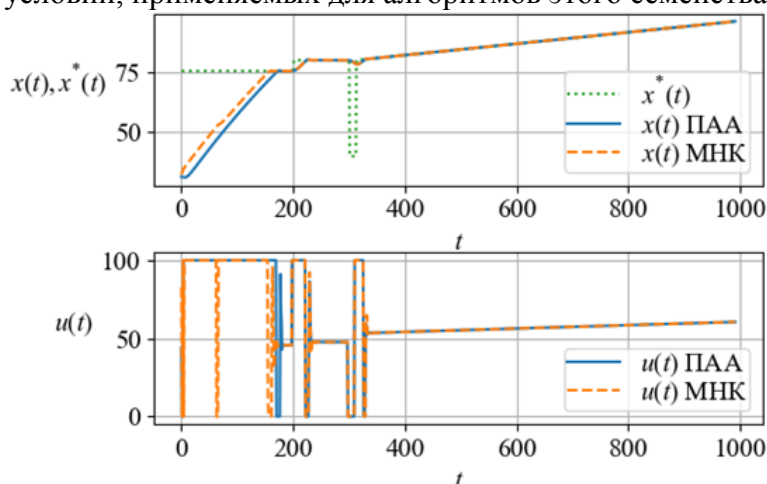


Рис.2А

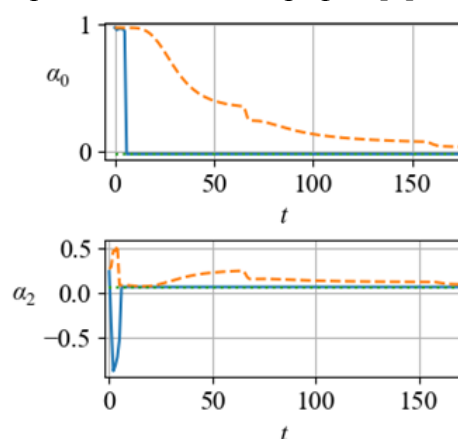


Рис.2Б

Рис.2. Имитация процесса фракционной дистилляции, 1А – динамика входной и выходной переменных при использовании проекционного алгоритма с памятью (ПАА) с $p = d$, и стандартного адаптивного МНК, 1Б – идентификация параметров модели (5), точечный пунктир – истинные значения, сплошная линия – простейший алгоритм с памятью, штриховой пунктир – адаптивный МНК

Для решения проблемы определения начальных условий также можно применять комбинированный алгоритм идентификации, а именно совмещение проекционного алгоритма и адаптивного МНК. Такой подход заключается в применении проекционного алгоритма до достижения количества измерений $N = d - 1$ включительно. При этом с поступлением новой информации о выходах объекта предполагается постепенно повышать глубину памяти p . Таким образом, в начале работы объекта будет использоваться простейший алгоритм (3) с $p = 1$, при получении второго измерения память увеличивается до $p = 2$ и т.д. Когда количество измерений достигает величины $N = d$ количество информации становится достаточно для расчета $K_{\alpha(0)}$ в (4), а в качестве $\alpha(0)$ применяются оценки, полученные при работе проекционного алгоритма при $p = d - 1$.

Помехоустойчивость стандартного алгоритма адаптивного метода наименьших квадратов превосходит это качество у проекционного. При этом оценки параметров модели удерживаются в районе истинных значений. На рис.3 приведено сравнение идентификации параметров α_0 , α_2 и α_5 модели (5).

В ходе имитации на выход объекта накладывается центрированная аддитивная равномерно распределенная помеха $e(t) = U[-A_n, A_n]$ с $A_n = 0.05^\circ\text{C}$. Полезный сигнал изменяется в пределах $[31.5^\circ\text{C}, 96.3^\circ\text{C}]$ и его размах составляет $R = 64.8^\circ\text{C}$. Отношение сигнал/шум, определяющееся как $k_{SN} = R/(2A_n)$. Чем меньше этот показатель, тем больше помеха. При заданных R и A_n он составит $k_{SN} = 648$. Параметр A_n обычно

указывается в документации к используемому измерительному оборудованию, или определяется исходя из обработки экспериментальных данных.

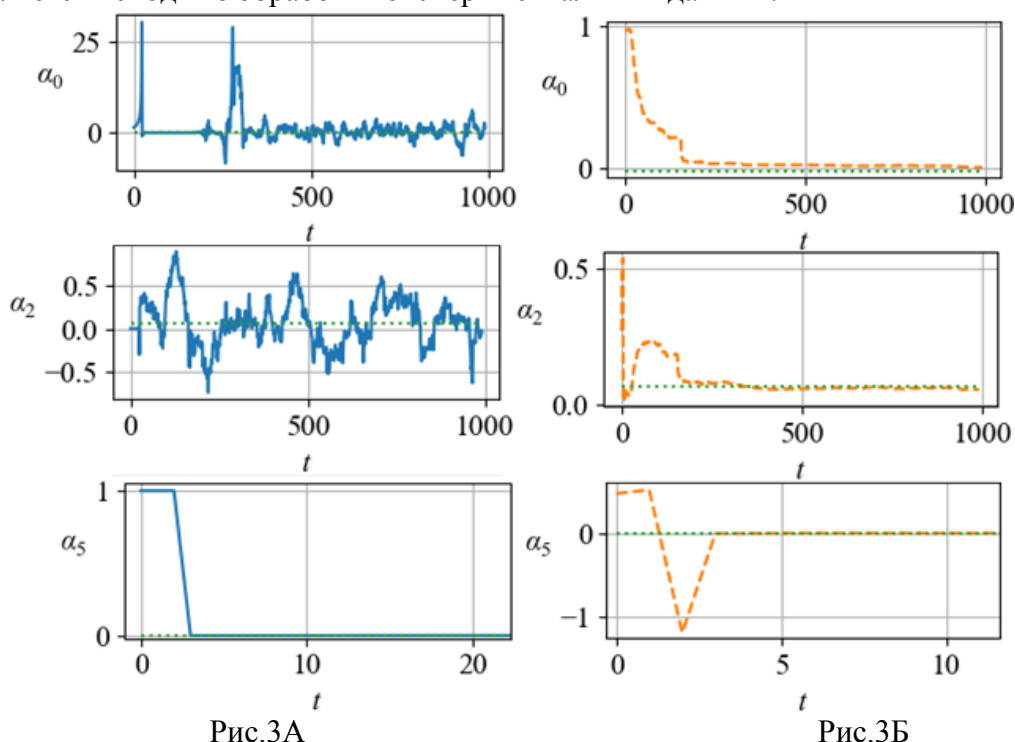


Рис.3. Имитация процесса фракционной дистилляции при наличии помехи. 3А – простейший адаптивный алгоритм с памятью при $p = 5d$, 3Б – стандартный адаптивный МНК

Можно заметить, что при использовании проекционного адаптивного алгоритма не происходит стабилизация оценок параметров при выходных переменных, особенно сильными колебания параметров становятся в момент контролируемого нагрева, например α_0 на рис. 3А. Это непосредственно сказывается на качестве управляющего воздействия.

Стоит также отметить, что оценивание параметров при входных переменных происходит быстро и с высокой точностью при использовании обоих алгоритмов.

Таким образом, применение адаптивного МНК в идентификаторах устройств управления обеспечивает получение приемлемых результатов на любых моделях и при наличии помех случайного характера.

Список литературы

1. Льюинг Л. Идентификация систем. Теория пользователь: Пер. с англ. / Под ред. Я.З. Цыпкина. — М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1991. — 432 с.
2. Эйкхофф П. Основы идентификации систем управления. Оценивание параметров и состояния: Пер. с англ. / Под ред. Н.С. Райбмана. — М.: Мир, 1975. — 681 с.
3. Трапезников В.А., АСИ – адаптивная система с идентификатором / В.А. Трапезников, Н.С. Райбман, В.М. Чадеев и др. — М.: Институт проблем управления им. В.А. Трапезникова РАН, 1980. — 70 с.
4. Гроп Д. Методы идентификации систем: Пер. с англ. / Под ред. Е.И. Кринецкого. — М.: Мир, 1979. — 300 с.
5. Рубан А.И. Адаптивные системы управления с идентификацией : монография / А.И. Рубан. — Красноярск : Сиб. федер. ун-т, 2015. — 140 с.

СТРУКТУРА ГЕНОМОВ ЦИАНОБАКТЕРИЙ ДЛЯ РАЗНОЙ ТОЛЩИНЫ СЛОВАРЕЙ

И.К. Горбань², В.С. Густов², М.Ю. Сенашова¹, М.Г. Садовский^{1,2}

¹Институт вычислительного моделирования СО РАН,
660036, Красноярск, Академгородок

msen@icm.krasn.ru, msad@icm.krasn.ru

²Сибирский Федеральный университет,
Институт фундаментальной биологии и биотехнологии,
660041, Красноярск, пр.Свободный, 79

1. Введение

Изучение особенностей и деталей структуры нуклеотидных последовательностей является важнейшей задачей современной биологии. Такого рода исследования ведутся в двух аспектах — структурно-функциональном и эволюционном. Выявление связи структуры и функции представляет собой классическую проблему молекулярной и системной биологии и несмотря на обширный поток публикаций и работ в данном направлении, она всё ещё далека от завершения. Более того, исследователи выявляют всё новые и новые структурные элементы либо новые виды и формы взаимодействий и взаимоотношений между структурными элементами биологических макромолекул, а развитие техники и инструментов исследований лишь усугубляет эту ситуацию.

Эволюционный аспект таких исследований вполне понятен: изучая особенности структуры биологических макромолекул (ДНК либо белковых последовательностей) у разных организмов, можно точнее составить картину того, как эволюционировали те или иные биологические системы — от конкретных видов (рас, штаммов и т. п.) до экосистем и глобальных сообществ.

Такого рода исследования всегда затруднены выбором и качеством того биологического материала, который берётся в рассмотрение. Дело даже не в ошибках (к примеру) секвенирования и/или аннотирования генетических последовательностей, неизбежных во многих случаях, а в большой сложности таких объектов, как геномы либо отдельные хромосомы. Фактически приходится анализировать целую триаду характеристик: структуру, функцию и филогению. Эти элементы триады плотно переплетены друг с другом и оказывают друг на друга очень сильное влияние, которое далеко не всегда удаётся выделить в качестве отдельного и независимого фактора.

Прокариотические организмы с этой точки зрения являются более удобными объектами для исследования, чем эукариотические; геном бактерий заметно короче генома эукариот и всегда представлен одной хромосомой. Своего рода расплатой за такое удобство является заметная трудность в определении филогении бактерий, особенно для таксонов высокого уровня.

Исследования структур в генетических последовательностях также является важной задачей, осложняющейся чрезвычайно большим разнообразием структур, которые можно найти и выделить в молекулах ДНК, даже если не обращать внимания на их химические свойства. Настоящая работа посвящена изучению структур в геномах бактерий для частотных словарей разной толщины.

Под структурой мы будем понимать различие (либо подобие) статистических свойств отдельных формально выделяемых фрагментов генома на уровне триплетов. Иными словами, структура в рамках настоящей работы — это взаимное расположение различных (формально выделяемых) фрагментов генома сравнительно небольшой длины в пространстве частот триплетов, которые подсчитываются в пределах указанных фрагментов; подробности представлены в разделе 2.

Данный подход к изучению структурированности геномов и их связи с их GC-контентом был впервые предложен в работах Горбаня с соавторами [1-3]. Этот же подход (с небольшой модификацией) используется и нами.

2. Материалы и методы

Введём основные понятия. Мы будем рассматривать генетическую последовательность длины L , состоящую из символов алфавита $\mathfrak{M} = \{A, C, G, T\}$. Если последовательность содержит символы, отличающиеся от символов алфавита $\mathfrak{M}$, то такие символы из последовательности удаляются, а длина последовательности уменьшается на число таких символов. Для этой последовательности мы будем составлять частотный словарь толщины 3. Частотный словарь толщины 3 символьной последовательности, соответствующей ДНК — это список всех троек $v_1 v_2 v_3$ идущих подряд нуклеотидов с указанием частот этих троек; всего может быть 64 триплета. Частота f_ω — это отношение числа копий n_ω данного слова к общему числу всех триплетов N , где N — сумма всех n_ω :

$$f_\omega = \frac{n_\omega}{N} \quad (1)$$

Всякий частотный словарь W_3 отображает геном в 64-мерное метрическое пространство; близость двух геномов задается естественным образом — например, как близость двух точек в Евклидовой метрике:

$$\rho(W_3^1, W_3^2) = \sqrt{\sum_{\omega=AAA}^{TTT} (f_\omega^1 - f_\omega^2)^2}. \quad (2)$$

Один из 64 триплетов исключался, поскольку сумма всех частот в словаре равна 1, что порождает линейную связь, которая будет давать ложный сигнал при статистической обработке (корреляционном анализе, определении главных компонент и т. п.). Формально исключить можно любой триплет, однако есть несколько эвристических подходов для исключения. Первый подход состоит в том, чтобы исключить самый большой по значению частоты триплет, особенно если значение его частоты на порядок (или около того) превосходит значение частоты следующего за ним (по этой величине) триплета.

Второй подход состоит в том, чтобы исключать тот триплет, для которого стандартное отклонение, наблюдаемое по анализируемому набору частотных словарей, является минимальным: такой триплет даёт наименьший вклад в различимость объектов (в предельном случае, когда стандартное отклонение равно 0, различий по этому триплету вовсе нет). Мы использовали второй подход. Таким образом, рассматриваемое нами пространство точек становится 63-х мерным.

Для выявления структуры в генетической последовательности проводилась предварительная обработка, которая ставила в соответствие данной последовательности множество точек в 64-мерном пространстве триплетов. Делалось это следующим образом: последовательность сканировалась окном длины Δ с шагом t . Для каждого положения i рамки определялся участок генетической последовательности, совпадающий с рамкой считывания, для которого вычислялся частотный словарь $W_3^{(i)}$, соответствующий i -ой точке в 64-мерном пространстве. Кроме того, с каждой точкой в 64-мерном пространстве связывались следующие параметры: номер центрального символа рассматриваемого участка и относительная фаза.

Номер центрального символа участка совпадает с номером этого символа в последовательности. Относительная фаза определяется в зависимости от того, попал рассматриваемый участок в кодирующую или не кодирующую область последовательности. Участок относится к кодирующим, если он целиком попадал в кодирующую область последовательности. Если участок относится к не кодирующим, то соответствующая ему точка помечается символом J . Для кодирующего участка возможны 6 вариантов маркировки: $B_0, B_1, B_2, F_0, F_1, F_2$. Если кодирующий участок в последовательности аннотирован как считывающийся в прямом направлении, то для него вычислялся остаток от деления на 3 разности номеров центрального символа участка и первого символа кодирующей области, к которой он относится. В соответствии с величиной остатка от деления точка помечалась символом B_0, B_1 или B_2 . Если участок аннотирован как считывающийся в обратном направлении, то вычислялся остаток от деления на 3 разности номеров последнего символа кодирующей области, к которой относится участок, и центрального символа участка. В зависимости от значения остатка от деления точка помечалась символами F_0, F_1 или F_2 . В данной работе мы рассматривали влияние длины рамки считывания Δ и шага t на структуру получающихся в результате вычисления частотных словарей точек в 63-мерном пространстве.

По полученному множеству точек в программе *VidaExpert* (<http://bioinfo-out.curie.fr/projects/vidaexpert/>) строился вид данных в пространстве первых трёх главных компонент, вычисленных для данного 63-мерного пространства. Рассматривались проекции на плоскость пространства главных компонент. Точки данных были раскрашены в соответствии с их относительной фазой. Точки, соответствующие не кодирующим участкам, изображены на рисунках коричневым цветом, точки, соответствующие относительным фазам B_0 и F_0 , изображены малиновым сиреневым цветом, точки, соответствующие относительным фазам B_1 и F_1 , изображены зеленым и бирюзовым цветом, а точки, соответствующие относительным фазам B_2 и F_2 , изображены оранжевым и желтым цветом.

Результаты

Для исследования были использованы 47 геномов цианобактерий, взятые на сайте <https://www.ebi.ac.uk/genomes/bacteria.html> содержащиеся в открытом доступе в базе EMBL-банка. Рассматриваемые бактерии относятся к отрядам Synechococcales, Nostocales, Chroococcales и Oscillatoriales. Для длины окна Δ равной 603 наблюдались четыре 7-кластерные структуры, описанные в [1-3] в следующем порядке: "параллельные треугольники" для АТ-богатых геномов (GC -состав составляет около 25%) рис. 1а), затем "перпендикулярные треугольники" для GC -состава около 35% рис. 1б), постепенный переход к вырожденному случаю «совпадающие треугольники» для GC -состава около 50% рис. 1в), и, наконец, вырождение решения в одну плоскость, ведущую к шестилучевому симметричному шаблону для GC -состава около 60% рис. 1г).

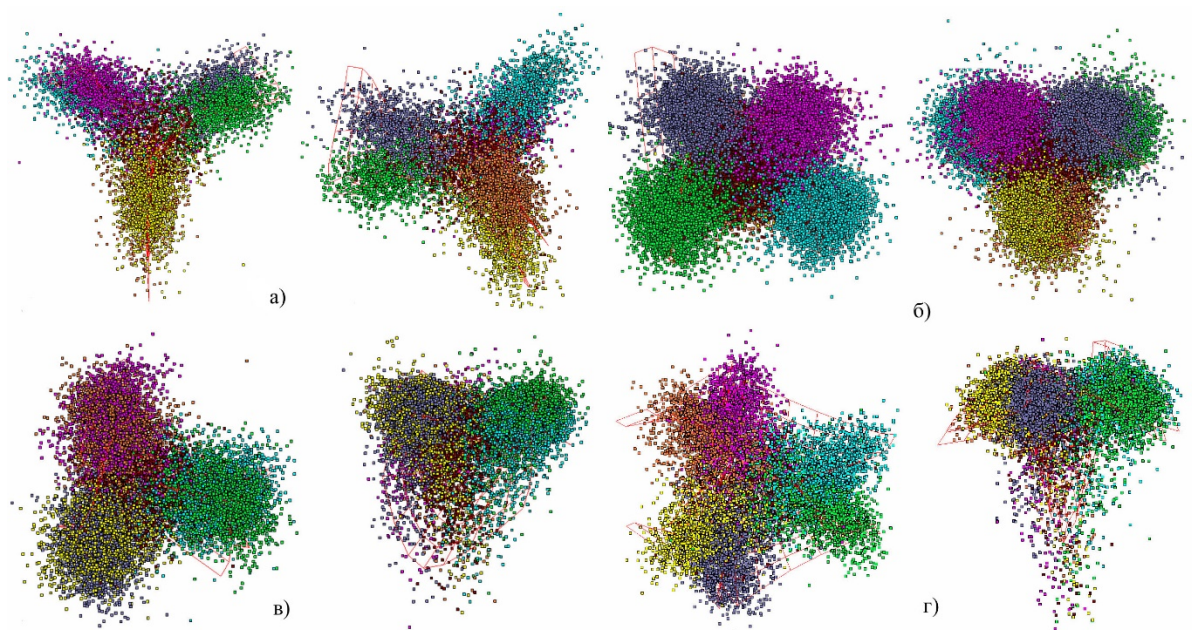


Рис. 1. Структуры геномов цианобактерий для окна $\Delta = 603$. Слева показаны проекции в плоскости (PC_1, PC_2) , справа в плоскости (PC_2, PC_3) .

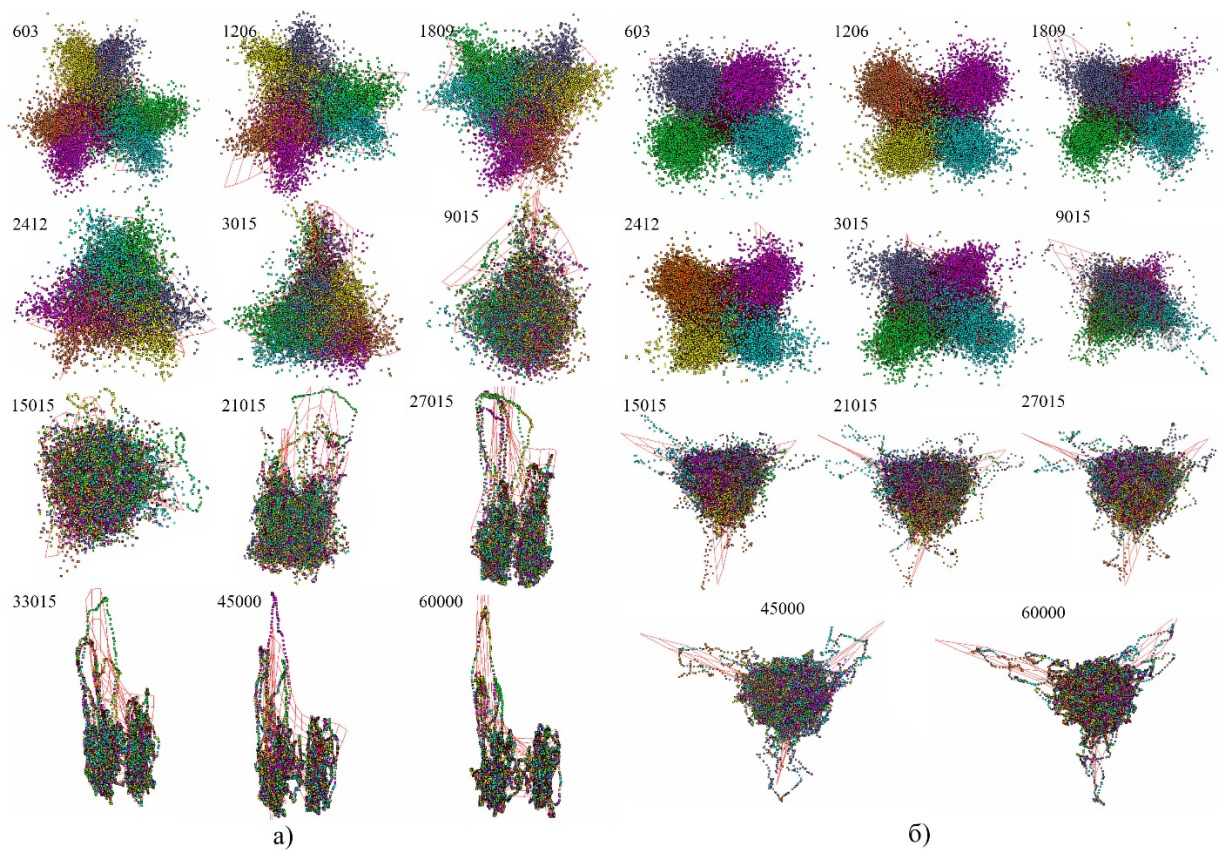


Рис. 2. Преобразование структуры в зависимости от длины окна на примере *Synechococcus* sp. WH 8102 а) и *Nostoc* sp. PCC 7120 б).

Были проанализированы структуры, которые соответствуют разной длине окна Δ : 603, 1206, 1809, 2412, 3015, 9015, 15015, 21015, 27015, 33015, 45000 и 60000 символов. Нас интересуют в большей мере структуры, соответствующие длинам окна Δ равным 603 и 60000. Изменение структур происходит монотонно с увеличением длины плашки (рис. 2). Это утверждение справедливо для любых изначальных структур при длине плашки 603 и для любых конечных структур при длине окна 60000.

Для длины окна 60000 было обнаружено 2 принципиально различные структуры, а также одна подструктура. Условно они были названы «Клубок» (рис. 3а) и «Две плоскости» (рис. 3в), а подструктура «Снитч» (рис. 3б).

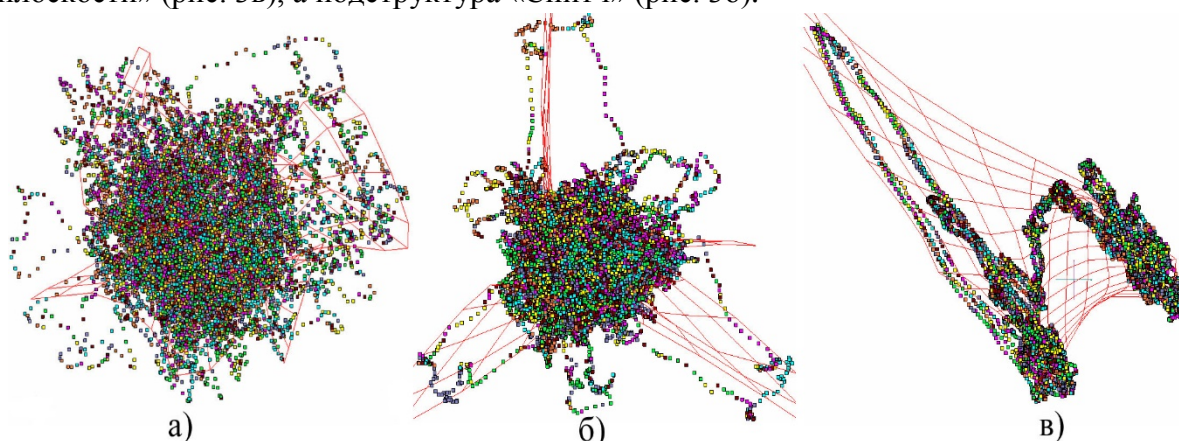


Рис. 3. Структуры геномов цианобактерий для длины окна 60000 на примере *Synechococcus elongatus* PCC 6301 а), *Anabaena variabilis* ATCC 29413 б) и *Synechococcus* sp. CC9902 в).

Структура «Клубок», независимо от предшествующей ей структуры, с первого взгляда выглядит как шар, состоящий из хаотично расположенных точек, соответствующих одной из 6 относительных фаз, или некодирующих участков. Однако при детальном рассмотрении заметно, что эта структура скорее напоминает клубок нитей. Особенно это заметно на краях структуры по нитям, выходящим из основного кластера.

Подструктура «Снитч» в целом идентична структуре «Клубок». Её отличительной особенностью является наличие трёх ярко выраженных нитей. Своим размером они превосходят остальные нити в несколько раз.

Структура «Две плоскости» характеризуется наличием двух кластеров, состоящих из точек 6 относительных фаз и некодирующих участков. Эта структура так же состоит из длинных нитей, однако образует не «клубок», а два вытянутых кластера соединённых между собой перемычкой. Во всех случаях один кластер длиннее другого. Причем в кластеры сгруппированы точки, которые делят геном на две части. Одна часть соответствует началу генома, а вторая концу.

Кроме того, было обнаружено, что «клубок», соответствующий структуре цианобактерий в пространстве первых трех главных компонент состоит из одной или из трех нитей, в зависимости от кратности шага t . В случае кратности шага трем, клубок состоит из одной нити, в противном случае нитей три. На рис.4 показаны фрагменты геномов *Microcystis aeruginosa* и *Nostoc*, включающих первую тысячу точек в пространстве первых трех главных компонент для $\Delta = 60000$ и $t = 303$. На рисунке видно, что структура генома представляет собой одну нить. На рис. 5 показаны фрагменты этих же геномов для $\Delta = 60000$ и $t = 91$.

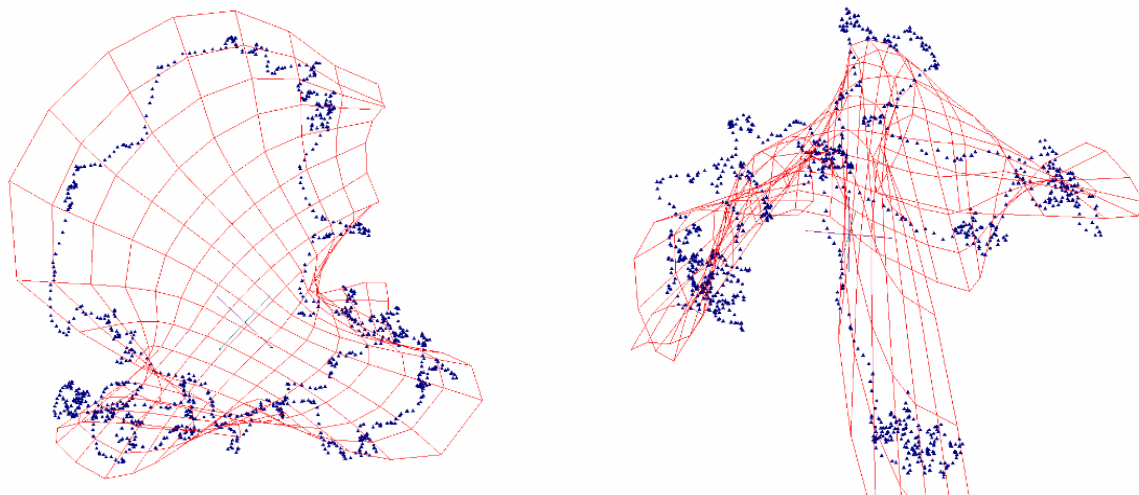


Рис. 4. Структура геномов *Microcystis aeruginosa* и *Nostoc* при шаге t , кратном трем.

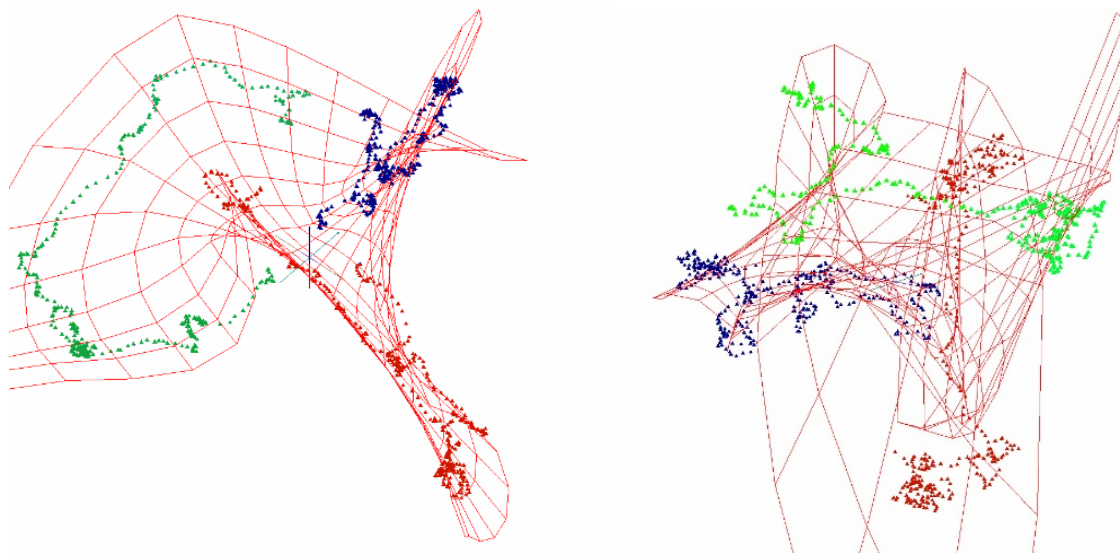


Рис. 5. Структура геномов *Microcystis aeruginosa* и *Nostoc* при шаге t , не кратном трем.

К сожалению, найти связь между структурой цианобактерий при длине окна 60000 с GC -составом этих геномов, либо с филогенией не удалось.

Список литературы

1. Gorban A.N., Zinovyev A. Yu., Popova T.G., 2003. Seven clusters in genomic triplet distributions. // arXiv:cond-mat/0305681 [pdf]
2. Gorban A.N., Zinovyev A. Yu., Popova T.G., 2003. Seven clusters in genomic triplet distributions // *Silico Biology*. V.3. № 4. P. 471-482.
3. Gorban A.N., Zinovyev A. Yu., Popova T. G., 2005. Four basic symmetry types in the universal 7-cluster structure of microbial genomic sequences // *Silico Biology*. V.5. № 3. P.265-282.

РЕГУЛЯРНЫЕ ПЕРЕСТРАИВАЕМЫЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ С ТОПОЛОГИЕЙ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ГЛУБОКОГО ОБУЧЕНИЯ

А.Ю. Дорогов

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет
«ЛЭТИ», vaksa2006@yandex.ru

Аннотация. Рассматривается алгоритм построения сетевой топологии и обучения двумерных регулярных перестраиваемых преобразований применительно к задачам распознавания и обработки изображений. Построенная топология идеологически близка к топологиям свёрточных нейронных сетей глубокого обучения, но является регулярной с числом слоев, устанавливаемым факторным представлением размерностей изображения и выходной плоскости классов. Алгоритм обучения имеет аналитическое представление, является абсолютно устойчивым и сходится за конечное число шагов. Дополнительные плоскости существенно расширяют информационную емкость перестраиваемого преобразования. Управление плоскостями в режиме обучения реализуется числовыми кодами с регулярной структурой.

Ключевые слова: перестраиваемое преобразование, нейронная сеть, обучение, растровые изображения, плоскости нейронных слоев, ортогональные преобразования.

Введение

Регулярные перестраиваемые преобразования обладают уникальной возможностью аналитического представления топологии реализующей сети, что позволяет разработать алгоритмы обучения, абсолютно-сходящиеся за конечное число шагов. Типичным примером регулярного преобразования является алгоритм быстрого преобразования Фурье. Быстрые алгоритмы основаны на возможности факторизации преобразования в произведение слабо заполненных матриц. В перестраиваемых быстрых преобразованиях элементы матриц настраиваются, поэтому каждую слабо заполненную матрицу можно интерпретировать как слой нейронной сети, где синаптическими весами являются элементы матрицы. Это обстоятельство сближает класс быстрых преобразований с нейронными сетями. Отличительными особенностями быстрых перестраиваемых преобразований являются линейность преобразования и отсутствие входов смещений у нейронов. Регулярность обеспечивается ограничениями на выбор размерностей преобразования. В общем случае значение размерности должно быть представимо в виде произведения $N = p_0 p_1 \dots p_{n-1}$, где p_i - целые числа. Число n - определяет количество слоев регулярной сети. В отличие от полно связанных нейронных сетей, матрица слоя имеет много нулевых значений, а значимые элементы регулярно размещены в поле матрицы, образуя блоки, называемые нейронными ядрами. В терминологии быстрых алгоритмов ядро называется базовой операцией (например, операция «бабочка» для быстрого преобразования Фурье с $p_i = 2$). Размерности ядер в пределах i -го слоя одинаковы и определяются коэффициентом p_i . Благодаря регулярности топологию сети можно описать аналитически, это позволяет разработать алгоритмы обучения перестраиваемых преобразований, на основе принципа последовательной фрактальной фильтрации образов. Принципиальной особенностью этих алгоритмов является то, что они абсолютно сходятся за n шагов [1].

Анализ показывает, что аналитическое представление топологии регулярного преобразования, имеет дополнительные степени свободы, которые позволяют выйти за границы топологий быстрых преобразований и построить регулярные сети с дополнительными плоскостями, сохранив при этом возможность использования

абсолютно сходящихся алгоритмов обучения. При обучении дополнительные плоскости могут переключаться цифровыми кодами, образуя тесный конгломерат сетей, каждая из которых обучается к своему образу. В настоящей работе рассматривается двумерный вариант регулярных сетей с дополнительными плоскостями. Результаты легко редуцируются на одномерные представления и обобщаются на многомерные кубы данных.

Топология двумерных быстрых перестраиваемых преобразований

Обозначим через $F(U_y, U_x)$ матрицу изображения размерностью $N_y \times N_x$. При воздействии на изображение линейного преобразования $H(U_y, U_x; V_y, V_x)$ получается массив из $M_y \times M_x$ коэффициентов. Двумерное преобразование выполняется по правилу:

$$S(V_y, V_x) = \sum_{U_y=0}^{N_y-1} \sum_{U_x=0}^{N_x-1} F(U_y, U_x) H(U_y, U_x; V_y, V_x). \quad ((1))$$

Необходимым условием существования быстрого алгоритма является возможность мультипликативной декомпозиции значений входных и выходных размерностей преобразования в равное число сомножителей:

$$\begin{aligned} N_y &= p_0^y p_1^y \dots p_{n-1}^y, & M_y &= g_0^y g_1^y \dots g_{n-1}^y, \\ N_x &= p_0^x p_1^x \dots p_{n-1}^x, & M_x &= g_0^x g_1^x \dots g_{n-1}^x \end{aligned} \quad ((2))$$

Индексы x, y здесь означают принадлежность к осям координат исходного изображения, а значение n определяет число слоев в графе быстрого алгоритма. Для регулярных преобразований общего вида данное условие не является жестким ограничением, поскольку некоторые сомножители могут быть единичными. Тем не менее, чем больше число не единичных сомножителей, тем выше вычислительная эффективность алгоритма преобразования. Используя сомножители декомпозиций (2), координаты точек изображения представим в позиционной системе счисления со смешанными основаниями:

$$\begin{aligned} U_y &= \langle u_{n-1}^y u_{n-2}^y \dots u_1^y u_0^y \rangle, \\ U_x &= \langle u_{n-1}^x u_{n-2}^x \dots u_1^x u_0^x \rangle, \end{aligned} \quad ((3))$$

где вес m -го разряда определяется выражением $p_{m-1}^* p_{m-2}^* \dots p_1^* p_0^*$, а u_m^* - является разрядной переменной, принимающей значения $[0, p_m^* - 1]$ (звездочка здесь заменяет индексы x, y). Аналогично можно представить координаты спектральных коэффициентов в плоскости $[V_y, V_x]$:

$$\begin{aligned} V_y &= \langle v_{n-1}^y v_{n-2}^y \dots v_1^y v_0^y \rangle, \\ V_x &= \langle v_{n-1}^x v_{n-2}^x \dots v_1^x v_0^x \rangle, \end{aligned} \quad ((4))$$

где вес m -го разряда определяется выражением $g_{m-1}^* g_{m-2}^* \dots g_1^* g_0^*$, а v_m^* является разрядной переменной, принимающей значения $[0, g_m^* - 1]$.

Алгоритм быстрого преобразования обычно представляется в виде графа с топологией различного вида. Поразрядную форму удобно использовать для аналитического описания графа топологии быстрого алгоритма. Например, для топологии «Кули-Тьюки с прореживанием по времени» граф может быть описан в виде лингвистического предложения [1] (топологической модели):

$$\left[\langle u_{n-1}^* u_{n-2}^* \dots u_1^* u_0^* \rangle \langle u_{n-1}^* u_{n-2}^* \dots u_1^* v_0^* \rangle \dots \langle u_{n-1}^* u_{n-2}^* \dots u_{m+1}^* v_{m-1}^* v_{m-2}^* \dots v_0^* \rangle \dots \langle v_{n-1}^* v_{n-2}^* \dots v_1^* v_0^* \rangle \right],$$

где словами являются поразрядные представления координатных чисел, а буквами – имена разрядных переменных. Число слов в предложении равно $n+1$. Первое и последнее слова в предложении соответствуют координатам точек терминальных плоскостей из выражений (3) и (4). Промежуточные слова определяют координаты U_y^m, U_x^m и V_y^m, V_x^m в плоскостях внутренних слоев быстрого алгоритма. Для алгоритма с замещением значений выполняется условие:

$$U_y^{m+1} = V_y^m, \quad U_x^{m+1} = V_x^m. \quad ((5))$$

Граф топологии в слое m содержит базовые операции (ядра) $W_{i_x^m, i_y^m}^m(u_y^m u_x^m; v_y^m v_x^m)$, представляющие собой четырехмерные матрицы размерности $[p_y^m, p_x^m; g_y^m, g_x^m]$. Где поразрядные выражения индексов ядер слоя m для выбранной топологии имеют вид:

$$i_x^m = \langle u_{n-1}^x u_{n-2}^x \dots u_{m+1}^x v_{m-1}^x v_{m-2}^x \dots v_0^x \rangle, \quad i_y^m = \langle u_{n-1}^y u_{n-2}^y \dots u_{m+1}^y v_{m-1}^y v_{m-2}^y \dots v_0^y \rangle. \quad ((6))$$

Выражение (6) является аналитическим представлением системного инварианта быстрых алгоритмов [1]. В общем случае топологии для направлений x и y могут быть различными. Взаимосвязь между базовыми операциями определяется фактор-графом (структурной моделью быстрого преобразования), где каждой вершине соответствует нейронное ядро. Для выбранной топологии граф структурной модели описывается лингвистическим предложением:

$$\left[\langle u_{n-1}^* u_{n-2}^* \dots u_1^* \rangle \langle u_{n-1}^* u_{n-2}^* \dots u_2^* v_0^* \rangle \dots \langle u_{n-1}^* u_{n-2}^* \dots u_{m+1}^* v_{m-1}^* v_{m-2}^* \dots v_0^* \rangle \dots \langle v_{n-1}^* v_{n-2}^* \dots v_1^* v_0^* \rangle \right]$$

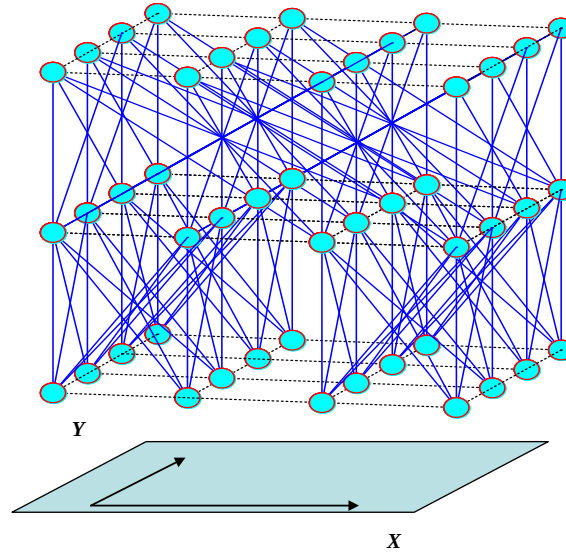


Рис. 4. Структурная модель двумерного быстрого преобразования.

Каждое слово в этом предложении определяет номер базовой операции i_*^m в слое m . Число слов в предложении равно n . На рис. 1 показана структурная модель быстрого двумерного преобразования для размерности изображения 8×8 . Входное изображение поступает на нижний слой, а спектральные коэффициенты получаются в верхнем слое. Вершинам модели соответствуют базовые операции (иначе называемые ядрами) размерности $[2,2;2,2]$. Ядро в слое m выполняет двумерное преобразование над пространственным блоком размером $p_y^m \times p_x^m$:

$$S^m(V_y^m, V_x^m) = \sum_{u_y^m} \sum_{u_x^m} F^m(U_y^m, U_x^m) W_{i_x^m, i_y^m}^m(u_y^m u_x^m; v_y^m v_x^m). \quad ((7))$$

Соответствия $U_*^m \leftrightarrow (i_*^m, u_*^m)$ взаимно однозначно определяются по лингвистическим предложениям топологической и структурной модели.

Мультипликативная декомпозиция элементов матрицы быстрого преобразования

Задание конкретных значений для всех разрядных переменных u_m^*, v_m^* (где m пробегает значения $0, 1, \dots, n-1$) определяет некоторый путь в топологическом графе между парой вершин начального и конечного слоя. Из однозначности поразрядного представления чисел следует, что такой путь единственен для каждого парного сочетания пространственных точек входной и выходной плоскости. Это обстоятельство позволяет получить удобное аналитическое выражение, связывающее элементы матрицы быстрого преобразования с элементами ядер. Из выражения (1) следует что

$$H(U_y, U_x; V_y, V_x) = \frac{\partial S(V_y, V_x)}{\partial F(U_y, U_x)}. \quad ((8))$$

Дифференцируя (8) по правилу дифференцирования сложной функции получим:

$$H(U_y, U_x; V_y, V_x) = \frac{\partial S^{n-1}}{\partial F^{n-1}} \frac{\partial F^{n-1}}{\partial S^{n-2}} \frac{\partial S^{n-2}}{\partial F^{n-2}} \dots \frac{\partial F^1}{\partial S^0} \frac{\partial S^0}{\partial F^0}.$$

Из условия (5) следует, что для всех m имеет место $\frac{\partial F^m}{\partial S^{m-1}} = 1$, а из (7), – что

$\frac{\partial S^m}{\partial F^m} = W_{i_x^m, i_y^m}^m(u_y^m u_x^m; v_y^m v_x^m)$. Таким образом получим, что каждый элемент четырехмерной матрицы преобразования H выражается через элементы ядер в виде произведения:

$$H(U_y, U_x; V_y, V_x) = W_{i_x^{n-1}, i_y^{n-1}}^{n-1}(u_{n-1}^y u_{n-1}^x; v_{n-1}^y v_{n-1}^x) W_{i_x^{n-2}, i_y^{n-2}}^{n-2}(u_{n-2}^y u_{n-2}^x; v_{n-2}^y v_{n-2}^x) \dots \dots W_{i_x^0, i_y^0}^0(u_0^y u_0^x; v_0^y v_0^x), \quad ((9))$$

где поразрядные выражения индексов ядер слоя m для выбранной топологии определяются выражением (6).

Мультипликативная декомпозиция двумерных изображений

Алгоритм мультипликативной декомпозиции основан на идеях фрактальной фильтрации [1] (в терминологии свёрточных нейронных сетей эта операция называется пулингом). Для двумерного случая фрактальная фильтрация представляет собой кратно-масштабную обработку изображений, последовательно сжимающую его размеры вплоть до единственной точки. Схему фрактальной фильтрации можно представить в виде пирамиды показанной на рис 2. Основанием пирамиды является исходное изображение, $F(U_y, U_x)$ для которого аргументы U_y и U_x представлены в позиционной системе счисления (см. выражение (3)). В этом позиционном представлении зафиксируем все разряды кроме двух младших u_0^y и u_0^x . Если варьировать эти разряды по всем возможным значениям, то получим двумерную выборку размером $p_0^y \times p_0^x$. Под фрактальным фильтром понимается произвольный функционал Φ , действующий на этой выборке. Формально это можно записать в виде выражения:

$$F_1\left(\langle u_{n-1}^y u_{n-2}^y \cdots u_1^y \rangle, \langle u_{n-1}^x u_{n-2}^x \cdots u_1^x \rangle\right) = \Phi_{(u_0^y, u_0^x)} \left[F\left(\langle u_{n-1}^y u_{n-2}^y \cdots u_1^y u_0^y \rangle, \langle u_{n-1}^x u_{n-2}^x \cdots u_1^x u_0^x \rangle\right) \right]$$

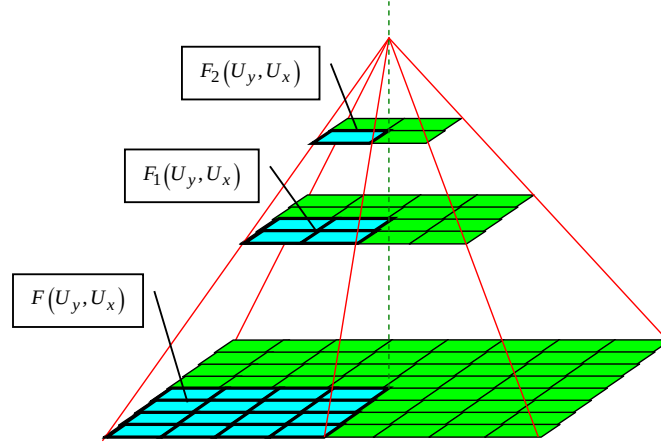


Рис. 5. Схема фрактальной фильтрации изображения

Очевидно, что изображение F_1 будет кратно уменьшенным по размерам по отношению к исходному изображению. Функционалом, например, может быть правило вычисления среднего значения выборки или ее медианы. Исходное изображение теперь можно формально представить в виде произведения:

$$F\left(\langle u_{n-1}^y u_{n-2}^y \cdots u_1^y u_0^y \rangle, \langle u_{n-1}^x u_{n-2}^x \cdots u_1^x u_0^x \rangle\right) = F_1\left(\langle u_{n-1}^y u_{n-2}^y \cdots u_1^y \rangle, \langle u_{n-1}^x u_{n-2}^x \cdots u_1^x \rangle\right) f_{j_y^0 j_x^0}(u_0^y, u_0^x),$$

где $f_{j_y^0 j_x^0}(u_0^y, u_0^x)$ - набор двумерных функций-множителей, зависящих от разрядных переменных u_0^y и u_0^x , а индексы j_y^0, j_x^0 выделяют двумерную функцию из этого набора. Значение этих индексов устанавливается равным значениям аргументов изображения F_1 , т.е. $j_y^0 = \langle u_{n-1}^y u_{n-2}^y \cdots u_1^y \rangle$ и $j_x^0 = \langle u_{n-1}^x u_{n-2}^x \cdots u_1^x \rangle$. Для получения функций множителей достаточно выполнить скалярное деление изображения F на изображение F_1 при варьировании всех разрядных переменных. Изображение F_1 в свою очередь также может быть представлено как произведение изображения F_2 на множители из набора $f_{j_y^1 j_x^1}(u_1^y, u_1^x)$. Повторяя многократно операцию фрактальной фильтрации и разложения, достигнем вершины пирамиды изображений и получим мультипликативную декомпозицию:

$$\begin{aligned} F\left(\langle u_{n-1}^y u_{n-2}^y \cdots u_1^y u_0^y \rangle, \langle u_{n-1}^x u_{n-2}^x \cdots u_1^x u_0^x \rangle\right) &= f_{j_y^{n-1} j_x^{n-1}}(u_{n-1}^y, u_{n-1}^x) f_{j_y^{n-2} j_x^{n-2}}(u_{n-2}^y, u_{n-2}^x) \cdots \\ &\cdots f_{j_y^1 j_x^1}(u_1^y, u_1^x) f_{j_y^0 j_x^0}(u_0^y, u_0^x), \end{aligned} \quad (10)$$

где индексы сомножителей определяются выражениями:

$$j_x^m = \langle u_{n-1}^x u_{n-2}^x \cdots u_{m+1}^x \rangle, \quad j_y^m = \langle u_{n-1}^y u_{n-2}^y \cdots u_{m+1}^y \rangle. \quad (11)$$

Настройка регулярных приспособленных преобразований

Преобразование назовем приспособленным к изображению, если одна из функций преобразования с координатами (V_y, V_x) совпадает с данным изображением. Очевидно, что значение скалярного произведения изображения с этой функцией будет максимальным среди прочих коэффициентов спектральной области преобразования. В

этом заключается цель настройки преобразования. Значение координат (V_y, V_x) функции в спектральной плоскости назовем точкой приспособления.

Приспособление может быть осуществлено и к нескольким изображениям. Если сравнить полученную мультипликативную декомпозицию изображения с декомпозицией быстрого преобразования (9), то нетрудно заметить, что они подобны. Причем множество индексов ядер в каждом слое покрывает множество индексов функций-сомножителей. Отсюда следует конструктивный вывод, что быстрое преобразование будет приспособлено, к изображению, когда ядра преобразования будут приспособлены к функциям-сомножителям разложения (10). Настройка ядер преобразования определяется правилом:

$$W_{i_x^m, i_y^m}^m(u_m^y u_m^x; v_m^y v_m^x) = f_{j_x^m, j_y^m}(u_m^y, u_m^x). \quad (12)$$

Сравнивая выражения (6) для i_x^m, i_y^m и (11) для j_x^m, j_y^m , можно сделать вывод, что количество компонентов в мультипликативном разложении изображения (10) и количество ядер преобразования совпадают для слоя $m = 0$ (т.е. имеют место равенства $i_x^0 = j_x^0$ и $i_y^0 = j_y^0$), и меньше числа ядер для всех остальных слоев. Поэтому при настройке часть степеней свободы преобразования не используется. Свободно варьируемыми переменными являются разрядные переменные $v_0^y v_0^x$, следовательно, ядро может быть приспособлено одновременно к $D = g_0^y g_0^x$ изображениям. Остальные слои имеют большее число степеней свободы и не могут ухудшить это значение. Таким образом, можно заключить, что быстрое преобразование можно приспособить не более чем к D различным изображениям. На этом возможности данного алгоритма настройки исчерпываются. Значение D назовем уровнем приспособленности преобразования.

Регулярные преобразования с дополнительными плоскостями

Оставаясь в рамках рассмотренной топологии, не использованные при настройке степени свободы можно доопределить несколькими способами (более детально см. [1]). В этом случае уровень приспособленности не меняется, но при этом видоизменяются остальные функции преобразования.

Рассмотрим альтернативное решение, которое заключается в расширении топологии дополнительными плоскостями, так чтобы в новой топологии использовать оставшиеся степени свободы для увеличения уровня приспособленности.

Уточним вначале правило выбора настраиваемых ядер для прежней топологии. Выразим координаты точки приспособления в позиционной системе счисления, обозначив разрядные переменные через y и x :

$$V_y = \langle y_{n-1}, y_{n-2} \dots y_0 \rangle, \quad V_x = \langle x_{n-1}, x_{n-2} \dots x_0 \rangle \quad (13)$$

Фиксированные значения разрядных переменных y_m, x_m соответствуют переменным v_m^y, v_m^x , поэтому (как это следует из (6)) при выборе данной точки приспособления, согласно правилу (12) должны настраиваться только ядра с номерами:

$$\begin{aligned} i_x^m &= \langle u_{n-1}^x u_{n-2}^x \dots u_{m+1}^x x_{m-1} x_{m-2} \dots x_0 \rangle, \\ i_y^m &= \langle u_{n-1}^y u_{n-2}^y \dots u_{m+1}^y y_{m-1} y_{m-2} \dots y_0 \rangle. \end{aligned} \quad ((14)$$

В частности для $m = 0$ имеем:

$$i_x^0 = \langle u_{n-1}^x u_{n-2}^x \dots u_{m+1}^x \rangle, \quad i_y^0 = \langle u_{n-1}^y u_{n-2}^y \dots u_{m+1}^y \rangle.$$

Т.е. независимо от выбора точек приспособления все ядра нулевого слоя всегда должны настраиваться. При этом уровень приспособленности преобразования ограничен значением D .

Для увеличения уровня приспособленности введем в каждом слое преобразования дополнительные плоскости, структурно-копирующие основную плоскость слоя. Номера дополнительных плоскостей в пределах слоя определим правилом:

$$\pi_m = \langle x_{n-1}x_{n-2} \dots x_{m+1}, y_{n-1}y_{n-2} \dots y_{m+1} \rangle \quad (15)$$

Очевидно, что максимальное количество дополнительных плоскостей будет в нулевом слое, а по мере увеличения номера слоя количество дополнительных плоскостей будет уменьшаться, и в последнем слое получим $\pi_{n-1} = \langle \rangle$, т.е. дополнительных плоскостей не будет совсем. Таким образом, в новой топологии плоскость последнего слоя останется прежней, а в младших слоях появятся дополнительные плоскости. Поскольку правило порождения новых плоскостей не противоречит условию (14), то для настройки ядер преобразования можно использовать прежнее правило (12), расширив его для дополнительных плоскостей:

$$W_{i_x^m, j_y^m}^m \langle \pi_m \rangle (u_m^y u_m^x; v_m^y v_m^x) = f_{j_x^m, j_y^m}^k (u_m^y, u_m^x). \quad (16)$$

Индекс k в правой части нумерует точку приспособления. Для $m=0$ имеем $i_x^0 = j_x^0$ и $i_y^0 = j_y^0$, варьируемыми переменными в левой части являются номер плоскости $\pi_0 = \langle x_{n-1}x_{n-2} \dots x_1, y_{n-1}y_{n-2} \dots y_1 \rangle$ и разрядные переменные $v_0^y v_0^x$. Вместе они покрывают весь диапазон координат выходной плоскости. Этому диапазону отвечают возможные значения индекса k в правой части (16). Остальные слои не ухудшают степень приспособленности. Таким образом, преобразование с дополнительными плоскостями может быть приспособлено к $D_\pi = M_y \times M_x$ изображениям, т.е. каждой точке выходной плоскости будет соответствовать один опорный образ.

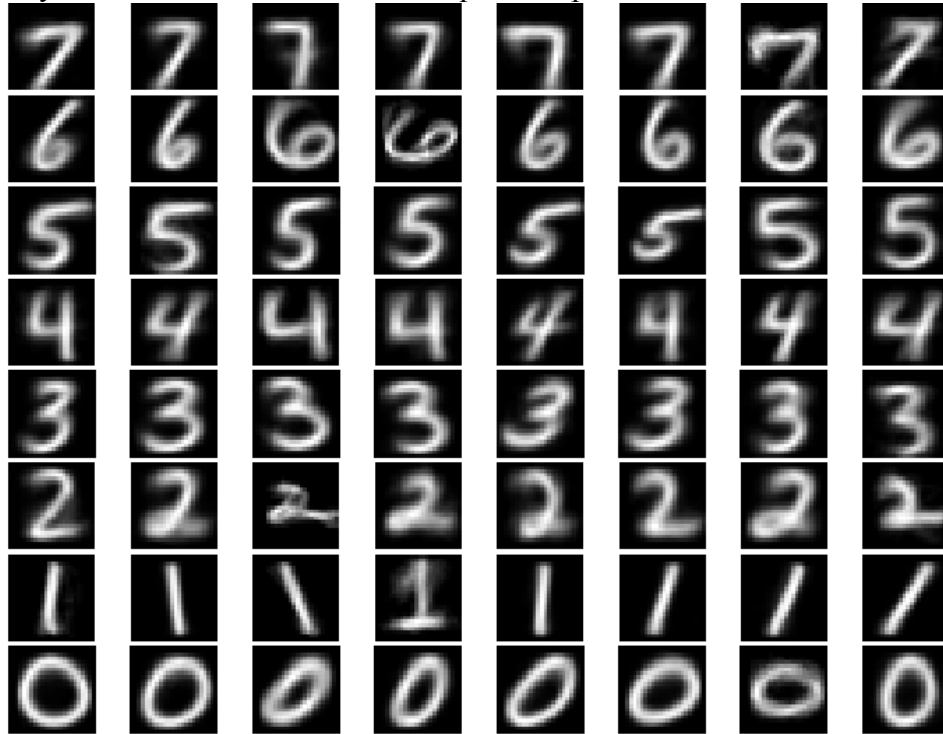


Рис. 6. Двумерные функции приспособленного преобразования

На рис. 3 показаны двумерные функции преобразования приспособленного к усредненным образам рукописных цифр [2]. Для данного преобразования выбрано:

$$N_y = N_x = p_0 p_1 p_2 = 4 \cdot 3 \cdot 2 = 24, \quad M_y = M_x = g_0 g_1 g_2 = 2 \cdot 2 \cdot 2 = 8.$$

Настройка преобразования выполнена для подклассов рукописных цифр от 0 до 7. В общем случае все функции преобразования могут быть различны и соответствовать разным классам, т.е. в максимальном варианте данное преобразование может быть настроено на классификацию 64 различных классов.

При выполнении преобразования входное изображение поступает одновременно на все входные плоскости. Если изображение отвечает одной из точек приспособления, то значение этого коэффициента спектральной плоскости будет максимально. Результат выполнения преобразования над образом цифры «0» показан на рис. 4.

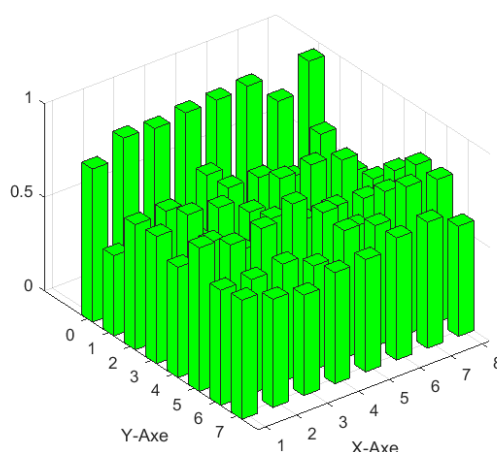


Рис. 7. Результат выполнения двумерного преобразования

Наглядно видно, что коэффициенты отвечающие подклассам цифры “0” имеют максимальные значения.

Выводы

Регулярные перестраиваемые преобразования обладают уникальной возможностью аналитического представления топологии реализующей сети, что позволяет разработать алгоритмы обучения, абсолютно-сходящиеся за конечное число шагов. В работе показано, что реализующая топология легко расширяется дополнительными плоскостями, при этом число распознаваемых образов кардинально возрастает и покрывает все элементы выходной плоскости. Причем расширение топологии не нарушает принципа построения обучающего алгоритма. Построенная топология идеологически близка к топологиям свёрточных сетей глубокого обучения [3], но является регулярной. Представленное решение позволяет дать конструктивный ответ на принципиальные вопросы нейронных сетей глубокого обучения: Как выбрать топологию и как сократить время обучения сети.

Список литературы

1. Дорогов А.Ю. Теория и проектирование быстрых перестраиваемых преобразований и слабосвязанных нейронных сетей. СПб.: «Политехника», 2014. 328 с.
2. The MNIST database of handwritten digits. Yann LeCun, and other. Режим доступа: <http://yann.lecun.com/exdb/mnist/index.html>
3. LeCun et al., Gradient-Based Learning Applied to Document Recognition. - Proc. IEEE, november 1998, pp.1-46.
4. Белман Р. Введение в теорию матриц.- М.: Наука, 1976.-352с.

КРИТЕРИИ И ЭФФЕКТИВНОСТЬ ПРИРОДОПОДОБИЯ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ НЕРАВНОВЕСНЫХ СИСТЕМ

Ю. В. Коловский

¹Сибирский федеральный университет,
Институт инженерной физики и радиоэлектроники,
базовая кафедра «Инфокоммуникации», kolovskiuv@yandex.ru

Основа современной науки и технологий — полагание пространства дискретно дифференцированным, в виде обозначенных и ценностно определяющих элементов структуры; (**структурная иерархия**). Когнитивные науки и технологии опираются на альтернативный подход — рассмотрение предметности в качестве **аструктурной**. Опыт создания и развития систем искусственного интеллекта (СИИ), практически всегда, указывает на то, что **функция и структура ортогональны** [1-3]. Данное предположение находит постоянное подтверждение в гиперпространстве информационной реальности. Развитие СИИ расширяет (видоизменяет) смысловое (сущностное) содержание многих классических понятий и представлений, актуализирует проблему аксиоматики, постулирования (Рис.1.). Важна задача постулирования квазиортогональности количества и качества в решении сложных современных научно-технологических проблем.

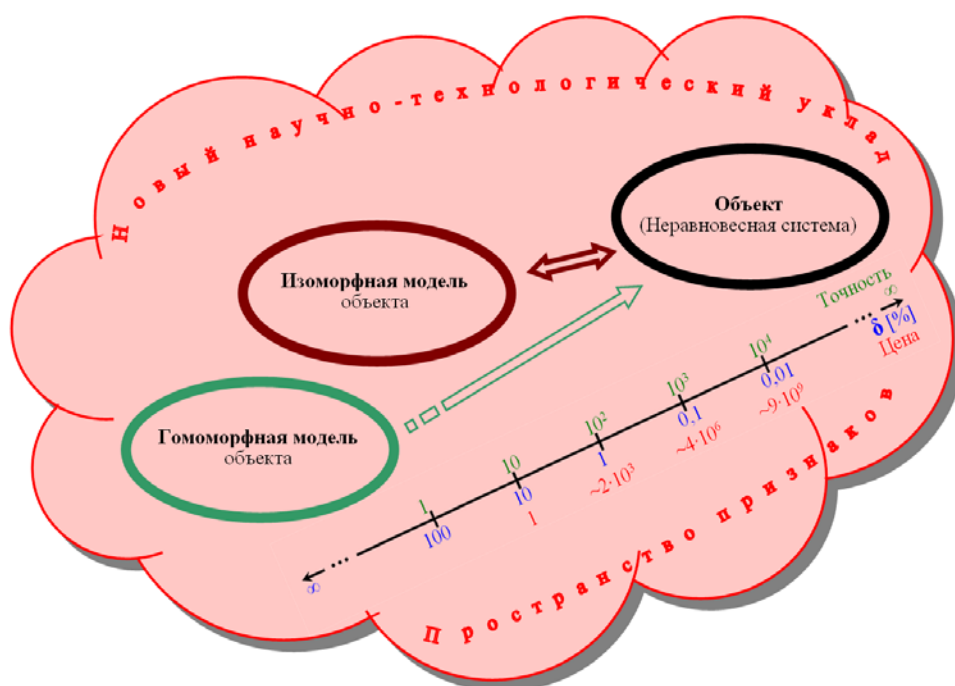


Рис. 1. Структура проблем НС

В связи с постоянно ускоряющимся развитием информационных технологий, неуклонно возрастает сложность задач моделирования, в целом, и в первую очередь неравновесных систем (НС). Наглядной иллюстрацией к вышеизложенному служит совмещенная цифровая шкала на рисунке 1., отражающая взаимосвязь базовых критериев качества: точность (погрешность) моделирования НС и цена решения. Качество и точность, в обыденном представлении, принято считать тождественными понятиями. Вся история развития науки и технологий, по сути, подтверждает этот тезис.

Количественная взаимосвязь данных шкал обусловлена стандартными описаниями и реальными практическими данными в области приборостроения.

Точность описания объекта $\equiv 1 / \text{Погрешность} \rightarrow \infty$ (Истина, Эталон, Идеал).

Постоянно подтверждаемая закономерность: «Результат в два раза точнее, стоит в десять раз дороже».

Качество (квалиметрия) моделирования, в координатном пространстве изоморфизма – гомоморфизма, в рамках классического подхода, часто, в силу сложности, не поддаётся описанию (осмыслению) в парадигме структурализма. Контроль качества конвергентных, когнитивных технологий моделирования, по названной причине, при постоянно возрастающей сложности, многомерности, в соответствии, с законом диалектики переходит в новое качество. Для повышения эффективности моделирования, научных и технологических решений, вынужденно, происходит переоценка, уточнение и систематизация критериев качества [1,4,5].

В докладе: рассматриваются проблемы природоподобия СИИ, в приложении к моделированию НС; анализируются перспективы аналогового ренессанса и вопросы точности воспроизведения структур СИИ [2].

Представлены результаты математического моделирования, функциональных характеристик НС. В русле природоподобия, взят на вооружение термин «поведение» применительно к сложным техническим системам [4-8], артикулирующий взаимодействие с окружающей средой, включающее динамику движения и ориентацию по отношению к этой среде.

Ещё одно важное понятие «идентификация», это комплекс математических описаний динамики поведения НС, по данным наблюдений, мягкого диагностирования, прогнозирования и прогностического, когнитивного управления (самоуправления) поведением с учётом особых эмерджентных свойств [9], в том числе, в частотной и временной области, физических процессов под действием теплового поля, силы тяжести и т.п. [10,11].

Природоподобие при решении комплекса проектно-технологических проблем, реализуется за счёт: гибридных интеллектуальных систем (Hybrid Intelligent Systems); полевого гибридного процессинга [12]; архитектуры ИНС, определяемой межузловыми связями (Рис.2.) не реализуемой на базе существующего технологического уклада; авангардного инжиниринга в когнитивных технологиях и схемотехнике нашедшего опору в метаматериальном пространстве (Рис.3.)

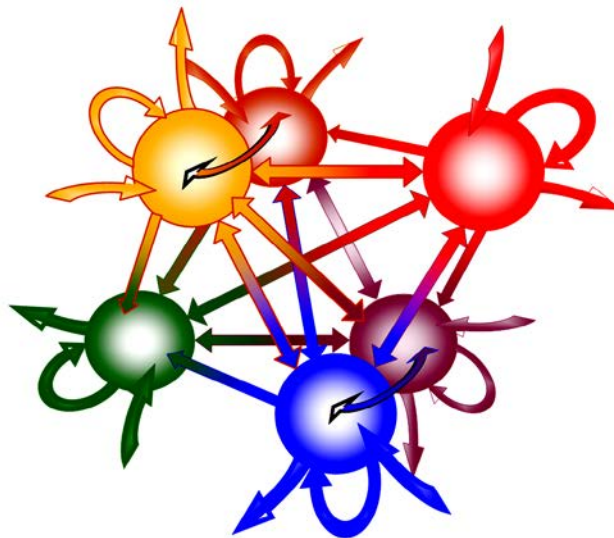


Рис. 2. Структура полносвязной сети

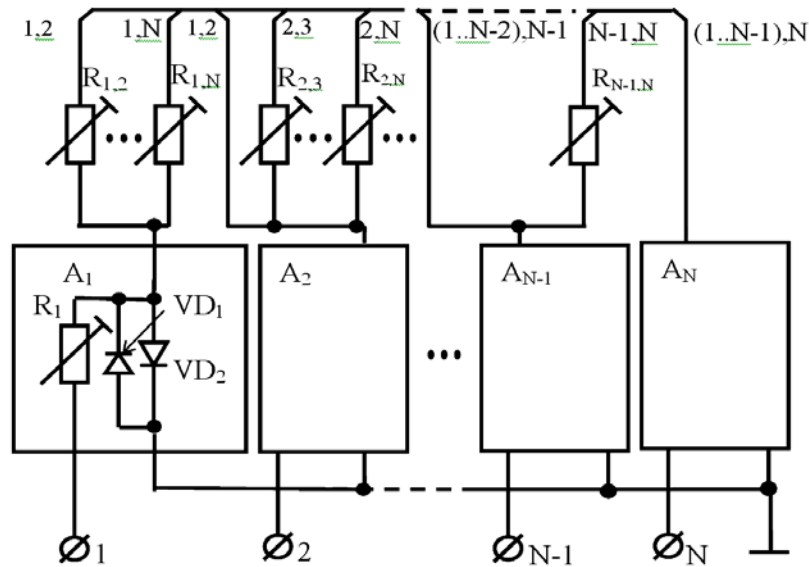


Рис. 3. Принципиальная схема пассивной аналоговой полносвязной нейросети

НС в процессе создания и последующей эксплуатации, в связи с непреодолимыми, в рамках классического подхода, проблемами метрологического обеспечения, в полной мере должен быть задействован инструментарий квалиметрии [1]. Многовариантность решения сложных проблем - поиск **паллиатива**, с помощью когнитивных технологий, за счёт высокого параллелизма. Один из очевидных примеров природоподобия, высокого параллелизма – стереофотограмметрия обеспечивающая эффективность контроля поведения и управления НС [8]. Аппаратная реализация стереофотограмметрического комплекса имеет ряд преимуществ перед сканирующими приборами: более высокое быстродействие, меньшие массово-габаритные характеристики, более высокая надежность и т.д.[4]. Эффективность фотограмметрии объясняется возможностью одномоментной регистрации стереообраза объекта диагностирования и управления, с последующим когнитивным распознаванием (многомерное определение координат десятков тысяч элементов) образа объекта.

В докладе представлены результаты математического моделирования, подтверждающие актуальность проблем идентификации и диагностики[2,3]. Исходя из полученных результатов, сделаны выводы о необходимости пересмотра и верификации ряда комплексных характеристик поведения сложных систем. Рассмотрены методологические и технологические проблемы аппаратной реализации НС.

Ограниченный функционал современных технологий, по сравнению, с живой природой проявляется в отсутствии самовоспроизведения, саморазвития, самообеспечения этапов жизненного цикла.

Перезагрузка информационная — это когнитивные гибридные мягкие вычисления (Hybrid Soft Computing); предсказательное моделирование, интеллектуальное /адаптивное поведение; соображающее, осмысливающее управление (Control Intelligence). Искусственный интеллект, создаваемый по образу и подобию человеческого, вбирает в себя и преумножает многие свойства «прототипа». Например, ярко проявляется проблема когнитивного интерфейса — инфокоммуникационный циклический процесс размывания, искажения смыслов. Слышим, видим, ощущаем одно

→ воспринимаем другое ↔ осознаём нечто третье (непонимание) ↔ изрекаем четвёртое ↔ делаем пятое. Смягчение названных противоречий, обеспечивает когнитивный контроль поведения, необходимый элемент рекуррентного процесса адаптации, самоуправления технической системой (ТС), включает в себя комплекс математических описаний динамики поведения ТС, по данным наблюдений и мягкого диагностирования, в частотной и временной области, к примеру, физических процессов под действием теплового поля, силы тяжести и т.п.

Список литературы

1. Коловский, Ю. В. Метрология, стандартизация и технические измерения: Учебн. для вузов / Ю. В. Коловский. – Красноярск: ИПК СФУ, 2010. – 462 с.
2. Коловский Ю. В. Методика оценки эффективности квалиметрических технологий в когнитивной радиосвязи // Успехи современной радиоэлектроники. 2016. № 11. С. 248-252.
3. A.N. Gorban, I.Yu. Tyukin, D.V. Prokhorov, K.I. Sofeikov, Approximation with random bases: Pro et Contra, Information Sciences 364–365, 129–145 (2016), (and 41 references there)
4. Коловский Ю. В., Барцев С.И., Охонин В.А., Хлебопрос Р.Г. Возможности физической реализации быстродействующих нейросетевых микропроцессоров. // Сб.: Системные проблемы качества, математического моделирования и информационных технологий Мат. Междунар. конф. и Российской научной школы. 2000. С. 68-72.
5. Коловский Ю. В. Методология когнитивного контроля поведения сложных технических систем // Сложные системы в экстремальных условиях: Докл. XVIII Всерос. симпозиума с междунар. участием – Красноярск : СФУ, 2016. С. 46.
6. Коловский Ю. В. Автономный комплекс контроля и управления поведением технического объекта на примере антенной системы космического аппарата // Тр. междунар. конф. «Решетневские чтения». Т. 1. – Красноярск: СибГАУ, 2013. С. 227-229.
7. Kolovski Y. V., Ten V. P. New Developments of Methods of Highly Precision Measurements of 2 nd Order Deviation Parameters of Surface Shape // Conference ITT-98 / Iowa State University, Ohio, USA, 1998, p. 383-387.
8. Коловский Ю. В. Интеллектуальные системы функциональной диагностики и управления бортовыми гибридными зеркальными антеннами // Тр. междунар. конф. по мягким вычислениям и измерениям, т. 2. С.-Пб., Изд-во СПбГЭТУ, 2003.С. 63-66.
9. Коловский Ю. В. Методы повышения точности определения некруглости крупногабаритных деталей // Метрология. 1974. № 11. С. 11-17.
10. Бикеев Е. В., Коловский Ю. В. Конвергентные технологии в когнитивной радиосвязи // Системы связи и радионавигации: Сб. тез. II ВНТК Шабанов, В.Ф. (ред.) / Красноярск: АО «НПП Радиосвязь», 2015. С. 253–256.
11. Бикеев Е. В., Коловский Ю. В. Орбитальный контроль эксплуатационных характеристик антенн с крупногабаритными рефлекторами космических аппаратов // Решетневские чтения: СибГАУ. Красноярск, 2015, Ч.1, № 19. с.72-74.
12. Коловский Ю. В., Моренко П.В. Полевой нейропроцессор. Современные проблемы радиоэлектроники / Сб. науч. тр. ВНТК. СФУ, Красноярск, 2013. С. 343-347.

ИЗМЕРЕНИЙ ТЕМПЕРАТУРЫ В ОЗЕРЕ ШИРА В ЛЕТНИЙ ПЕРИОД МЕТОДОМ ГЛАВНЫХ И НЕЗАВИСИМЫХ КОМПОНЕНТ

Л.А.Компаниец^{1,2}, О.С.Володько^{1,2}

¹Институт вычислительного моделирования СО РАН, kla@icm.krasn.ru

²Сибирский федеральный университет, osv@icm.krasn.ru

Необходимым условием сохранения экологического равновесия открытых водоёмов, в частности озёр, является постоянный мониторинг основных гидрофизических параметров температуры, скорости течения, скорости ветра и т.д. В настоящее время накоплено множество данных измерений для озера Шира, в частности, данных для температуры.

Гидрофизические процессы имеют сложную структуру, поэтому для их анализа используются различные методы статистической обработки данных.

В настоящее время широкую популярность приобрели методы анализа данных через выделение главных и независимых компонент.

Теоретическое обоснование метода главных компонент приведено в работах [1, 2].

Анализ методом главных компонент проводится для различных случаев, в том числе для гидрофизических величин таких как, например, скорость, температура, солёность [3-6].

Анализ независимых компонент [7-9] связан с проблемой разделения смесей сигналов с априори неизвестными характеристиками и в настоящее время широко используется в медицине и биологии для анализа электроэнцефалограмм [10-11], как способ устранения шума или выделения артефактов [12] и в программах для распознавания лиц [13].

В данной работе излагается опыт применения метода главных и независимых компонент к измерениям температуры в озере Шира летом 2015 г.

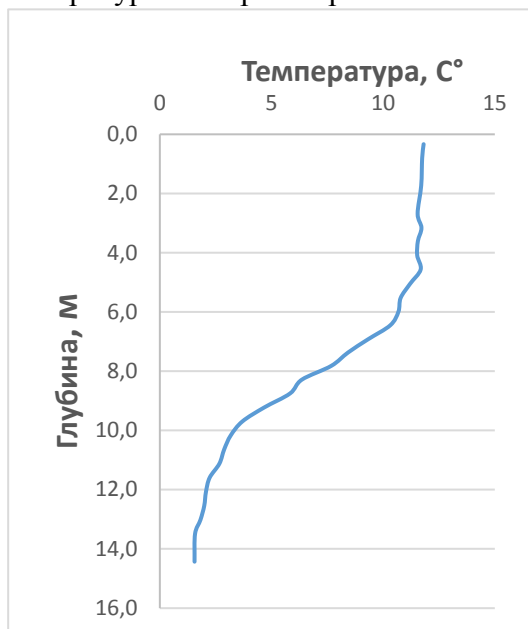


Рис.1. Усредненная за 6 часов дневная температура на разных горизонтах.

Был взят промежуток времени температуры в 8 дней с 31.05.15 - 07.06.15. Измерения проводились с промежутком 0,5 минуты на 28 горизонтах по глубине: 0,3 м., 0,8 м., 1,7 м., 2,7 м., 3,2 м., 3,6 м., 4,1 м., 4,6 м., 5,0 м., 5,5 м., 6,0 м., 6,4 м., 6,9 м., 7,4 м.,

7,8 м., 8,3 м., 8,7 м., 9,2 м., 9,7 м., 10,2 м., 10,6 м., 11,1 м., 11,6 м., 12,1 м., 12,5 м., 13,0 м., 13,5 м., 14,4 м.

На рис. 1 и 2 представлены средняя температура за шесть часов и температура на 28 горизонтах за весь период наблюдений.

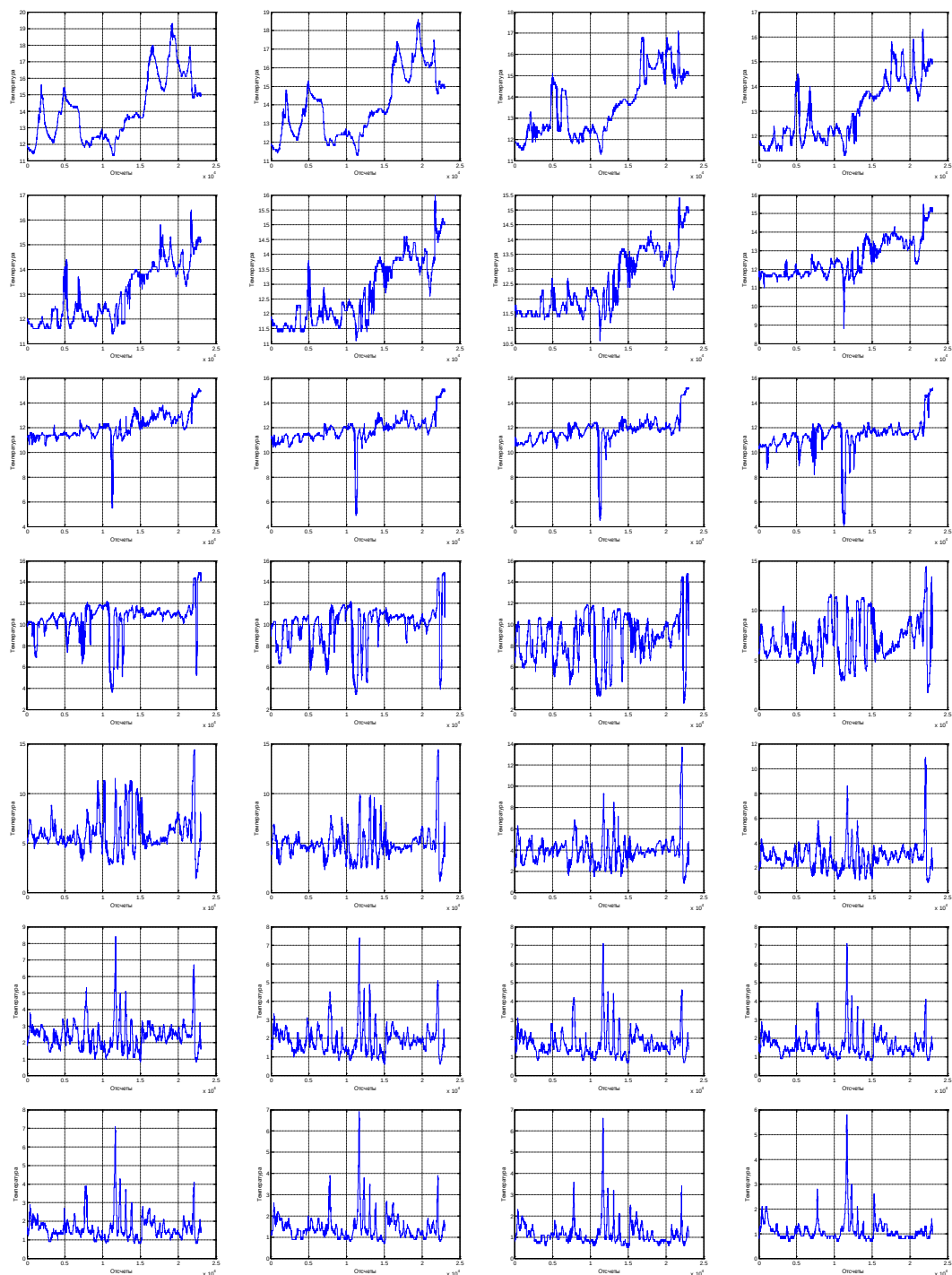


Рис.2. Измерения температуры на разных горизонтах. По горизонтальной оси отложены отсчеты (1 отсчет – 30 секунд).

Из рис. 2 видно, что структура данных чрезвычайно сложна, т.к. на изменение температуры влияют различные процессы: сезонное изменение температуры, суточные колебания, внутренние волны.

Две особенности поведения температуры выделяются явно. Это в целом возрастание по времени температуры в верхних слоях (первые 11 рисунков) и масштабные изменения по глубине: температура меняется от девятнадцати градусов на поверхности до одного градуса на дне.

Применим к этим измерениям метод главных и независимых компонент.

Два анализируемых метода представляют данные для температуры $T(z_i, t_k)$, где $t_k (k = 1, \dots, K)$ и $z_i (i = 1, \dots, N)$ – переменные по времени и пространству соответственно, в виде суммы произведений двух сомножителей, один из которых зависит от времени.

Для применения метода главных компонент стандартным образом определяется матрица коэффициентов корреляции

$$R(z_i, z_j) = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K T(z_i, t_k) T(z_j, t_k)$$

и находятся ее собственные векторы $\phi_n(z_i)$ и собственные значения λ_n . Поле температур T тогда записывается как

$$T(z_i, t_k) = \sum_{n=1}^N E_n(t_k) \phi_n(z_i),$$

$$E_n(t_k) = \sum_{i=1}^N \phi_n(z_i) T(z_i, t_k)$$
(1)

Если ранжировать слагаемые в соответствии с убыванием положительных собственных значений λ_n , то остается произвол в знаках для $E_n(t_k)$ и $\phi_n(z_i)$.

Метод независимых компонент – это метод обработки данных, позволяющий выделить статистически независимые компоненты, имеющие негауссово распределение. В самой простой постановке имеем N различных случайных векторов $T_i(t_k)$, $i = 1, \dots, N$, представляющих из себя линейные комбинации из N статистически независимых векторов $s_m(t_k)$, $m = 1, \dots, N$. Решение поставленной задачи ищется в виде

$$T(z_i, t_k) = AS$$

где A – постоянная невырожденная матрица $N \times N$, называемая матрицей смешивания, матрица A и векторы s_m неизвестны и для их нахождения используется итерационный процесс.

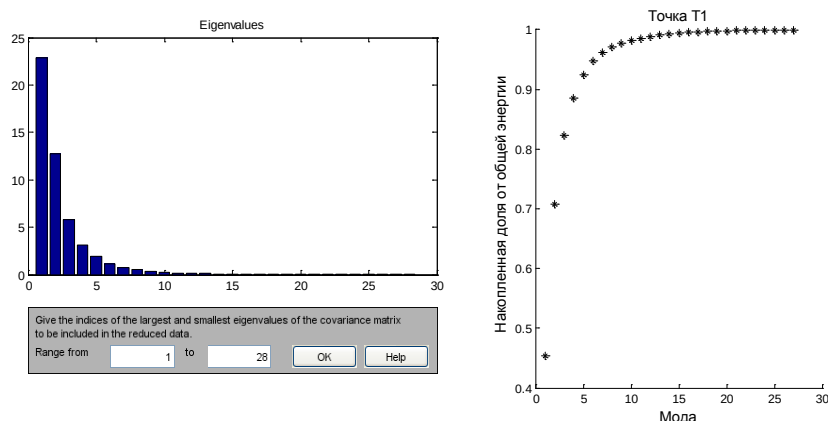


Рис. 3. Собственные значения ковариационной матрицы, накопленная доля от общей дисперсии.

В обоих случаях получаем сумму N слагаемых, зависящих от времени компонент, в первом случае они независимы, а во втором статистически независимы.

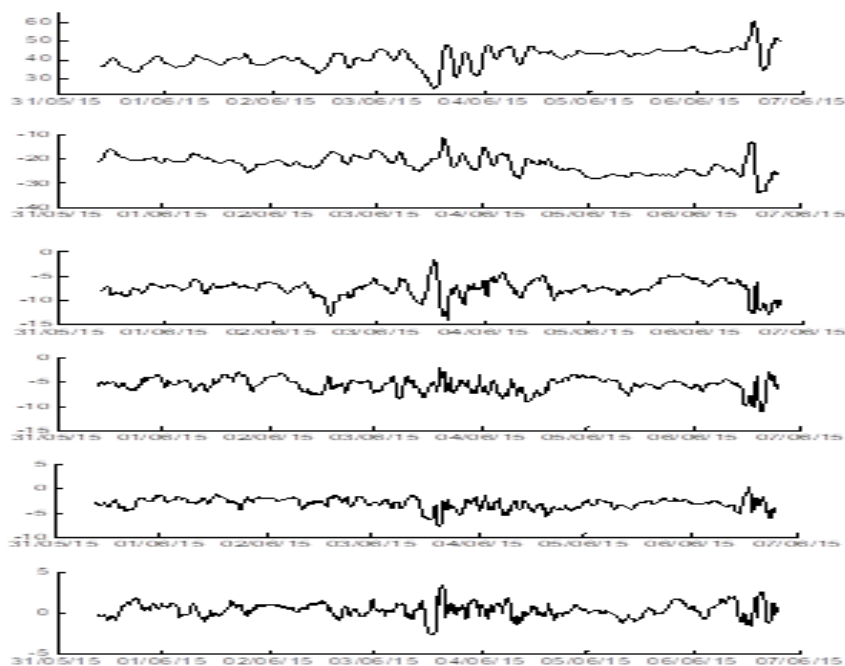


Рис. 4. Первые семь модальных коэффициентов (главных компонент).

Если в методе главных компонент E_n привязаны к пространственным координатам, то в методе независимых компонент S_m определяются с точностью до порядка и знака.

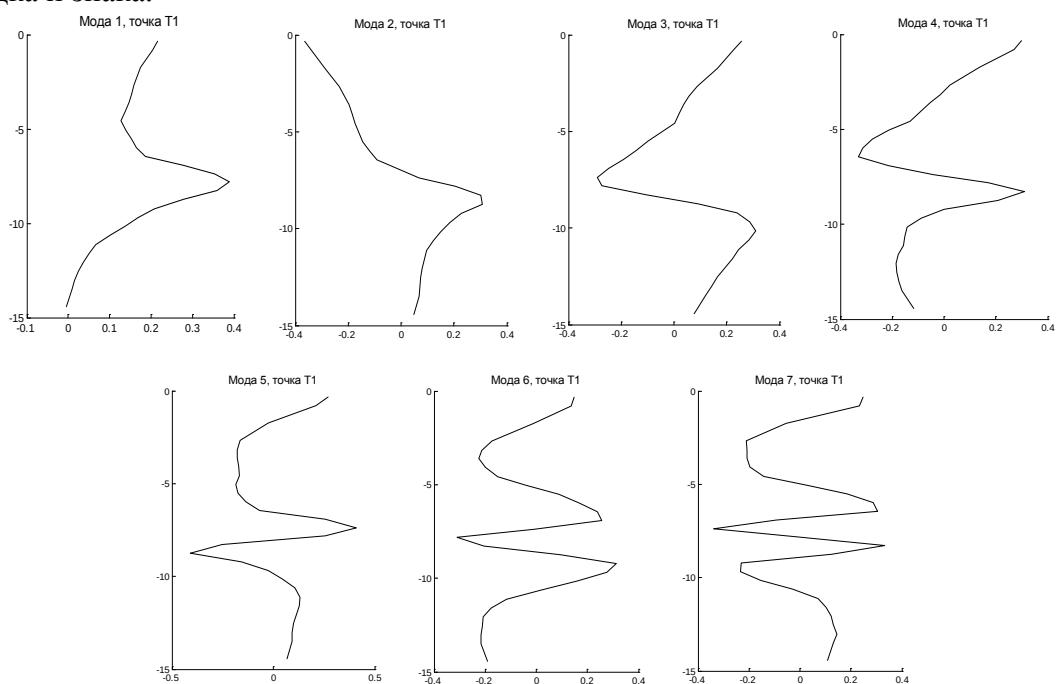


Рис. 5. Первые семь мод

В наших исследованиях использовалась система Matlab для метода главных компонент и программа FastICA (Fast fixed-point algorithm for Independent Component Analysis) [14], написанная в системе Matlab для метода независимых компонент.

Распределение собственных значений ковариационной матрицы представлено на рис. 3.

Первая мода аккумулирует 45% общей дисперсии. Для восстановления структуры температуры достаточно семи главных компонент. На рис. 4 и 5 изображены первые семь модальных коэффициентов (главные компоненты) и соответствующие им моды, на рис. 6 восстановленные по семи главным компонентам и исходные данные на первых трех горизонтах 0,3 м, 0,8 м, 1,7 м.

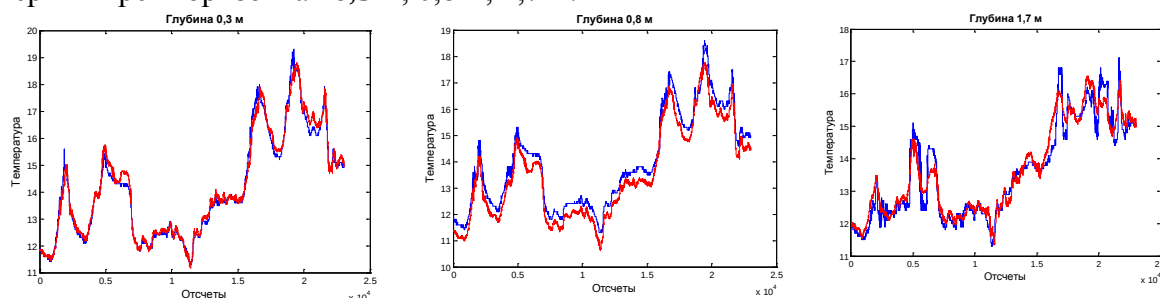
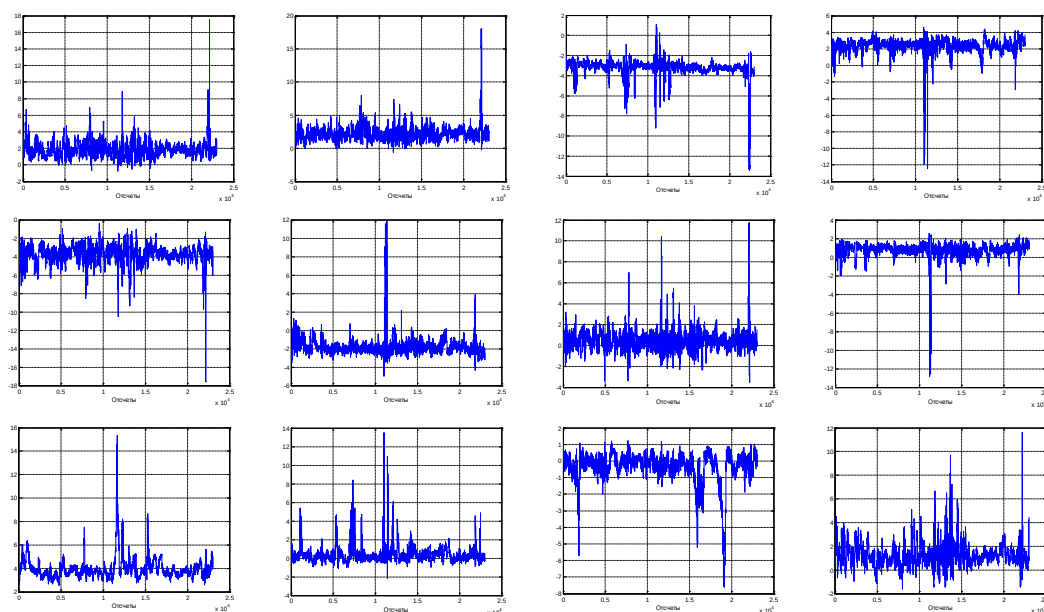


Рис.6. Восстановленные по семи главным компонентам данные.

Синяя линия — исходные данные температуры, красная линия — восстановленные.

При анализе первого слагаемого в формуле (1) получаем, что значения температуры за заданный период (8 дней) будут на всех глубинах положительные, кроме одной точки на дне, где значение будет отрицательное. Это противоречит данным наблюдений. Увеличение периода наблюдений до трех недель дает при учете только первой главной компоненты положительные значения на всех глубинах включая дно, для меньших периодов измерений приходится рассматривать сумму большего количества слагаемых (шесть).

Метод независимых компонент для данного измерения дает матрицу смешения A размерности 28×28 и 28 независимых компонент s_m , изображенных на рис. 6.



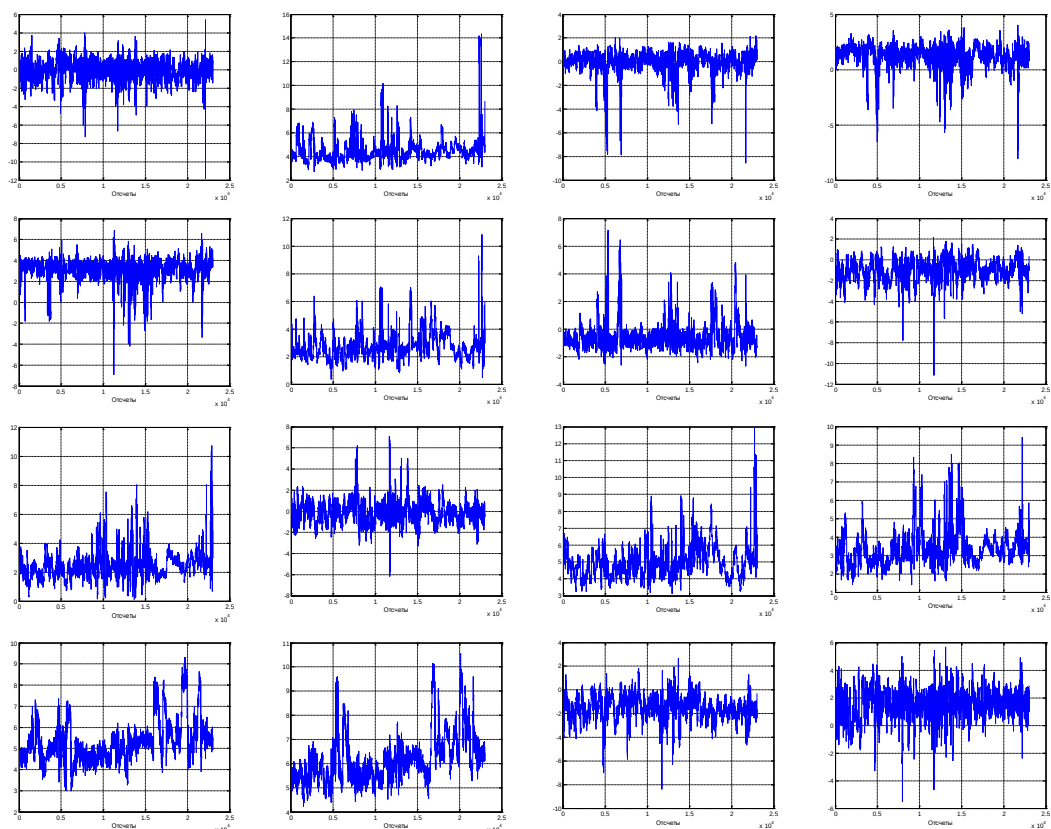


Рис. 6. Двадцать восемь независимых компонент. По горизонтальной оси отложены отсчеты (1 отсчет – 30 секунд).

Анализ данных по 28 независимым компонентам затруднен в силу их большого количества. Но поскольку программа FastICA позволяет на основе оценки собственных значений ковариационной матрицы уменьшить количество используемых независимых компонент, то был проведен расчет для случая, когда количество независимых компонент ограничивалось семью. Тогда матрица смешения A имеет размерность 28×7 . На рис. 7 представлены восстановленные по 7 независимым компонентам данные на трех горизонтах 0,3 м, 0,8 м, 1,7 м, относительная ошибка здесь не превышала 0,08, но она увеличивается, если смотреть значения на ниже расположенных горизонтах. На рис. 8 изображены сами семь независимых компонент.

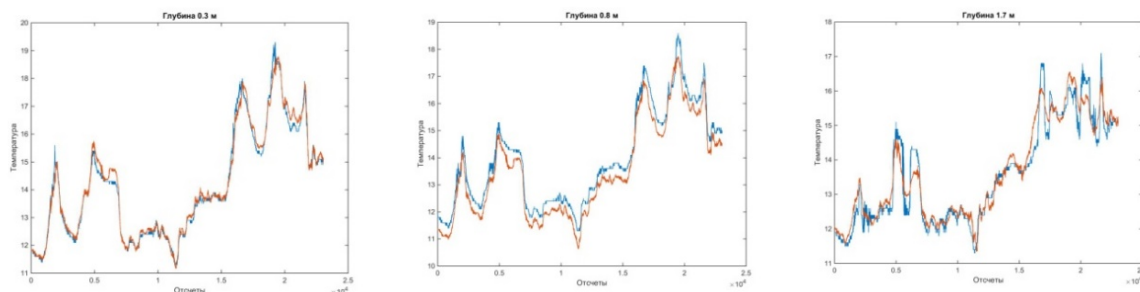


Рис. 7. Восстановленные по семи независимым компонентам данные. Синяя линия – исходные данные температуры, красная линия – восстановленные.

Первая независимая компонента показывает наличие резких изменений в середине периода наблюдений. Объяснением этого факта может служить ветровая картина, полученная по данным метеостанции поселка Жемчужный. Согласно метеорологическим данным [15] в 2015 г. наблюдались порывы ветра в середине и в конце промежутка измерения:

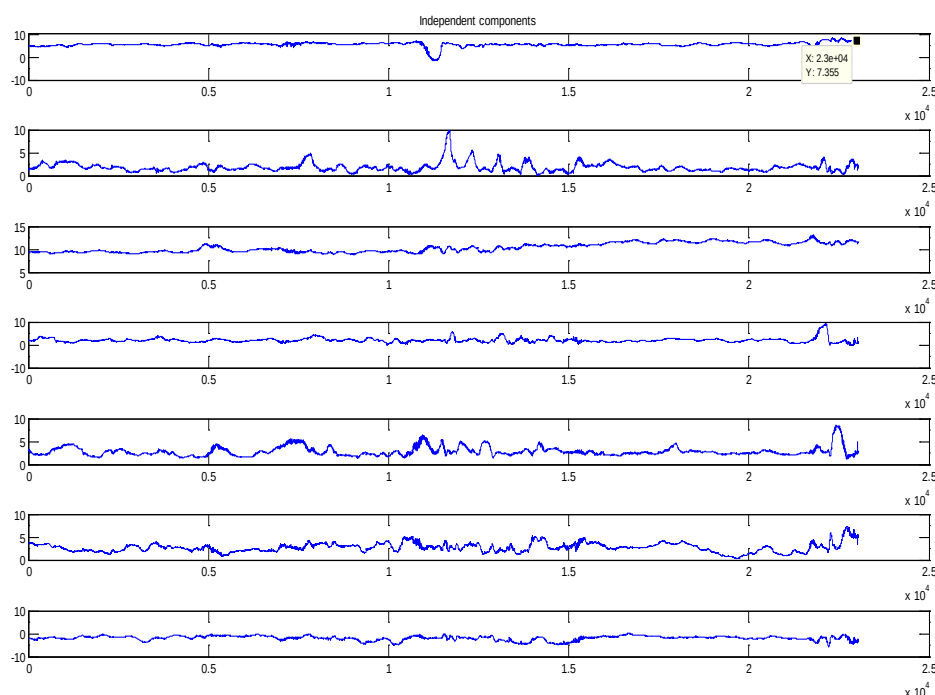


Рис. 8. Семь независимых компонент

Данные метеостанции поселка Жемчужный

Дата	Время	Скорость ветра
2 июня	10 часов	10 м/с
2 июня	13 часов	12 м/с
2 июня	16 часов	12 м/с
2 июня	19 часов	10 м/с
3 июня	16 часов	13 м/с
3 июня	19 часов	14 м/с
3 июня	22 часа	17 м/с
4 июня	01 часов	11 м/с
7 июня	16 часов	16 м/с
7 июня	19 часов	15 м/с
7 июня	22 часа	10 м/с

Гидрофизические аспекты этой картины иллюстрирует рис. 9. Отчетливо виден процесс колебания границы верхнего перемешанного слоя: подъем в период 20-22 часа с 8 м до 5 м и последующее опускание в 23-24 часа до 6.5 м.

Можно идентифицировать пятую независимая компоненту, т.к. характер колебаний в ней идет с периодом, соответствующим суточным колебаниям, и третью, в которой прослеживается процесс сезонного нагревания. Остальные компоненты могут отвечать за внутренние волны, но их периоды определить пока не удалось.

Выводы. Были рассмотрены два метода обработки данных для длительных измерений температуры в озере Шира, относящихся к методам статистической обработки данных.

Отметим выявленные достоинства и недостатки.

Метод главных компонент позволяет проанализировать данные даже небольших измерений (за один день), но при этом сложно дать физическую интерпретацию первой главной компоненте, необходимо брать большее число слагаемых.

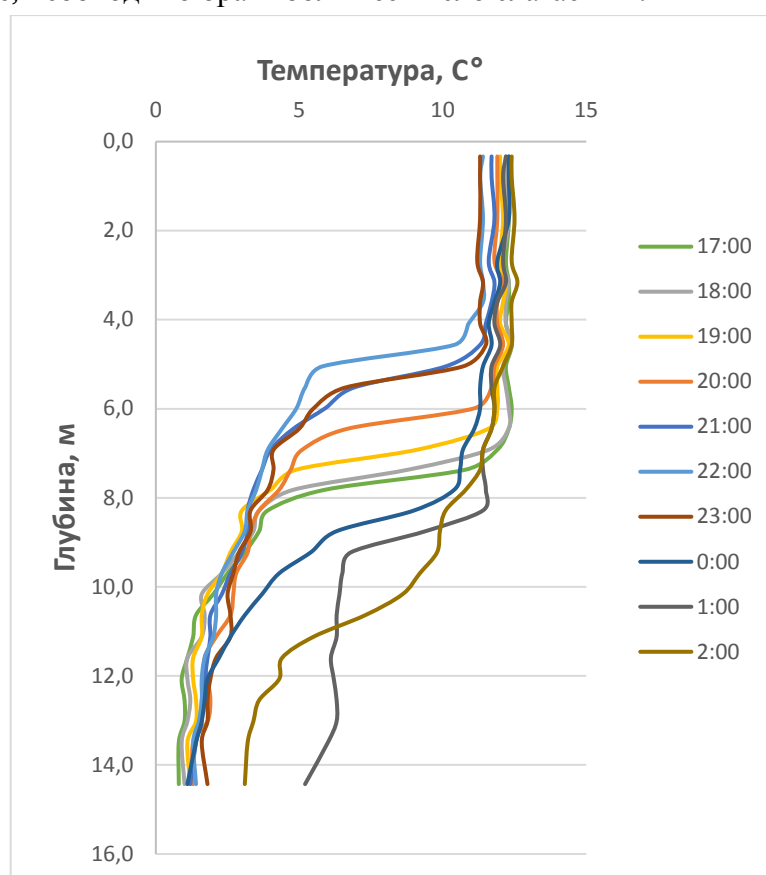


Рис. 9. График температуры на 3 июня.

Анализ независимых компонент позволяет легко выделять «артефакты», в частности, колебания температуры, вызванные влиянием сильного ветра, но он не дает информации о процессах на конкретных горизонтах. В данном случае, невозможно было применить его для данных температуры за период, меньший чем неделя, т.к. итерационный процесс не сходиллся.

Для исследования характера изменения температуры в озере желательно применять оба метода в комплексе.

Список литературы

1. Principal Manifolds for Data Visualisation and Dimension Reduction. Series: Lecture Notes in Computational Science and Engineering / Gorban A.N. [et al.]. — Berlin-Heidelberg-New York: Springer, 2007. - XXIV. - 340 p.
2. Lorenz E.N. Empirical orthogonal functions and statistical weather prediction / E. Lorenz — Technical Report, Statistical Forecasting Project, Department of Meteorology, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, MA, 1956 — 49 p.
3. Saurral R. I. Observed modes of sea surface temperature variability in the South Pacific region / R. I. Saurral, F. J. Doblas-Reyes, J. García-Serrano // *Climate Dynamics*. — 2018. — V. 50. — №. 3-4. — p. 1129-1143.
4. Кузин В.И. Анализ вариаций температуры поверхности тропической и северной частей Тихого океана / В.И. Кузин, А.С. Лобанов // *Известия РАН. Физика атмосферы и океана*. — 2016. — Т. 52. — № 5 — С. 618-627.
5. Kundu P.K. Some three-dimensional characteristic of low-frequency currents near the Oregon Coast / P.K. Kundu, J.S. Allen // *Journal of Physical Oceanography*. — 1976 — Vol.6 — P. 181-199.
6. Kaihatu J.M. Empirical Orthogonal Function analysis of ocean surface currents using complex and real-vector methods / J.M. Kaihatu, R. A. Handler, G. O. Marmorino, L. K. Shay // *Journal of atmospheric and oceanic technology*. — 1998 — Vol.15 — P.927-941.
7. Hyvärinen A. A Fast Fixed-Point Algorithm for Independent Component Analysis / , Hyvärinen A., Oja E. // *Neural Computation*. — 1997 — 9(7) — P. 1483-1492.
8. Hyvärinen A., Karhunen J., Oja E. *Independent Component Analysis*. 2001.
9. Горячкин А.В. Метод анализа независимых компонент на основе преобразования независимости / Горячкин А.В., Шатских С.Я. // *Доклады Академии наук*. — 2004 — 398:4 — С. 466-468.
10. Захаров И.С. Компонентный анализ в задаче слепого разделения спонтанной электроэнцефалограммы / И.С. Захаров // *Электронный журнал «Молодежный научно-технический вестник*. — 2013 — №9.
11. Makeig S., Bell A.J., *Independent Component Analysis of Electroencephalographic Data*. 1996.
12. Ведмедь А.Г. Восстановление изображений с использованием анализа главных и независимых компонент / Ведмедь А.Г., Машталир С.В., Сакало Е.С. // *Системи обробки інформації*. — 2010 — випуск 6 (87) — С. 66-72.
13. Bartlett M.S., Movellan J.R., Sejnowski T.J., *Face recognition by independent component analysis*. 2002.
14. FastICA <http://research.ics.aalto.fi/ica/fastica/> (дата обращения 18.06.19)
15. https://rp5.ru/Погода_в_Жемчужном_Хакасия/ (дата обращения 18.06.19)

ПРОСТРАНСТВЕННАЯ СТРУКТУРА МИТОХОНДРИАЛЬНЫХ ГЕНОМОВ РАСТЕНИЙ И ЖИВОТНЫХ

Р.Е.Косарев¹, М.Ю.Сенашова², М.Г.Садовский^{1,2}

¹Сибирский федеральный университет,

²Институт вычислительного моделирования СО РАН, msad@icm.krasn.ru

Введение

Изучение особенностей и деталей структуры нуклеотидных последовательностей является важнейшей задачей биологии в настоящее время. Исследования ведутся в двух аспектах — структурно-функциональном и эволюционном. Выявление связи между структурными компонентами и соответствующим им функциями представляет собой классическую проблему молекулярной и системной биологии и несмотря на обширный поток публикаций и исследований в этом направлении, она всё ещё далека от завершения. Более того, исследователи выявляют всё новые и новые структурные элементы либо новые виды и формы взаимодействий и взаимоотношений между структурными элементами биологических макромолекул, а развитие техники и инструментов исследований лишь усугубляет эту ситуацию.

Понятна важность таких исследований с точки зрения эволюционных процессов. Изучение особенностей структуры биологических макромолекул у разных организмов позволяет составить более точную картину эволюции тех или иных биологических систем — от вполне конкретных видов до экосистем и глобальных сообществ.

Кроме того, затруднения в исследованиях такого рода всегда вызывают выбор и качество того биологического материала, который берётся в рассмотрение. Дело даже не в ошибках секвенирования и/или аннотирования генетических последовательностей, неизбежных во многих случаях, а в большой сложности таких объектов, как геномы либо отдельные хромосомы. Рассматривая эти объекты, приходится анализировать набор характеристик: структуру, функцию и филогению. Эти характеристики очень сильно взаимодействуют и сильно влияют друг на друга. Причем это влияние далеко не всегда удаётся выделить в качестве отдельного и независимого фактора.

Прокариотические организмы с этой точки зрения являются более удобными объектами для исследования, чем эукариотические; геном бактерий заметно короче генома эукариот и всегда представлен одной хромосомой. Использование более простых, прокариотических геномов, имеющих одну хромосому, выглядит целесообразнее, так как они короче эукариотических геномов на несколько порядков. Однако ещё удобнее использовать геномы органелл, в нашем случае — митохондрий, поскольку для них полностью исключается влияние различий в кодируемых функциях: в пределах одной группы органелл функциональные различия отсутствуют.

Большое количество работ [1-15] посвящено влиянию структуры митохондриальных геномов различных видов на филогению и эволюцию этих видов. Однако все эти работы рассматривают структуру митохондриальных геномов с точки зрения функции генов. Мы будем рассматривать структуру геномов митохондрий как кластеризацию точек данных, соответствующих частотным словарям в пространстве триплетов. Настоящая работа посвящена выявлению характерных структур митохондриальных геномов внутри различных систематических групп животных и растений, их особенностям и различиям и сходствам этих геномов со структурами геномов хлоропластов.

Материалы и методы

Введем основные понятия. Мы будем рассматривать генетическую последовательность длины L , состоящую из символов алфавита $\Sigma = \{A, C, G, T\}$. Для этой последовательности мы будем составлять частотный словарь толщины 3. Частотный

словарь W_3 толщины 3 символьной последовательности, соответствующей ДНК – это список всех троек $V_1V_2V_3$ идущих подряд нуклеотидов с указанием частот этих троек; всего может быть 64 триплета. Заметим, что приведенное определение частотного словаря триплетов является частным случаем: при подсчете числа триплетов окно считывания может перемещаться на один, два, три, четыре и вообще произвольное число нуклеотидов, тем самым порождая разные частотные словари. Как правило используется частотный словарь вида W_3^k , где $k = 1$.

Как и в работах Горбана с соавт. [16-18], мы используем частотный словарь вида W_3^3 , тем самым триплеты в нашей работе подсчитывались таким образом, что они полностью покрывают последовательность и при этом не пересекаются. Частота f_ω – это отношение числа копий n_ω данного слова к общему числу всех триплетов N , где N – сумма всех n_ω :

$$f_\omega = \frac{n_\omega}{N} \quad (1)$$

Всякий частотный словарь W_3^3 отображает геном в 64-мерное метрическое пространство.

Один из 64 триплетов исключался, поскольку сумма всех частот в словаре равна 1, что порождает линейную связь, которая будет давать ложный сигнал при статистической обработке (корреляционном анализе, определении главных компонент и т.п.).

В нашем случае целесообразнее исключать тот триплет, для которого стандартное отклонение, наблюдаемое по анализируемому набору частотных словарей, является минимальным: такой триплет дает наименьший вклад в различимость объектов (в предельном случае, когда стандартное отклонение равно 0, различий по этому триплету вовсе нет). Таким образом, рассматриваемое нами пространство точек становится 63-мерным.

Для выявления структуры в генетической последовательности проводилась предварительная обработка, которая ставила в соответствие данной последовательности множество точек в 63-мерном пространстве триплетов. Делалось это следующим образом: последовательность сканировалась окном длины Δ с шагом t . Для каждого положения i рамки определялся участок генетической последовательности, совпадающий с рамкой считывания, для которого вычислялся частотный словарь $W_3^{(i)}$ соответствующий i -ой точке в 63-мерном пространстве. Кроме того, с каждой точкой в 63-мерном пространстве связывались следующие параметры: номер центрального символа рассматриваемого участка и относительная фаза. Номер центрального символа участка совпадает с номером этого символа в последовательности. Относительная фаза определяется в зависимости от того, попал рассматриваемый участок в кодирующую или не кодирующую область последовательности. Участок относится к кодирующим, если он целиком попадал в кодирующую область последовательности. Если участок относится к не кодирующим, то соответствующая ему точка помечается символом J . Для кодирующего участка возможны шесть вариантов маркировки: $B_0, B_1, B_2, F_0, F_1, F_2$. Если кодирующий участок в последовательности аннотирован как считывающийся в прямом направлении, то для него вычислялся остаток от деления на 3 разности номеров центрального символа участка и первого символа кодирующей области, к которой он

относится. В соответствии с величиной остатка от деления точка помечалась символом F_0 , F_1 или F_2 . Если участок аннотирован как считывающийся в обратном направлении, то вычислялся остаток от деления на 3 разности номеров последнего символа кодирующей области, к которой относится участок, и центрального символа участка. В зависимости от значения остатка от деления точка помечалась символами B_0 , B_1 или B_2 .

Данные для исследования брались в базе EMBL-банка. Было отобрано 418 митохондрий растений и животных, в среднем по 25 видов на кладу. Для всех генетических последовательностей длина рамки считывания $\Delta = 603$, шаг $t = 11$.

По полученному множеству точек в программе VidaExpert (<http://bioinfo-out.curie.fr/projects/vidaexpert/>) строился вид данных в пространстве первых трех главных компонент, вычисленных для данного 63-мерного пространства. Рассматривались две проекции на плоскость пространства главных компонент: 1-ой и 2-ой компоненты и 2-ой и 3-ей компоненты. Точки данных были раскрашены в соответствии с их относительной фазой. Точки, соответствующие некодирующим участкам, закрашены коричневым, точки, соответствующие относительным фазам F_0 и B_0 , изображены малиновыми и фиолетовыми квадратами, точки, соответствующие относительным фазам F_1 и B_1 , изображены зелеными и голубыми квадратами, а точки, соответствующие относительным фазам F_2 и B_2 , изображены оранжевыми и желтыми квадратами. Кроме того, для каждого генома вычислялся GC-состав, т.е. отношение суммарного числа нуклеотидов С и G к общему числу нуклеотидов в геноме и находилось среднее значение GC-состава по кладе.

Для облегчения восприятия результатов введем точные определения терминов, которые будут использоваться ниже. Выделяемые рамкой считывания длины Δ фрагменты помечались двумя разными метками: ген и джанк. Следует подчеркнуть, что фрагменты выделяются только из одной (прямой) цепи ДНК и каждый такой фрагмент может содержать 1) кодирующую область из прямой цепочки с тремя возможными сдвигами относительно первой позиции фрагмента; 2) кодирующую область из обратной цепочки с тремя возможными рамками считывания (определяемые по “зеркальному отражению”); 3) некодирующие области; и, наконец, 4) сочетание некодирующих и кодирующих областей в разных пропорциях. Эти последние фрагменты вносят шум в распределение, но их относительная доля не высока. Понятно, что выбор порога доли кодирующей области в выделяемом фрагменте будет оказывать некоторое влияние на результаты распределения; в рамках настоящей работы использовался весьма жесткий критерий: в категорию “ген” попадали лишь те фрагменты, которые целиком лежали в кодирующей области. Это обусловлено тем, что в противном случае выбор доли кодирующих и некодирующих участков во фрагментах, которые будут считаться “геном” очень субъективен. Влияние величины доли некодирующих областей в выделяемых фрагментах нами не исследовалось.

Фрагмент с номером i получал метку ген, если он попадал в ту часть генома, которая в аннотации, содержащейся в голове файла EMBL-банка, была помечена как CDS, либо как exon, либо как rRNA, если длина такового превышала длину фрагмента. При этом фрагмент получал такую метку лишь при условии полного попадания в участок, аннотированный как описано выше.

Фрагмент с номером i получал метку джанк, если он не получал метку ген, при условиях, описанных выше.

Данная работа в своих сравнениях митохондрий с хлоропластами ссылается на работу Садовского с соавт. [20]. В ней у хлоропластов наземных растений в качестве преобладающей структуры была выявлена трёхлучевая с хвостом.

В нашей работе объектом исследования являются митохондрии животных и растений, их геном значительно короче генома хлоропластов, что, по-видимому, может являться причиной найденных различий.

Сходства и различия найденных структур митохондрий со структурами хлоропластов

Для 19 рассмотренных клад было обнаружено 6 типов структур, см. рис. 1–6.

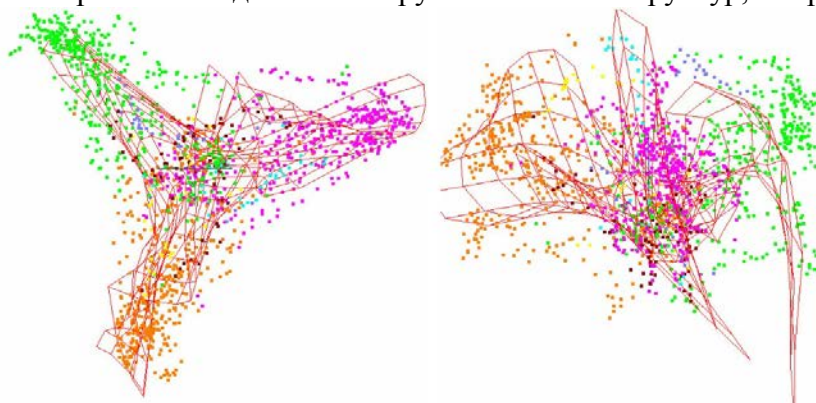


Рис. 1. Трёхлучевая структура митохондриального генома на примере *Coelodonta antiquitatis*. Здесь и далее слева изображена проекция в плоскость 1-ой и 2-ой главных компонент, справа в плоскость 2-ой и 3-ей главных компонент.



Рис. 2. Трёхлучевая структура с хвостом митохондриального генома на примере *Canis lupus*.



Рис. 3. Трёхлучевая структура с нимбом митохондриального генома на примере *Carcharodon carcharias*.



Рис. 4. Трехлучевая структура с ядром митохондриального генома на примере *Ganoderma lucidum*.

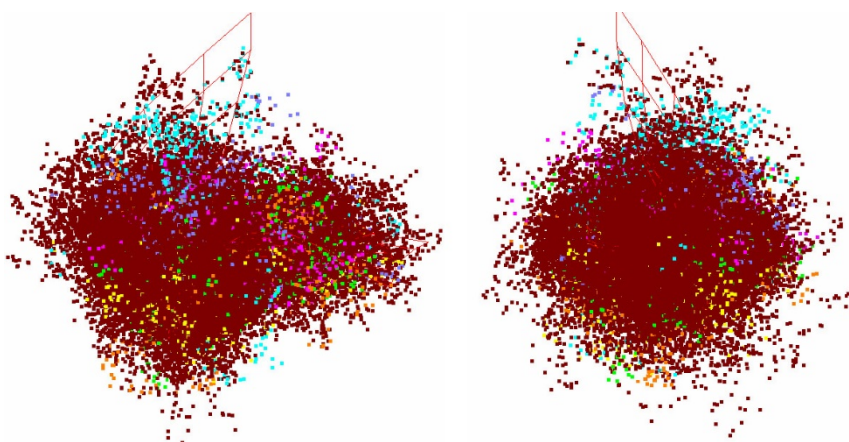


Рис. 5. Структура «клубок» митохондриального генома на примере *Oryza rufipogon*.

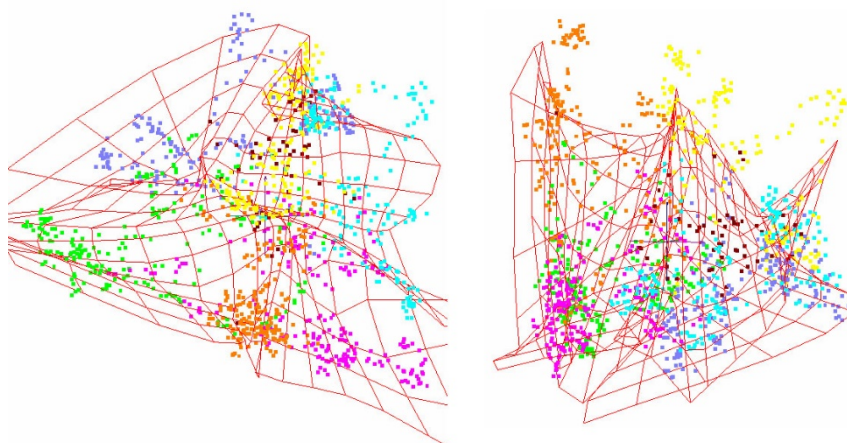


Рис. 6. Аморфная структура митохондриального генома на примере *Heterometrus longimanus*.

Количественное и процентное соотношение структур описано в таблице 1.

Таблица 1.

	Три луча /прямая	Три луча с хвостом	Три луча с нимбом	Три луча с ядром	«Клубок»	Аморфная
Амфибии	24 (96%)	1(4%)				
Костные рыбы	21(84%)		4(16%)			
Круглоротые	12(80%)	2(13,33%)				
Млекопита- ющие	18(72%)	5(20%)				1(4%)
Птицы	15(60%)	9(36%)				
Рептилии	13(52%)	10(36%)				
Хрящевые	15(60%)	2(8%)	8(32%)			
Губки	23(92%)	2(8%)				
Кольчатые ч.	23(92%)	1(4%)	1(4%)			
Круглые ч.	19(74%)	5(20%)				
Моллюски	20(80%)	1(4%)	2(8%)			1(4%)
Плоские ч.	2(8,7%) /19(76%)	3 (12%)				1(4%)
Насекомые	19(76%)		6(24%)			
Паукообр.	18(72%)		2(8%)			5(20%)
Ракообр.	19(76%)		5(20%)			1(4%)
Растения	12(29,27%)	3(7,32%)			19(46,34%)	7(17,08%)
Высшие грибы	/9(36%)			14(56%)		1(4%)
Мхи				5(25%)	14(70%)	
Лишайники	/13(100%)					

Как видно из таблицы, для большинства клад характерна трехлучевая структура. Если не рассматривать отдельно подтипы трехлучевой структуры, то кроме растений и мхов она обнаружена в подавляющем большинстве случаев для всех остальных клад.

Из найденных структур к схожим со структурами хлоропластов относятся трёхлучевая с ядром и трёхлучевая с хвостом. Трёхлучевая структура с ядром в большом количестве обнаружена у высших грибов и мхов. Трёхлучевая структура с хвостом также является достаточно распространенной. Она встречается в большинстве клад, кроме насекомых, членистоногих, высших грибов, мхов и лишайников. Если сравнивать эти структуры со структурами, обнаруженных у геномов хлоропластов, то для хлоропластов характерно практически равное количество точек, относящихся к прямому и обратному стрендам, тогда как у митохондрий сильно преобладают точки, относящиеся к прямому стренду, либо точки относящиеся к обратному стренду вовсе отсутствуют (у плоских червей, высших грибов и лишайников). Кроме того, «хвост» у хлоропластов состоит из точек, относящихся к кодирующему участку, в то время как у митохондрий хвост состоит исключительно из джанка. Поэтому говорить о идентичности структур геномов митохондрий и хлоропластов нельзя.

Интересным случаем является формально новая структура – трёхлучевая с нимбом. Для этой структуры в проекции 1-ой и 2-ой главных компонент видно, как кодирующие части формируют что-то похожее на «нимб» вокруг самой структуры. Этот вопрос требует дальнейшего изучения. А пока стоит отметить, что данная структура больше всего характерна для костных и хрящевых рыб, а также для членистоногих (насекомых и ракообразных).

Некоторые структуры получились аморфными, без какой-либо ярко выраженной симметрии. Причем структуры, отнесенные к этому типу, сильно отличаются между собой.

Для растений и мхов самой характерной структурой является «клубок» (46% и 76% соответственно). Она представляет собой скопление точек, которые беспорядочно перемешаны.

Исключения составляют три структуры (воронка, сквозная и клубок с хвостом).

Воронка – структура выявленная у Байкальской губки - *Lubomirskia baicalensis* – это эндемик, фильтратор. В случае данной структуры небольшой хвост из джанка как бы засасывает кодирующую часть в воронку. Возможно структура так отличилась из-за происхождения губки.

Сквозная – структура выявленная у китайской ящерицы *Eremias brenchleyi*. Эта структура характерна тем, что хвост из джанка как бы пронизывает трёхлучевую структуру насквозь.

Клубок с хвостом – это структура выявленная у растений *Silene latifolia* (дрёма белая) и *Raphanus sativus* (редька посевная), оба вида широко распространены в Европе и Азии. У данной структуры помимо клубка джанк образует хвостовую часть. Скорее всего эта структура абсолютно формальная и имеет малое значение, но, быть может, бóльшая выборка решила бы этот вопрос.

Зависимость структуры от GC-состава (ГРАФИК GC-КОНТЕНТА)

В ходе проделанной работы мы вычислили средний GC-состав по выбраннымкладам животных и растений в надежде провести корреляцию между получившимися структурами и GC-составом (рис. 7).

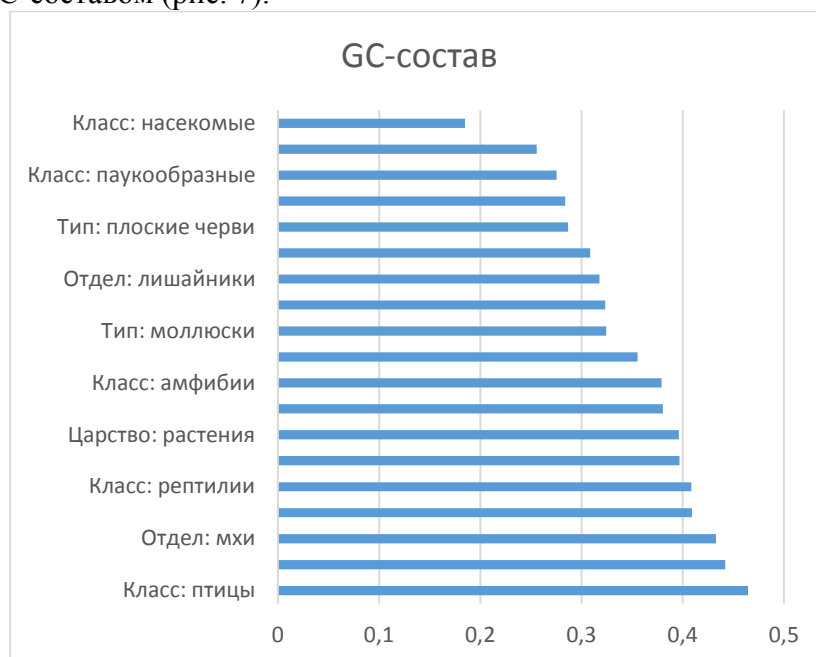


Рис. 7. Средний GC -состав покладам.

Напомним, что *GC* -состав – это отношение числа нуклеотидов С и G к общему числу нуклеотидов в геноме.

Самый высокий *GC* -состав был выявлен у птиц (0,46) далее по убыванию костные рыбы, мхи, млекопитающие и рептилии.

К сожалению, четко выраженной корреляции между *GC*-составом и преобладанием какой-то структуры у геномов митохондрий обнаружено не было. У птиц и рептилий самый высокий процент трёхлучевой структуры с хвостом, чуть меньше она встречается у млекопитающих. У костных рыб единственной, отличающейся от трёхлучевой структуры, является трёхлучевая с нимбом. Однако она встречается так же в кладах с наименьшим *GC* -составом (членистоногие). У мхов часто встречающаяся структура – трёхлучевая с ядром, которая ещё более характерна для высших грибов, у которых *GC* -состав ниже среднего.

Возможно, выборка большего объема, например, не 25 видов на кладу, а 100, сделала бы результаты по корреляции более точными. Но на момент написания работы в некоторых кладах было набрано менее 25 видов, поскольку в базе EMBL отсутствовали геномы этих клад в необходимом количестве.

Выводы

В большинстве своём геномы митохондрий и хлоропластов наземных растений стремятся к трёхлучевой структуре. Но говорить об идентичности структур геномов митохондрий и хлоропластов нельзя. Если у геномов хлоропластов структура очень четко выражена, то для геномов митохондрий наблюдается большое разнообразие обнаруженных структур. Хотя функции и хлоропластов, и митохондрий, как органелл, жестко заданы и говорить о влиянии функции на структуру не представляется возможным.

Список литературы

1. Wolstenholme D. R. Animal mitochondrial DNA: structure and evolution //International review of cytology. – Academic Press, 1992. – Т. 141. – С. 173-216.
2. Bendich A. J. Reaching for the ring: the study of mitochondrial genome structure //Current genetics. – 1993. – Т. 24. – №. 4. – С. 279-290.
3. Boore J. L., Brown W. M. Big trees from little genomes: mitochondrial gene order as a phylogenetic tool //Current opinion in genetics & development. – 1998. – Т. 8. – №. 6. – С. 668-674.
4. Gray M. W. et al. Genome structure and gene content in protist mitochondrial DNAs //Nucleic acids research. – 1998. – Т. 26. – №. 4. – С. 865-878.
5. Taanman J. W. The mitochondrial genome: structure, transcription, translation and replication //Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-Bioenergetics. – 1999. – Т. 1410. – №. 2. – С. 103-123.
6. Boore J. L. Animal mitochondrial genomes //Nucleic acids research. – 1999. – Т. 27. –

- №. 8. – C. 1767-1780.
7. Burger G., Gray M. W., Lang B. F. Mitochondrial genomes: anything goes //Trends in genetics. – 2003. – T. 19. – №. 12. – C. 709-716.
 8. Burger G. et al. Unique mitochondrial genome architecture in unicellular relatives of animals //Proceedings of the National Academy of Sciences. – 2003. – T. 100. – №. 3. – C. 892-897.
 9. Bullerwell C. E., Gray M. W. Evolution of the mitochondrial genome: protist connections to animals, fungi and plants //Current opinion in microbiology. – 2004. – T. 7. – №. 5. – C. 528-534.
 10. Marande W., Lukeš J., Burger G. Unique mitochondrial genome structure in diplomonads, the sister group of kinetoplastids //Eukaryotic cell. – 2005. – T. 4. – №. 6. – C. 1137-1146.
 11. Gissi C., Iannelli F., Pesole G. Evolution of the mitochondrial genome of Metazoa as exemplified by comparison of congeneric species //Heredity. – 2008. – T. 101. – №. 4. – C. 301.
 12. Hikosaka K. et al. Divergence of the mitochondrial genome structure in the apicomplexan parasites, Babesia and Theileria //Molecular biology and evolution. – 2009. – T. 27. – №. 5. – C. 1107-1116.
 13. Gray M. W. Mitochondrial evolution //Cold Spring Harbor perspectives in biology. – 2012. – T. 4. – №. 9. – C. a011403.
 14. Hikosaka K., Kita K., Tanabe K. Diversity of mitochondrial genome structure in the phylum Apicomplexa //Molecular and biochemical parasitology. – 2013. – T. 188. – №. 1. – C. 26-33.
 15. Cameron S. L. Insect mitochondrial genomics: implications for evolution and phylogeny //Annual review of entomology. – 2014. – T. 59. – C. 95-117.
 16. Gorban A.N., Zinovyev A. Yu., Popova T.G., 2003. Seven clusters in genomic triplet distributions. // arXiv:cond-mat/0305681 [pdf]
 17. Gorban A.N., Zinovyev A. Yu., Popova T.G., 2003. Seven clusters in genomic triplet distributions // Silico Biol. V.3. № 4. P. 471 – 482.
 18. Gorban A.N., Zinovyev A. Yu., Popova T. G., 2005. Four basic symmetry types in the universal 7-cluster structure of microbial genomic sequences // Silico Biol. V.5. № 3. P.265 – 282.
 19. Садовский М.Г., Сенашова М.Ю., Малышев А. В. Восьмикластерная структура геномов хлоропластов наземных растений // Журнал общей биологии, 2018, том 79, № 2, с. 124–134.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ГИБРИДНЫХ ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫХ МНОГОАГЕНТНЫХ СИСТЕМ ГЕТЕРОГЕННОГО МЫШЛЕНИЯ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ПРОБЛЕМЫ ВОССТАНОВЛЕНИЯ РЕГИОНАЛЬНОЙ РАСПРЕДЕЛИТЕЛЬНОЙ ЭЛЕКТРОСЕТИ¹

С.В. Листопад¹, С.Б. Румовская²

¹Калининградский филиал Федерального исследовательского центра
«Информатика и управление» Российской академии наук, ser-list-post@yandex.ru

²Калининградский филиал Федерального исследовательского центра
«Информатика и управление» Российской академии наук, sophiyabr@gmail.com

Решение проблем в ходе управления сложными динамическими системами, такими как региональная распределительная электросеть, городская транспортная система, региональные экстренные службы характеризуется разнообразием и значительными объемами непрерывно поступающей неоднородной информации, взаимозависимостью принимаемых решений, изменчивостью проблемной среды в реальном времени, влиянием человеческого фактора, в частности, неверной интерпретацией данных, слепотой к изменениям и др. Для оперативно-диспетчерского (оперативно-технологического) управления такими системами разрабатываются руководящие принципы и операционные процедуры решения типовых проблем коллективами экспертов. Так в электрораспределительных организациях к разработке подобных инструкций по устранению аварийных ситуаций привлекают экспертов-энергетиков, представителей проектных институтов, разработавших генерацию и электросетевой комплекс организации, а также представителей производителей оборудования [1]. Однако аварийные условия системы могут серьезно отличаться от принятых при разработке плана, что снижает эффективность восстановительных мероприятий, приводя к недопустимым нагрузкам, уровням напряжения или срабатыванию систем защиты [2]. При возникновении же аварии организовать полноценное коллективное обсуждение уже не представляется возможным. Для решения данной проблемы в данной работе предлагается разработка гибридной интеллектуальной многоагентной системы гетерогенного мышления (ГИМСГМ), комбинирующей гибридный интеллектуальный подход А. В. Колесникова [3], аппарат многоагентных систем в смысле В. Б. Тарасова [4] и методики гетерогенного мышления [5–7]. Это обеспечит интеграцию знаний экспертов различных специальностей, согласование нескольких критериев оптимальности и учет множества ограничений в условиях динамических непосредственно ненаблюдаемых сред и дефицита времени на принятие решения.

Планирование восстановления региональной системы электроснабжения требует обширных знаний, включает множество ограничений и условий, по которым необходимы оценки операторов, что дополнительно усложняет ее комплексное решение [8]. Интерес современных планировщиков к данной проблеме обусловлен, прежде всего, ее частичной наблюдаемостью, высокой размерностью пространства состояний и сложностью моделирования последствий принимаемых решений [9]. Большинство известных постановок данной проблемы рассматривают ее в упрощенном, «игровом» виде, из-за чего они останавливаются на стадии разработки опытного образца [8]. Такое «игровое» планирование восстановления региональной распределительной электросети (ИПВРРЭ) может быть представлено следующим образом.

¹ Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 18-07-00448).

Исходные данные для ИПВРРЭ – граф электросети, узлы которого могут быть трех типов: центр питания, потребитель и шина, – а ребра обозначают линии электропередач с переключателями, размыкающими или замыкающими линию. Замкнутые линии образуют радиальную структуру, т.е. в графе отсутствуют циклы запитанных линий. Центр питания характеризуется величиной максимальной генерируемой мощности, потребитель – величиной номинальной потребляемой мощности и состоянием (запитан/отключен), а линия электропередач – пропускной способностью (максимально допустимая мощность), состоянием (включена/отключена) и работоспособностью (исправна/авария). Требуется определить какие линии нужно включить/выключить, и в каком порядке, чтобы обеспечить максимально возможный объем потребления мощности при соблюдении следующих эксплуатационных ограничений: поддержание радиальной структуры включенных линий; для каждой линии суммарная величина нагрузок, которые питаются от центра питания через эту ветвь, не должна превышать пропускную способность ветви; потребители, незатронутые первоначальным отключением, не должны отключаться в результате переключений.

Пример графа электросети при ИПВРРЭ показан на рис. 1. Как видно в левой части рисунка в нормальном состоянии все нагрузки распределены между двумя питающими центрами, кольца из замкнутых линий отсутствуют. При возникновении аварии в такой сети три потребителя, отмеченные штриховыми стрелками, оказываются обесточены. При восстановлении электроснабжения показана ситуация, когда все три потребителя нельзя запитать от одной линии электропередач в связи с возникающей перегрузкой. В этом случае погашенный участок разделен на две части путем размыкания замкнутого в нормальном состоянии переключателя. После этого становится возможным запитать обесточенных потребителей от разных линий рабочей части сети.

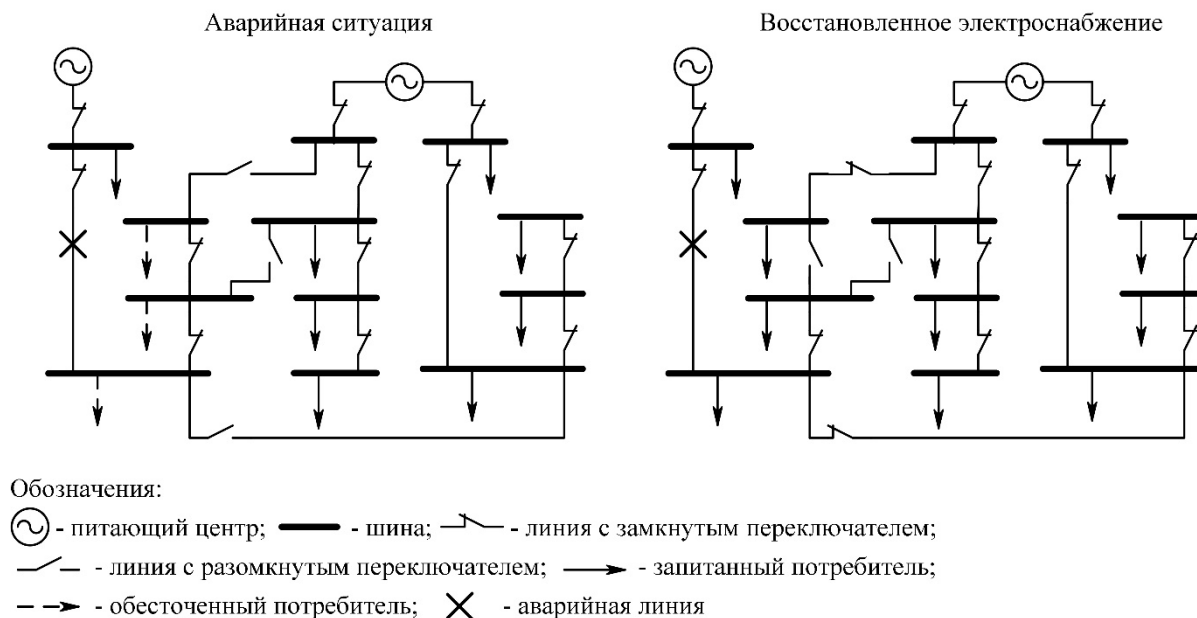


Рис. 1. Пример графов при «игровом» планировании восстановления региональной распределительной электросети.

Как видно, проблема восстановления региональной распределительной электросети при «игровом» планировании предельно упрощена. Такая постановка проблемы необходима для тестирования эффективности методов оптимизации с целью их последующей адаптации путем крупно- или мелкозернистой гибридизации для

решения проблемы планирования восстановления региональной распределительной электросети (ППВРРЭ). Без гибридизации с другими методы решения ИПВЭ нерелевантны ППВРРЭ из-за существенно большего числа типов объектов и их свойств, которые необходимо учитывать для построения допустимого плана, а также характерных для ППВРРЭ НЕ-факторов в смысле А.С. Нариньяни [10]. Необходимость увеличения количества типов моделируемых объектов связано, например, с невозможностью дистанционных переключений в части электросети, наличия распределенной генерации и активных потребителей, необходимостью учета физических процессов в электросети. К числу НЕ-факторов ППВРРЭ можно отнести, например, следующие: недоопределенность места аварии на момент планирования восстановления; неточность величины мощности потребляемой каждым клиентом и генерируемой каждым источником распределенной генерации; нечеткости времени выполнения операций по восстановлению элементов электросети; некорректность работы датчиков аварийного режима; неполнота модели электросети.

На основе анализа работ [8, 9, 11, 12] в области планированию восстановления распределительной электросети после аварий была сформулирована ППВРРЭ, состоящая в разработке плана восстановления электросети, включающего в себя последовательность включения и выключения переключателей, последовательность поездок ремонтных бригад для выполнения переключений и восстановительных работ. Исходные данные для ППВРРЭ включают в себя следующие множества: 1) элементов электросети; 2) отношений инцидентности между элементами электросети; 3) множество расположений; 4) маршрутов проезда между расположениями; 5) ремонтных бригад; 6) транспортных средств; 7) ресурсов для восстановления электросети; 8) действий по восстановлению электросети. Определены следующие критерии оптимальности плана: 1) минимизация времени отключения приоритетной нагрузки; 2) максимизация общей восстановленной мощности нагрузки; 3) максимизация показателя надежности электросети (устойчивости к последующим авариям). Допустимый план должен удовлетворять следующим ограничениям: 1) сохранение радиальной структуры сети запитанных линий; 2) для каждой линии суммарная величина нагрузок, которые питаются от источника распределенной генерации через нее, не должна превышать ее пропускную способность; 3) соблюдение балансов активной и реактивной мощностей; 4) величины напряжения и частоты должны лежать в допустимых пределах; 5) потребители, незатронутые первоначальным отключением, не должны отключаться в результате переключений; 6) выполнение работ бригадами с соответствующим допуском при наличии в их транспортном средстве необходимых ресурсов; 7) вместимость транспортного средства; 8) рабочее время бригад; 9) транспортные средства должны вернуться на базу; 10) при принудительном разделении электросети на острова линии связи между островами должны иметь оборудование синхронизации для последующего объединения островов.

В соответствии с проблемно-структурной методологией А.В. Колесникова [3] проблема редуцирована в декомпозицию из следующих задач (рис. 2): 1) локализация места аварии с учетом возможности отказа датчиков аварийного режима, для решения которой необходимы знания инженера по релейной защите и автоматике; 2) оперативное и краткосрочное прогнозирование активной и реактивной мощностей, потребляемых клиентами после подключения к сети, для решения которой востребованы знания инженера по анализу и прогнозированию режимов энергопотребления; 3) оценка требований к выполнению действий по восстановлению элементов электросети, решению которой релевантны знания инженера по ремонту энергетического оборудования; 4) построение маршрутов выездных бригад для выполнения переключений и восстановления поврежденного оборудования (актуальны знания

начальника района электрических сетей); 5) определение порядка переключений, для решения которой (знания инженера по оперативным режимам организации электроэнергетики); 6) составление плана восстановления – задача координации промежуточных решений и интеграции частных решений задач, для решения которой востребованы знания диспетчера регионального оперативно-технологического управления.

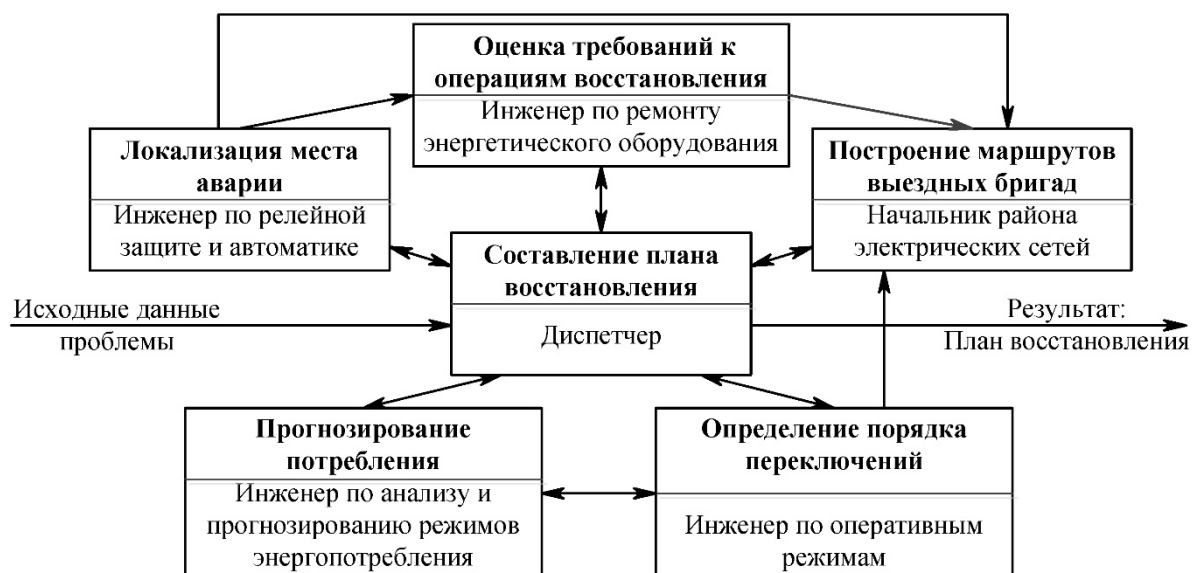


Рис. 2. Декомпозиция проблемы планирования восстановления региональной распределительной электросети.

Для компьютерного моделирования коллективного принятия решений оперативным персоналом энергоснабжающей организации, энергетиками, логистами, специалистами по охране труда с использованием методов гетерогенного мышления предлагается функциональная структура ГИМСГМ, представленная на рис. 3. Она представляет собой гибридную интеллектуальную многоагентную систему [13], расширенную агентом-фасилитатором, организующим коллективные процессы, и соответствующими отношениями между ним и агентами подсистемы решения задачи. Он идентифицирует этапы процесса решения проблемы, состав агентов-экспертов и их «стиль мышления», сложившуюся ситуацию в ГИМСГМ, возникающие положительные и отрицательные групповые эффекты, воздействует на агентов-экспертов, чтобы активировать релевантный ситуации «стиль мышления», минимизировать отрицательные эффекты и усилить положительные, используя, среди прочего, модель «ромб группового принятия решений» [6]. Согласно этой модели, процесс решения проблемы ГИМСГМ проходит три стадии: дивергентного мышления, бурления и конвергентного мышления. На стадии дивергентного мышления агенты-эксперты генерируют множество вариантов решения проблемы, а агент-фасилитатор стимулирует их выработку соответствующими методами [14]. В случае если даже с применением методов дивергентного мышления противоречий не возникает, т.е. задача имеет очевидное решение, процесс завершается. В противном случае между агентами ГИМСГМ возникают конфликты по поводу знаний, убеждений, мнений, т.е. своего рода когнитивный конфликт [14, 15]. Конфликт – отличительная черта стадии бурления, позволяющая агенту-фасилитатору предпринять меры по сближению точек зрения агентов. На стадии конвергентного мышления агенты совместно переформулируют, дорабатывают предложенные решения, пока не получают коллективное решение, релевантное разнообразию моделей экспертов ГИМСГМ.



Рис. 3. Функциональная структура гибридной интеллектуальной многоагентной системы гетерогенного мышления.

Функционал других агентов типичен для гибридных интеллектуальных многоагентных систем. Интерфейсный агент отвечает за взаимодействие с пользователем: запрашивает входные данные и выдает результат, а также визуализирует процесс решения проблемы. Агент, принимающий решения, моделирует работу начальника центральной диспетчерской службы регионального диспетчерского управления, ставя задачи агентам-экспертам, собирая результаты работы, определяя, достигнут ли критерий останова, и либо принимая итоговое решение, либо запуская новую итерацию процесса решения проблемы. Агенты-эксперты: агент релейной защиты, агент прогноза режимов энергопотребления, агент ремонта оборудования, агент района электросети, агент оперативных режимов; агент-диспетчер – имея знания о соответствующей своей «специальности» предметной области и моделируя определенный вид мышления, генерируют решения. Агент-посредник выполняет служебную работу по отслеживанию имен, моделей и возможностей зарегистрированных агентов. Агенты-решатели в верхней части рис. 3: аналитический, стохастический, логический, нечеткий, лингвистический – вместе с агентом-преобразователем реализуют гибридную составляющую ГИМСГМ, комбинируя разнородные знания, методы, модели и алгоритмы решения задач. Модель предметной области – семантическая сеть, основа взаимодействия агентов, строится по концептуальной модели решаемой задачи.

Как видно из сравнения рис. 2 и 3, предложенная модель ГИМСГМ наследует структуру коллектива, решающего проблему восстановления региональной электросети, а также содержит агентов-решателей, покрывающих известные методы формализованного представления систем [13], то есть учитывает, как проблемную, так и инструментальную неоднородность. ГИМСГМ по аналогии с многоагентными системами обладают высокой гибкостью, могут быть дополнены и модифицированы, устойчивы к сбоям, благодаря достаточному запасу компонентов и самоорганизации,

имеют развитые возможности и средства адаптации к изменениям среды, в том числе путем модификации своей структуры и параметров. Применение методов гетерогенного мышления в таких системах релевантно моделирует эффективные практики коллективного решения проблем. Внедрение таких систем в практику оперативно-диспетчерского управления позволит вырабатывать решения в проблемных ситуациях сложных, динамических сред региональных электросетей.

Список литературы

1. Авария в энергосистеме Калининградской области. E-print: <http://allabc.ru/energetika/2212-avariya-v-energositeme-kaliningradskoj-oblasti.html>.
2. Барабаши А.Л. Безмасштабные сети / А.Л. Барабаши, Э. Бонабо // В мире науки. — 2003. — № 8. С. 54–63.
3. Колесников А.В. Гибридные интеллектуальные системы. Теория и технология разработки / А.В. Колесников. — СПб.: Изд-во СПбГТУ, 2001. — 711 с.
4. Тарасов В.Б. От многоагентных систем к интеллектуальным организациям: философия, психология, информатика / В.Б. Тарасов. — М.: Эдиториал УРСС, 2002. — 352 с.
5. Kaner S. The Facilitator's Guide to Participatory Decision-Making / S. Kaner, L. Lind, C. Toldi, et. al. — San Francisco, CA: Jossey-Bass, 2011. — 368 p.
6. Боно Э. Параллельное мышление. От сократовского мышления к дебоновскому / Э. Боно. — Минск: Попурри, 2007. — 320 с.
7. Gardner H. Multiple Intelligences. The Theory in Practice. / H. Gardner. — New York: Basic Books, 1993. — 320 p.
8. Успенский М.И. Методы восстановления электроснабжения в распределительных сетях / М.И. Успенский, И.В. Кызродев. — Сыктывкар, 2010. — 124 с.
9. Thiebaux S. Supply Restoration in Power Distribution Systems — A Benchmark for Planning under Uncertainty / S. Thiebaux, M.-O. Cordier // In: Proceedings of the 6th European Conference on Planning (ECP-01). — Toledo, 2001. — PP. 85-96.
10. Нариньяни А.С. Инженерия знаний и НЕ-факторы: краткий обзор-08 / А.С. Нариньяни // Вопросы искусственного интеллекта. — 2008. — №1. С. 61–77
11. Kumar V. DG integrated approach for service restoration under cold load pickup / V. Kumar, H. C. R. Kumar, I. Gupta, H. O. Gupta // IEEE Transactions on Power Delivery. — 2010. — Vol. 25. — Iss. 1. P. 398–406.
12. Hentenryck P. Transmission system repair and restoration / P. Hentenryck, C. Coffrin // Mathematical Programming. Ser. B. — 2015. — Vol. 151. P. 347–373.
13. Колесников А.В. Решение сложных задач коммивояжера методами функциональных гибридных интеллектуальных систем / А.В. Колесников, И.А. Кириков, С.В. Листопад и др. — М.: ИПИ РАН, 2011. — 295 с.
14. Колесников А. В. Модель гибридной интеллектуальной многоагентной системы гетерогенного мышления для информационной подготовки оперативных решений в региональных электрических сетях / А. В. Колесников, С. В. Листопад // Системы и средства информатики. — 2018. — Т. 28. — № 4. — С. 31–41.
15. Tang A. Y. C. A Conflict Resolution Strategy Selection Method (ConfRSSM) in Multi-Agent Systems / A. Y. C. Tang, G. S. Basheer // International Journal of Advanced Computer Science and Applications. — 2017. — Vol. 8. — Iss. 5. P. 398–404.

БАЗОВЫЙ АЛГОРИТМ МЕТОДА ГЛОБАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ С СЕЛЕКТИВНЫМ УСРЕДНЕНИЕМ ИСКОМЫХ ДИСКРЕТНЫХ ПЕРЕМЕННЫХ

А.С. Михалев¹, А.И. Рубан²

Сибирский федеральный университет,
Институт космических и информационных технологий, каф. «Информатика»

¹asmikhalev@yandex.ru

²ai-rouban@mail.ru

Представлен базовый алгоритм глобальной оптимизации на множестве дискретных переменных с упорядоченными возможными значениями при наличии ограничений неравенств. За основу взята вычислительная схема оптимизации на множестве непрерывных переменных, и она трансформирована для оптимизации по дискретным переменным. Пробные и рабочие шаги так же разнесены во времени. Перед выполнением каждого рабочего шага осуществляется серия измерений минимизируемой функции в пробных точках. На основе этой информации при фиксированном коэффициенте селективности ядра выполняются численно селективное усреднение искомым переменных. Для каждой дискретной переменной ставится во взаимно однозначное соответствие безразмерная непрерывная переменная, включающая номера возможных упорядоченных значений дискретной переменной. За счёт взаимно однозначного соответствия осуществляется переход в пробных точках от непрерывных переменных к дискретным возможным значениям. Такой же (но уже обратный) переход происходит и для получаемых усреднённых значений искомым переменных. Осуществляется также адаптивная перестройка размеров множества возможных пробных движений, и учитываются ограничения типа неравенств. На тестовом примере продемонстрированы высокие скорость сходимости и помехоустойчивость алгоритма.

Ключевые слова: глобальная оптимизация, дискретные переменные, селективное усреднение искомым переменных, многоэкстремальная функция, ограничения типа неравенств.

1. Введение

Задача поиска глобального экстремума целевой функции в допустимой области изменения искомым переменных (непрерывных, дискретных, смешанных) относится к классу очень сложных. Специфика задачи глобальной оптимизации обусловлена многоэкстремальным видом целевых функций, наличием разрывов, дискретным характером части или всех переменных, большой размерностью, наличием ограничений типа неравенств и равенств.

В практических задачах все или часть переменных являются дискретными. Развитие методов и алгоритмов глобальной оптимизации по дискретным переменным позволяет выполнять оптимизацию не только по обычным параметрическим переменным (параметрам оборудования, параметрам функционирования процессов), но и по структурным дискретным переменным (при синтезе наилучших сетевых моделей, при построении схем, при идентификации структуры и параметров адекватных статических и динамических моделей объектов).

В представленной работе для решения задач глобальной оптимизации на множестве дискретных переменных предлагается подход, основанный на селективном усреднении переменных с адаптивной перестройкой допустимого множества пробных движений [1-3].

2. Постановка задачи

Решается задача поиска глобального минимума целевой функции $f(y)$ на множестве дискретных переменных с упорядоченными возможными значениями при наличии ограничений-неравенств:

$$f(y) = \text{glob min}, \varphi_j(y) \leq 0, j = \overline{1, m}. \quad (1)$$

Здесь $y = (y_1, \dots, y_h)$ - вектор h дискретных переменных. Каждая дискретная переменная y_t имеет r_t возможных упорядоченных значений $y_{t,1}, \dots, y_{t,r_t}$.

Ограничения неравенства выделяют (сужают) допустимое множество возможных значений, внутри которого ведется поиск глобального минимума. Требуется определить положение $y_{\min}$ глобального минимума целевой функции $f(y)$ на ограниченном множестве изменения её переменных.

Функция $f(y)$ является многоэкстремальной и может быть искажена помехой. Функции ограничений могут быть невыпуклыми. Поиск минимума осуществляется на основе только измерений или вычислений указанных функций $f(y)$, $\varphi_j(y) \leq 0, j = \overline{1, m}$ в выбранных пробных точках, удовлетворяющих ограничениям неравенствам: $\varphi_j(y) \leq 0, j = \overline{1, m}$.

3. Базовый алгоритм оптимизации

В основе базового алгоритма лежит разнесение во времени пробных и рабочих шагов, равномерное размещение пробных точек на допустимом множестве возможных значений дискретных искомым переменных, численное селективное усреднение (вычисление оценки математического ожидания) искомым переменных по результатам вычисленных (или измеренных) значений оптимизируемой функции в пробных точках. Осуществляется также на каждом рабочем шаге адаптивная перестройка размеров множества пробных точек.

Решение задачи оптимизации с дискретными переменными основано на переходе от каждой дискретной переменной к соответствующей вспомогательной непрерывной переменной. В процессе вычислений выполняется и обратный, также однозначный переход к реальным значениям дискретных переменных.

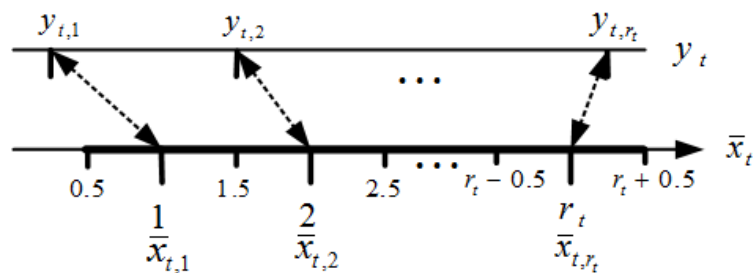


Рис.1. Взаимно-однозначный переход от возможных значений дискретной переменной к её номерам на оси вспомогательной непрерывной переменной.

Каждой дискретной переменной y_t ставится в соответствие вспомогательная непрерывная переменная $\bar{x}_t$ - см. рисунок 1. От возможных значений $y_{t,1}, \dots, y_{t,r_t}$

дискретной переменной Y_t осуществляется переход к их номерам. Номера расположены на оси вспомогательной безразмерной непрерывной переменной $\bar{X}_t$. На рис. 1 также указаны одинаковые единичной длины примыкающие друг другу подынтервалы и получаемый исходный интервал возможного изменения вспомогательной непрерывной переменной.

В центре каждого из подынтервалов находится номер соответствующего дискретного значения. На начальном этапе поиска интервал возможных значений вспомогательной непрерывной переменной имеет вид: $[0.5; r_t + 0.5]$.

Дальнейшие вычисления на каждом рабочем шаге ведутся для номеров $\bar{X}_{t,N}^{(i)}$ возможных значений дискретных переменных Y_t .

Для получения n пробных точек $y^{(i)}, i = \overline{1, n}$ последовательно по равномерному закону генерируются на «прямоугольном» множестве точки и из них оставляются только те точки, которые удовлетворяют ограничениям неравенствам.

После l -го рабочего шага генерирование пробных точек осуществляется одинаково:

$$\bar{X}_t^{(i)} = \bar{X}_t^l + \Delta \bar{X}_t^l u_{\bar{X}_t}^{(i)}, u_{\bar{X}_t}^{(i)} \in [-1; 1], t = \overline{1, h}, i = \overline{1, n}. \quad (2)$$

В формуле (2) $u_{\bar{X}_t}^{(i)}$ – элементы псевдослучайной последовательности равномерно распределенной случайной непрерывной величины.

В полученных пробных точках вычисляется значение минимизируемой функции $f^{(i)} \equiv f(y^{(i)}), i = \overline{1, n}$. Далее уточняется положение минимума.

Новое значение $\bar{X}^{l+1}$ по вспомогательным переменным и размеры $\Delta \bar{X}^{l+1}$ «прямоугольного» множества пробных движений рассчитываются по следующим формулам:

$$\begin{aligned} \bar{X}_t^{l+1} &= \sum_{i=1}^n \bar{X}_{t,N}^{(i)} \bar{p}_{s,\min}^{(i)}, t = \overline{1, h}, \\ \bar{p}_{s,\min}^{(i)} &= \frac{p_s(g_{\min}^{(i)})}{\sum_{j=1}^n p_s(g_{\min}^{(j)})}, g_{\min}^{(i)} = \frac{f^{(i)} - \hat{f}_{\min}}{\hat{f}_{\max} - \hat{f}_{\min}}, \\ \Delta \bar{X}_t^{l+1} &= \gamma_q \left(\sum_{i=1}^n |\bar{X}_{t,N}^{(i)} - \bar{X}_t^l|^q \bar{p}_{s,\min}^{(i)} \right)^{1/q}, t = \overline{1, h}, \\ l &= 0, 1, 2, \dots; [0 < \gamma_q, q \in \{1, 2, \dots\}, 0 < s]. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь $\hat{f}_{\max} = \max\{f^{(i)}, i = \overline{1, n}\}$, $\hat{f}_{\min} = \min\{f^{(i)}, i = \overline{1, n}\}$, $p_s(\cdot)$ – неотрицательное ядро, s – коэффициент селективности ядра. Неотрицательные ядра $\bar{p}_{s,\min}^{(i)}$ нормированы на единицу на системе n пробных точек: $\sum_{i=1}^n \bar{p}_{s,\min}^{(i)} = 1$. Аргумент ядра – это безразмерная переменная, которая всегда лежит в интервале $[0; 1]$. Ядра $p_s(\cdot)$ монотонно убывают при возрастании аргумента.

Удобно задавать $p_s(g)$ в виде возведения в степень s сравнительно простого убывающего ядра: $p_s(g)=[p(g)]^s$. Возможные степенные ядра $p(g)$: линейное – $p(g)=1-g$, параболическое – $p(g)=1-g^2$, кубическое – $p(g)=1-g^3$ и др. Примерами другого вида ядер служат экспоненциальное ядро – $p(g)=e^{-g}$, гиперболическое ядро – $p(g)=g^{-1}$. Далее будут рассматриваться только степенные ядра.

Усреднённые величины для вспомогательных переменных вычисляются как оценки соответствующих статистических характеристик дискретных случайных величин. Так $\bar{x}_t^{l+1}$ оценивает математическое ожидание, а $\Delta\bar{x}_t^{l+1}$ (при $q=2$ и $\gamma_q=1$) является оценкой среднего квадратического отклонения дискретной случайной величины.

На l -ом шаге рассчитанное в соответствии с формулой (3) значение $\bar{x}_t^{l+1}$ попадает в единичный интервал, охватывающий некоторый номер соответствующего значения дискретной переменной. Так вычисляются значения всех дискретных переменных.

При подходе к минимуму область пробных движений уменьшается, за счёт этого происходит все более точное отслеживание положения экстремума. Критерием останова процесса поиска обычно служит условие уменьшения (при некотором l) размера области варьирования переменных до заданной величины:

$$\max \left\{ \frac{\overline{\Delta\bar{x}_t^l}}{\Delta\bar{x}_t^0}, t = \overline{1, h} \right\} \leq \varepsilon_2. \quad (4)$$

4. Численный пример

Задана целевая функция $f(y_1, y_2)$ с шестнадцатью минимумами. Дискретная переменная y_1 принимает следующие возможные значения $\{-13, -8, -4, 0, 3, 6, 9, 11, 13\}$, $y_2 - \{-13, -8, -4, -1, 2, 5, 7, 9, 11, 12, 13\}$.

Для построения многоэкстремальной функции применяется схема, основанная на использовании степенных потенциальных функций. Данный способ синтеза тестовых функций является наиболее простым и эффективным в использовании методом. Каждая потенциальная функция имеет один минимум и из них в каждой фиксированной точке конструируется многоэкстремальная функция на основе операции $\min$. При этом в итоговой функции используется только некоторая окрестность минимума каждой потенциальной функции без изменения положения каждого минимума и величины функции в окрестности минимума.

Допустимая область имеет вид квадрата, заданного двумя ограничениями-неравенствами:

$$\varphi_1(y_1) \equiv |y_1| - 15 \leq 0; \quad \varphi_2(y_2) \equiv |y_2| - 15 \leq 0.$$

Глобальный минимум приходится на точку $y^* = (9; 9)$ и в ней $f(y^*) = 0$.

Вводим дополнительные ограничения, одно из которых отсекает указанный минимум:

$$\varphi_3(y) \equiv y_1 + y_2 - 12 \leq 0; \quad \varphi_4(y) \equiv -y_1 - y_2 - 10 \leq 0.$$

Условный глобальный минимум теперь приходится на точку $y^* = (6; 5)$. В ней $f(y^*) = 4$.

На рис. 2 представлены пространственный вид минимизируемой функции, положения минимумов заданной функции и ограничения, выделяющие допустимую

область. Каждая точка на рисунке справа соответствует положению минимума (маленькие точки – точки локального минимума, большие – точки глобального минимума) заданной целевой функции. Пересечение пунктирных линий – допустимые точки с одним из сочетаний возможных значений её координат. Оба рисунка построены в предположении, что дискретные переменные являются непрерывными, а затем указаны возможные значения дискретной переменной. На самом же деле мы имеем 9 сечений представленной функции при указанных дискретных значениях первой переменной y_1 и 11 сечений – для второй переменной y_2 .

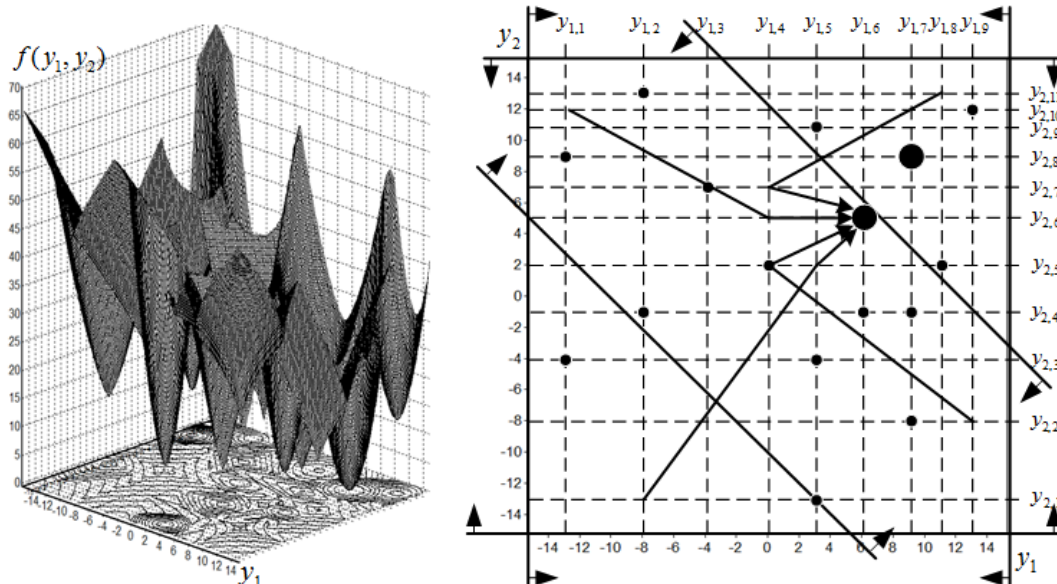


Рис.2. Многоэкстремальная функция $f(y)$: слева – пространственный вид функции, справа – положение минимумов, допустимая область поиска и траектории движения в окрестность глобального минимума для четырех исходных точек $(-8; -13)$, $(-13; 12)$, $(13; -8)$, $(11; 13)$.

Продemonстрируем работоспособность предложенного алгоритма. Комплексной характеристикой процесса поиска глобального минимума является оценка $\hat{P}_{\text{прав}}$ вероятности попадания получаемого решение y^* в окрестность истинного решения y^{**} :

$$: \left| y_{t,N^*}^* - y_{t,N^{**}}^{**} \right| = 0, t = \overline{1, h}, \quad (5)$$

т.е. значения рассчитанных значений дискретных переменных точно совпадают с истинными значениями в точке минимум.

Рассмотрим зависимость оценки вероятности отыскания истинного решения от количества пробных точек n . Для этого осуществляется M реализаций процесса поиска минимума. Оценка вероятности $\hat{P}_{\text{прав}}$ будет равна относительной частоте попадания полученных решений y_j^* , $j = \overline{1, M}$ в окрестность истинного решения.

Параметры алгоритма минимизации следующие: $(y^0, \bar{x}^0) = (-13, -4; 1, 3)$, $\bar{\Delta x}^0 = (8.5, 8.5)$, $\gamma_q = 1$, $q = 2$, ядро по минимизируемой функции параболическое со степенью селективности $s = 300$ (1000 при 100% помехе). Параметры исследования: число реализаций $M = 101$.

Помеха представляет собой центрированную равномерно распределённую случайную величину. Выбор равномерного закона распределения помехи соответствует худшей ситуации (с максимальной энтропией), которая в принципе может встретиться при реальном искажении оптимизируемой функции. При этом интенсивность помехи определяется по отношению к интенсивности изменения сигнальной части (функции без помехи) в допустимой области, задаваемой ограничениями.

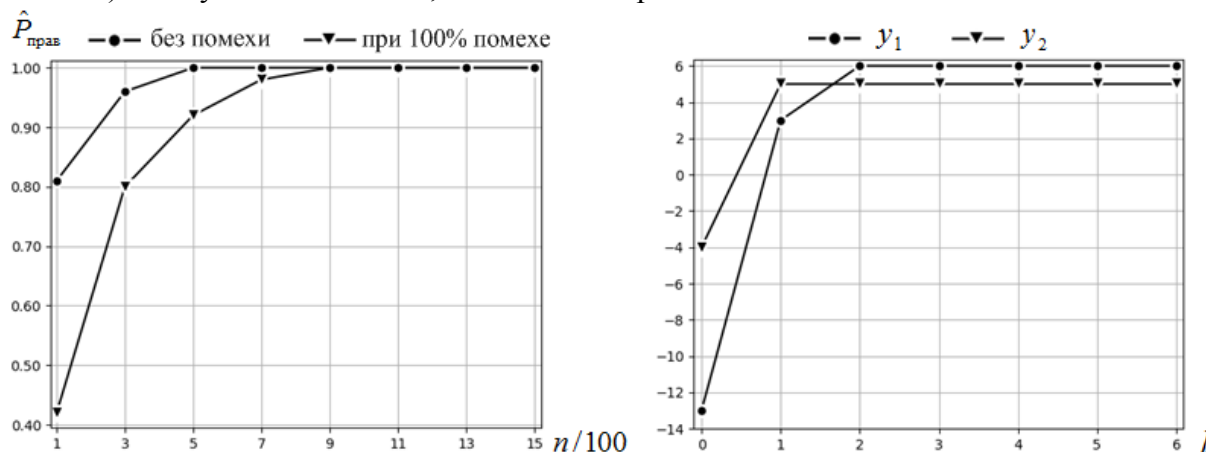


Рис.3. Слева – зависимость оценки вероятности попадания найденного решения в окрестность истинного решения от объема пробных точек, справа – изменение переменных по итерациям при 100% помехе.

На рис. 3 (слева) представлена полученная зависимость $\hat{P}_{\text{прав}}$ от числа пробных точек n . На рис. 3 (справа) дана типичная реализация перестройки от шага к шагу дискретных переменных при поиске глобального минимума при числе пробных шагов $n = 500$ (для случая без помехи требуется 3-5 итераций, для случая со 100% помехой – 7-11 итераций).

Заключение

Представленный базовый алгоритм глобальной оптимизации имеет достаточно простую структуру. За счет селективного усреднения искоемых переменных возрастает помехоустойчивость алгоритма. Переход в алгоритме к безразмерным (относительным) переменным существенно увеличивает скорость сходимости алгоритма, и уменьшает число настраиваемых параметров. Все это особенно важно при учете большого количества разнородных ограничений и при увеличении количества искоемых переменных.

Размерность задачи оптимизации при выбранном подходе не меняется. Сложность расчетов по сравнению с задачей с непрерывными переменными увеличивается незначительно. Все основные свойства алгоритма тоже сохраняются.

Список литературы

1. Rouban A.I. Method for global optimization in continuous space / A.I. Rouban // J. AMSE. Series: Advances A. – 2003. – 40(4). – pp. 9-28.
2. Рубан А.И. Глобальная оптимизация методом усреднения координат / А.И. Рубан — ИПЦ КГТУ, Красноярск, 2004. — 302 с.
3. Рубан А.И. Метод глобальной оптимизации, основанный на селективном усреднении координат, при наличии ограничений / А.И. Рубан // Ветник Томского государственного университета. Управление, вычислительная техника и информатика. – 2013. – 1(22). – с. 114-123.

МНОГОСЛОЙНЫЕ ИНС С ПЕРЕМЕННОЙ ПРОВОДИМОСТЬЮ СИГНАЛА В ЗАДАЧАХ РАСПИСАНИЯ²

А.М.Ольшанский¹, А.В.Игнатенков², И.А.Довгерд¹, Г.А.Довгерд¹

¹Научно-исследовательский и проектно-конструкторский институт информатизации, автоматизации и связи на железнодорожном транспорте

lexolshans@gmail.com

²ВТБ Капитал *a.ignatenkov@gmail.com*

Рассмотрим следующую задачу.

Определения

Дано множество агентов $\{A\}$, $i=1, \dots, n$.

Для каждого агента A_i задан момент отправления с желаемой точки инфраструктуры $t_{Ai}^{(1)}$ и желаемое время прибытия в конечную точку движения по инфраструктуре $t_{Ai}^{(2)}$.

В процессе движения по инфраструктуре от точки $t_{Ai}^{(1)}$ до точки $t_{Ai}^{(2)}$ агент A_i проходит некоторые $j=1, \dots, m$ реперные точки (это могут быть станции на линии, остановочные пункты на автодороге, камеры наблюдения в отдельных местах улиц и т.п.). Момент прохождения реперной точки называется $t_{Ai}^{(j)}$.

Вектор $R_i = (t_{Ai}^{(1)}, \dots, t_{Ai}^{(j)}, \dots, t_{Ai}^{(2)})$ составляет универсальное расписание агента A_i по заданной инфраструктуре.

Расписание агента будем называть допустимым, если для агента A_i , реализующего расписание R_i , в каждый момент времени нахождения на участке S_q , $q=1, \dots, z$ инфраструктуры S выполняется условие: $(R_i|S_q) \cap (R_l|S_q) = \emptyset$, то есть, столкновение любых агентов на одном и том же участке инфраструктуры запрещено.

Будем считать, что элементы пространства строго раздельны и кодируются разными участками инфраструктуры (например, железнодорожный путь с электропоездом, который стоит у платформы в ожидании посадки, будем считать двумя участками инфраструктуры).

В случае, когда несколько агентов могут находиться на одном участке инфраструктуры (пассажиры ждут автобус на остановке), то однородные агенты будут объединяться в струю определенной мощности, и дальнейшее расписание будет строиться для струи.

Расписание агента будем называть устраивающим, если оно является допустимым и при этом выполняется условие $|t_{Ai}^{(2)} - t_{Ai}^{(2*)}| < \delta$, где $t_{Ai}^{(2*)}$ - построенное системой расписание, δ - некоторая задаваемая точность.

Задача верхнего уровня иерархии

Для набора инфраструктур $\{S_j\}$, $j=1, \dots, m$, и множества агентов $\{A\}$, $i=1, \dots, n$ разработать устраивающие расписания $\{R_i\}$, $i=1, \dots, n$. При этом для части агентов требуется обеспечить равенства вида:

$$\exists t_k \in (R_i|S_q), (R_r|S_g): (R_i|S_q) \cap (R_r|S_g) = TRUE$$

То есть, для агента A_i , перемещающегося по участку инфраструктуры S_q по расписанию R_i , и для агента A_r , перемещающемуся по участку инфраструктуры S_g существует некоторый момент времени, в который расписания этих агентов пересекаются. При этом для времени $t > t_k$ одно или больше расписаний прекращает свое существование в связи с образованием нового агента A_n .

² Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (проект 17-20-01065 «Разработка теории нейросетевого управления железнодорожными транспортными системами»)

Возможен и вариант, когда вместо одного агента в данной точке появляется несколько.

Например, такое проявляется в тот момент, когда на одной из станций готовится к отправлению агент «Поезд». Для этого необходимо, чтобы агенты «Бригада», «Локомотив», «Вагон» (по их количеству), каждый из которых имеет свое расписание, объединились в агент «Поезд», который получает свое собственное расписание.

Следуя далее по инфраструктуре железной дороги, агент «Поезд» прибывает на путь заданной станции (элемент инфраструктуры), где происходит его разделение, в результате которого появляются агенты «Вагон» (в новом количестве, так как вагоны в составе могут быть специализированы по группам), «Локомотив», «Бригада», каждый из которых приобретает новые расписания.

Задача нижнего уровня иерархии

Условимся называть задачу построения расписания одного агента по заданной инфраструктуре задачей нижнего уровня.

На каждом участке инфраструктуры S_q , $q=1, \dots, z$ на времена, с которыми агент A_i проходит заданный участок, действует ряд формализуемых и неформализуемых факторов, таких что $t_{Ai}^{(q)} = f(x_1^{\phi}, \dots, x_k^{\phi} x_{k+1}^{н\phi}, \dots, x_n^{н\phi})$, где индекс « ϕ » относится к формализуемым факторам, а «н ϕ » - к неформализуемым.

Состав факторов для каждой инфраструктуры отличается.

Добавим, при этом, что факторы могут быть частично коррелируемыми или полностью независимыми. Кроме того, часто при реализации конкретного расписания лимитирующим остается один или два из неформализуемых факторов, которые являются основными.

В связи с этим будем говорить, что существует для каждого агента A_i некоторая история H , представляющая собой набор ранее реализованных расписаний R_i .

Будем считать, что для агента A_i требуется разработать интеллектуальный алгоритм синтеза устраивающего расписания с заданной точностью.

При этом полученные расписания агентов на данной инфраструктуре должны позволять осуществить стыковку по границам инфраструктур с точностью, не превышающей $N'_{\text{стык}}$ для конкретных агентов.

Некоторые пути решения

Задача нестабильных расписаний в разные годы решалась различными методами.

Классические приемы решения такой задачи (последовательный, с использованием жесткой нормативно-справочной информации; способ пониточной прокладки основываются на неэффективных приемах, алгоритмы на их основе опираются на неадаптивные решения, требуют значительных затрат вычислительного времени и постоянной корректировки решений при изменении условий, а также не учитывают неформальные факторы.

Как отмечается в работе [1], «до настоящего времени задача построения адаптивного и эффективного с позиции использования мощностей инфраструктуры расписания не реализована даже на участках меньшей сложности. Для конкретных случаев построения расписания на заданном участке все алгоритмы сводятся к перебору всех возможных случаев с вкраплениями оптимизаций типа отбрасывания ветви неправильных решений».

Проблема заключается и в том, что большая часть задач построения графика является NP-трудной. Для таких задач часто используются искусственные нейронные сети, способность которых к решению слабоформализуемых задач общеизвестна.

Построение ИНС и постобучение

Для решения такой задачи предлагается многослойная искусственная нейронная сеть с переменной проводимостью сигнала, сочетающая в себе некоторые черты сети Уилшоу - ван дер Мальсбурга, принцип применения производной функции ошибки из алгоритма обратного распространения сигнала и специальные особенности, такие, как

многослойность, полная связность между слоями и частичная связность в слое, двойной набор весов и др.[1, с. 81].

Данная ИНС была применена для решения задачи упорядочения движения поездов на ряде участков сети железных дорог РФ с двухпутным и однопутным режимом движения и показала удовлетворительные результаты для построения графиков при степени использования пропускной способности линии до 64% [2].

Тем не менее, в связи с кубической сложностью такой ИНС в зависимости от числа нейронов в слое, а также в силу квазихаотического поведения сигнала ошибки такой сети возникла потребность выработки новых способов обучения разработанной конструкции.

Смысл техники постобучения следующий: на первой эпохе ИНС выводит первичные ошибки и сохраняет их в качестве контрольных. На последующих эпохах текущие ошибки изменяются, но перед выводом сравниваются со значениями контрольных ошибок предыдущей эпохи. Если ошибка новой эпохи оказывается больше контрольной ошибки, применяется процедура переобучения и снижения величины ошибки, тем самым сеть старается свести ошибку к минимальному значению, попутно стремясь к квазиустойчивому положению. В случае, когда ошибки новой эпохи становятся меньше контрольных ошибок предыдущей, происходит перезапись контрольных ошибок.

Технически, постобучение представляет собой часть обычного алгоритма обучения сети, но без блока ликвидации конфликтов. Реализованное, как и весь код, на С#, оно усиливает привлекательность (значения весов) нужных связей между нейронами.

Пример постобучения показан ниже.

```
//вычисляем контрольные ошибки с помощью стандартных процедур.
double errorChetK = layers[0].GetUsualErrorChet(iCountTeach);
double errorNechetK = layers[0].GetUsualErrorNechet(iCountTeach);
double posErrorChetK = layers[0].GetFastErrorChet(iCountTeach, out
posChetNumbers);
double posErrorNechetK = layers[0].GetFastErrorNechet(iCountTeach, out
posNechetNumbers);
int l = 0;
while (errorChet >= errorChetK && errorNechet >= errorNechetK && l < 25)
{
    for (int i = 1; i < countStations; i++)
    {
        List<TrainCrossing> collisions = new List<TrainCrossing>();
        collisions = GetCrossingTrainsBetweenLayers(layers[i - 1], layers[i]);
        UsualChetTeaching(layers[i], errorChet, collisions, posChetNumbers);
    }
    Console.WriteLine("Идет обработка доп. обучением");
    l++;
}
```

Здесь l – внутренний счетчик для постобучения, errorChet (errorNechet) - значение ошибки по четным (нечетным) сигналам сети, ошибки с постфиксом «К» - значения контрольных ошибок, collisions – число коллизий (попутных пересечений сигналов при конкуренции за один нейрон).

Постобучение выполняется примерно 20-30 раз за один запуск, после чего продолжается обычное обучение ИНС.

Через какое-то количество эпох ИНС приходит в квазиустойчивое состояние, но случаются и скачки, которые возникают, в среднем, один раз на 275 эпох.

На рис. 1 приведено разложение сигнала ошибки ИНС при использовании техники постобучения с помощью метода STL[3], часто используемого на практике для сигналов периодической и квазипериодической природы.

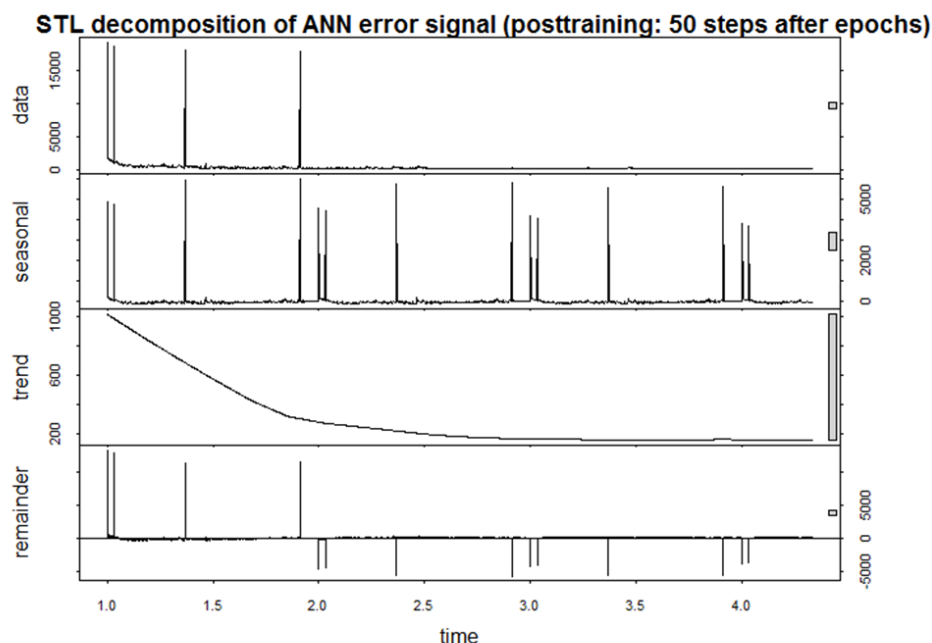


Рис.1. Разложение сигнала ИНС

Как показывает рис.1, в результате постобучения значительных скачков становится значительно меньше (ряд «data»), а трендовая компонента (ряд «trend») при отсутствии скачков находится в границах 0-200 единиц ошибки, что для задания в 175 упорядочиваемых процессов означает в среднем 1,14 минуты опоздания на каждый прокладываемый поезд.

Таким образом, можно сделать следующие выводы:

1. Разработана искусственная нейронная сеть для упорядочения любых процессов работы агентов для задач нестабильного расписания, позволяющая реализовать временное взаимодействие через комплекты связей между весами. Любая новая сущность может быть реализована через трансформацию в категорию «связь между нейронами» особого вида (например, нейроны на конечных слоях, закольцованные между собой в пределах этого же слоя, могут позволить решить задачу увязки локомотивов по станции назначения с минимальным их простоем)
2. Для улучшения качества обучения разработанной ИНС создан прием постобучения, сокращающий число «выбросов» (экстремально высоких значений ошибки сети) до 2-3 на каждые 200-300 эпох в среднем.

Список литературы

1. Игнатенков А.В. Нейросетевое моделирование и упорядочение транспортных потоков на линиях железных дорог.: дис.... к.т.н., 05.13.18 – Математические модели, численные методы и комплексы программ//Пенза, Пензенский ГУ, 2018. - 144 с.
2. Игнатенков А. В., Ольшанский А.М. Способ построения нейронной сети с переменной проводимостью сигнала для разработки графика движения поездов на однопутном участке // Вестник Самарского государственного университета путей сообщения. – 2016. – № 3 (33). – С. 11–16.
3. R. B. Cleveland, W. S. Cleveland, J.E. McRae, and I. Terpenning (1990) STL: A Seasonal-Trend Decomposition Procedure Based on Loess. Journal of Official Statistics, 6, 3–73.

КОМПЬЮТЕРНЫЙ АНАЛИЗ ХИМИЧЕСКИХ ДАННЫХ ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ ТОКСИКОЛОГИЧЕСКИХ СВОЙСТВ

А.Л. Осипов, В.П. Трушина

Новосибирский государственный университет экономики и управления,
alospip@mail.ru

Статья посвящена исследованию математических моделей и информационно-коммуникационных технологий, позволяющих проводить сравнительный анализ моделей предсказания кожно-резорбтивной токсичности. В моделях в качестве факторов используются коэффициент растворимости химического вещества в воде, а также информационные и электронные дескрипторы, порождаемые из структурных формул молекул с помощью информационно-коммуникационных технологий. Вычислительные эксперименты продемонстрировали эффективность предсказания за счет использования статистических методов, компьютерных технологий и разработанного Web интерфейса.

В эпоху активного развития информационно-коммуникационных систем важное место занимают системы анализа, обработки и хранения информации. На стадии синтеза новых соединений и композиций эти системы позволяют осуществлять целенаправленный отбор менее токсичных и опасных соединений, используя для этого целый набор качественных и количественных критериев. Широкое использование при таком отборе математических методов, компьютерных технологий и фактографических банков данных позволяет отсеивать заведомо неактивные или высокотоксичные вещества, тем самым значительно сокращая сроки создания физиологически активных соединений с заданными токсикологическими свойствами.

Для снижения финансовых и временных ресурсов при синтезе и испытании органических соединений могут быть использованы программные системы, базирующиеся на методах количественных соотношений между структурой и активностью или свойствами органических веществ.

Теоретической базой для построения математических моделей прогноза и развития расчетных методов определения кожно-резорбтивной токсичности является объективно существующая связь между токсическим действием вещества, его физическими свойствами и химической структурой.

Поэтому для повышения точности и достоверности расчетной оценки параметров токсичности следует широко использовать математические модели, компьютерные технологии и описание химических веществ с помощью различного рода факторов.

Активность химических веществ, включая и токсичность, определяется, во-первых, топологией молекулы (первичной химической структурой – числом химических связей, разветвленностью и т.п., которые хранятся в базах данных), ее топографией (пространственным расположением атомов и соответствующих подструктур), во-вторых, электронной структурой молекулы и, в-третьих, ее физико-химическими свойствами.

В качестве первого параметра для моделирования кожно-резорбтивной токсичности был избран дескриптор, характеризующий среднее число электронов на внешней оболочке атомов в молекуле $Z = \sum_{i=1}^N n_i Z_i / N$, где n_i - число атомов i -го сорта с числом валентных электронов Z_i (то есть число электронов на внешней оболочке i -го атома). Суммирование выполняется по всем атомам в молекуле, а N - общее число атомов.

Параметр Z связан с реально существующим электростатическим потенциалом, который создается совокупностью заряженных частиц, величина которого меняется от молекулы к молекуле. В качестве второго параметра был выбран информационный фактор H , который измеряется в битах, вычисляется по следующей формуле

$H = -\sum_{i=1}^k p_i \log_2 p_i$, где $p_i = \frac{n_i}{N}$, n_i – число атомов i -го сорта, N – общее число атомов в молекуле.

Параметры Z и H хорошо себя зарекомендовали при расчетах параметров липофильности, канцерогенности и радиоактивности химических веществ [1]. Взаимосвязь кожно-резорбтивной токсичности с этими параметрами изучалась с помощью нейронных сетей на выборке химических соединений в количестве 4774 [2]. Для этих соединений с помощью программных средств были рассчитаны электронные и информационные факторы, которые послужили входной информацией для нейронной сети.

Пример расчёта факторов для натрия гексафторидоалюмината (Na_3AlF_6) приведен ниже: $Z = \sum_{i=1}^N n_i Z_i / N = \frac{3 \cdot 5 + 1 \cdot 3 + 6 \cdot 7}{10} = 4,8$;

$$H = -\sum_{i=1}^k p_i \log_2 p_i = -\left(\frac{3}{10} \log_2 \frac{3}{10} + \frac{1}{10} \log_2 \frac{1}{10} + \frac{6}{10} \log_2 \frac{6}{10} \right) = 1,295.$$

Нейронная сеть позволяет оценить значимость параметров модели: коэффициент среднее число электронов на внешней оболочке атомов в молекуле (Z) (равную 0,912) и информационный фактор H (равную 0,865). Среднеквадратическая ошибка расчетов равна 0,117. Все необходимые расчеты проделаны в пакете Statistika.

Далее весь массив химических соединений был разбит на следующие классы токсичности: первый класс, который включает в себя значения токсичности в диапазоне от 0 до 50; второй класс, который включает в себя значения токсичности в диапазоне от 51 до 200; третий класс, который включает в себя значения токсичности в диапазоне от 201 до 1000; четвертый класс, который включает в себя значения токсичности более 1000.

Реализация этого подхода к каждому классу токсичности дает следующие результаты: для первого класса среднеквадратическая ошибка равна 0,23; для второго класса – 0,21, для третьего класса – 0,17, для четвертого класса – 0,155.

Все полученные модели дают хорошие результаты и могут применяться для прогнозирования соединений, не вошедших в выборку.

Проведены вычислительные эксперименты с помощью линейных регрессионных моделей для факторов электронных и информационных по прогнозированию кожно-резорбтивной токсичности. Для этих целей был разработан Web интерфейс [3].

Прогнозирование свойств химических веществ с использованием Web-технологий является весьма актуальной задачей. В качестве средства проектирования базы данных был выбран продукт Microsoft Visio 2010 как наиболее удобный и доступный, позволяющий быстро создавать, в том числе логические модели баз данных. В качестве средств разработки приложения рассматривались такие языки программирования, как C++ и C#. Выбор был сделан в пользу второго ввиду его лучшей интеграции с базами данных. В качестве среды разработки использовалась Microsoft Visual Studio 2010 Premium. Язык C# — объектно-ориентированный язык программирования. Разработан в 1998—2001 годах группой инженеров под руководством Андерса Хейлсберга в компании Microsoft как язык разработки приложений для платформы Microsoft .NET Framework. C# разрабатывался как язык программирования прикладного уровня для CLR и, как таковой, зависит, прежде всего, от возможностей самой CLR. CLR (Common Language Runtime) — виртуальная машина, интерпретирующая и исполняющая код на языке CIL, в который компилируются программы, написанные, в частности, на .NET-совместимых языках программирования (C#, Managed C++, Visual Basic .NET, Visual J# и т. п.); компонент пакета Microsoft .NET Framework. Среда CLR предоставляет C#, как и всем другим .NET-ориентированным языкам, многие возможности, которых лишены «классические» языки программирования. Например, сборка мусора не реализована в самом C#, а производится

CLR для программ, написанных на C# точно так же, как это делается, например, для программ на VB.NET и J#.

Разработка базы данных для приложения осуществлялась с помощью СУБД Microsoft SQL Server 2008 R2.

Разработанный web-интерфейс позволяет прогнозировать токсичность химических соединений по заданной брутто-формуле.

Web- сервис был разработан с использованием следующих технологий: база данных: MySQL, операции с данными осуществлялись посредством PhpMyAdmin; реализация вычислительных задач и обработки данных: PHP, сборка проекта осуществлялась с использованием среды phpDesigner 8; пользовательский интерфейс: HTML, CSS.

При разработке была использована блочная вёрстка, каждая страница разделена на три блока: header; content; footer.

Поскольку блоки header и footer идентичны на каждой странице, они вынесены в отдельные файлы: block-header.php и block-footer.php соответственно. Файл db-connect.php отвечает за подключение базы данных. Файл sample.php отвечает за отображение обучающей выборки. Файл index.php является главной страницей сайта. Страница имеет две формы ввода данных: для предсказания токсичности химического соединения; для предложения химических соединений к включению в обучающую выборку. Форматирование и оформление сайта содержится в файле style.css.

Разработано программное обеспечение для расчета свойств новых химических веществ с использованием интернет-портала [4]. При этом были решены следующие задачи: проведен анализ рынка программных средств для расчета свойств химических веществ [5-6]; построены модели данных для интернет-портала; построены алгоритмы для расчета свойств химических веществ с помощью регрессионных моделей и нейронных сетей [7]; создан пользовательский интерфейс для онлайн расчета свойств химических веществ.

Данная информационно-вычислительная система позволяет в онлайн режиме через интернет-портал создавать обучающие и экзаменационные выборки из баз данных, задавать или выбирать из меню различные описания химической структуры или иных признаков, выбирать различные модели статистической обработки данных для построения решений о принадлежности к тому или иному классу токсичности, а также структурно-аддитивные и неаддитивные математические модели, которые используются в корреляциях структура – свойства [8].

Приведем пример машинного прогноза параметра токсичности для соединения с химическим названием malononitrile, o-chlorobenzylidene. Данное соединение в обучающую выборку не входило и имеет экспериментальное значение токсичности 178 мг/кг.

Результаты количественных прогнозов по моделям, приведенным выше, и по программе TopKat [9] приведены в следующей таблице.

Таблица

Результаты количественного прогноза

Модель прогноза	Прогноз, мг/кг	Абсолютная ошибка	Относительная ошибка, %
Авторов статьи по нейронным сетям	154	24,0	13,5
Авторов статьи по регрессионным моделям	148	30,0	16,85
Пакета TopKat	285	107,0	60,1

Таким образом, прогноз по разработанным моделям дает более высокую точность, чем коммерческий пакет TopKat.

Хотелось бы отметить, что коммерческий пакет TopKat имеет стандартное отклонение, связанное с погрешностью прогнозирования, равное 0,62 и коэффициент корреляции равный 0,721.

Данный прогноз осуществлялся по моделям, построенным по выборке из второго класса опасности, так как экспериментальное значение токсичности 178 мг/кг входит в этот класс.

Среднеквадратическая ошибка по всему объему выборки с помощью регрессионных моделей составила 0,315.

Нейронные сети показали более высокую эффективность по сравнению с регрессионными моделями.

В качестве экзаменационной выборки использовались соединения (класс фосфорорганических соединений) кожно-резорбтивной токсичности химических веществ. Среднеквадратическая ошибка, вычисленная с помощью нейронных сетей, электронных и информационных факторов составила 0,257. По лучшей регрессионной модели среднеквадратическая ошибка равна 0,341.

Другим примером удачного прогнозирования с помощью вышеупомянутых факторов является молекулярная рефракция, которая обуславливается главным образом валентными электронами.

Следует отметить, что предложенные модели и компьютерные технологии позволяют достаточно точно прогнозировать кожно-резорбтивную токсичность через предложенные информационные и электронные факторы.

Список литературы

1. Осипов А.Л. Анализ и прогнозирование липофильности лекарственных веществ на основе физико-химических свойств / А.Л. Осипов, В.П. Трушина // *International Journal of Advanced Studies*. — Volume 8. — No 2-2. — 2018. — С 32-37.
2. Осипов А.Л. Компьютерные методы оценки параметров токсикологии / А.Л. Осипов, В.П. Трушина, М.В. Яблонских // *International Journal of Advanced Studies*. — 2017. — Т. 7. — № 1-2. — С.49-54.
3. Осипов А.Л. Информационная система с Web-интерфейсом для расчета показателей пожарной опасности / А.Л. Осипов, В.П. Трушина // *International Journal of Advanced Studies*. — Volume 7. — Number 4-2. — 2017. — С.85-92.
4. Трушина В.П. Математические модели предсказания физико-химических свойств / В.П. Трушина, А.Л. Осипов, А.Н. Мирошников // *В мире научных открытий*. — 2015. — № 8. — С.396-401.
5. Осипов А.Л. Моделирование концентрационных пределов воспламенения химических веществ / А.Л. Осипов, В.П. Трушина, Д.В. Пятницев, И. О. Павлик // В сборнике: Материалы XIX Международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСПИС'2015), — 2015. — С.165-167.
6. Осипов А.Л. Теория принятия решений в химико-биологических исследованиях / А.Л. Осипов, В.П. Трушина // *В мире научных открытий*. — 2015. — № 4.2 (64). — С.843-849.
7. Осипов А.Л. Методы обнаружения закономерностей и извлечения знаний в химических исследованиях / А.Л. Осипов // В сборнике: Знания – Онтологии – Теории (ЗОНТ-2015). Материалы Всероссийской конференции с международным участием. Российская академия наук, Сибирское отделение; Институт математики им. С.Л. Соболева. — 2015. — С.82-86.
8. Осипов А.Л. Компьютерные методы оценки пожарной опасности веществ / А.Л. Осипов, В.П. Трушина, Ф.Л. Осипов // *International Journal of Advanced Studies*. — Volume 7. — Number 2-2. — 2017. — С.97-107.
9. Meyer D.E. Chemical Structure Software for Personal Computers / D.E. Meyer, W.A. Warr, R.A. Love // *Amer. Chem. Society*. — Washington, DC. — 1988. — P.41-47.

О СОЧЕТАННОМ ПРИМЕНЕНИИ ОБОНЯТЕЛЬНЫХ И КИНЕСТЕТИЧЕСКИХ ТЕСТОВ ДЛЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ ДИАГНОСТИКИ БОЛЕЗНИ ПАРКИНСОНА И ЭССЕНЦИАЛЬНОГО ТРЕМОРА

Д.В. Похабов^{2,3}, Д.Д. Похабов^{2,3}, В.Г. Абрамов³, М.Е. Туник², К.О. Туценко²,
А.А. Хорошавина², М.Г. Садовский^{1,2}

¹Институт вычислительного моделирования СО РАН,

²Красноярский государственный медицинский университет
им. проф. В.Ф. Войно-Ясенецкого Минздрава России

³Федеральное государственное бюджетное учреждение «Федеральный
Сибирский научно-клинический центр Федерального медико-биологического
агентства»

*neurodmit@mail.ru, mr.lynch@mail.ru, excalibr@mail.ru,
tsuprikova.mary.maria@yandex.ru, kseniamkib@gmail.com, horoshavina-lina-yan@ya.ru,
msad@icm.krasn.ru*

Введение

Болезни экстрапирамидной системы, в частности болезнь Паркинсона (БП) и эссенциальный тремор (ЭТ), являются одними из самых распространенных нозологий в неврологии, однако довольно часто случаются диагностические ошибки. Успех лечения, прежде всего, зависит от верной дифференциальной диагностики, что в некоторых клинических случаях представляется для врача трудно решаемой проблемой. БП и ЭТ объединяет такой симптом, как дрожание. Тремор является одной из основных жалоб, по поводу которой пациенты обращаются за помощью к врачу, так как качество повседневной жизни заметно ухудшается уже на ранних стадиях развития указанных заболеваний. Кроме того, многие родственники пациентов нуждаются в ранней адекватной диагностике для обеспечения возможности лечения до появления явных симптомов. В настоящее время еще не разработаны единые клинические рекомендации по данным заболеваниям, что порождает высокую потребность в разработке новых методов ранней диагностики и модификации уже существующего метода, который, по нашему мнению, даёт искажённые результаты.

Отличительной особенностью болезни Паркинсона является тремор покоя, который значительно снижается или исчезает во время движения или других активных действий пациента. Для ЭТ, напротив, характерен постурально-кинетический тремор. Отмечено, что за несколько лет до возникновения двигательных расстройств при БП развиваются обонятельные нарушения. Это обусловлено тем, что нейродегенерация начинается именно в обонятельных луковицах головного мозга. Для ЭТ характерен другой механизм развития болезни и, соответственно, данного симптома у больных с ЭТ, по данным литературы, нет. Следовательно, обонятельная дисфункция может быть ранним и значимым дифференциальным признаком болезни Паркинсона (см. подробности в [1]). Данный факт позволяет надеяться на то, что использование различных методов обследования, основывающихся на определении характеристик восприятия запахов, станет эффективным методом ранней дифференциальной диагностики этих заболеваний.

Таким образом, данные, описывающие дрожание рук пациентов, и данные их обонятельной функции могут помочь в постановке правильного диагноза на ранней стадии развития заболевания. Однако необходимо уточнение протокола проведения обследования обонятельной функции. Ситуация обонятельного восприятия весьма субъективна, а значит и оценить результаты обонятельного теста довольно сложно, именно поэтому перед исследователем встаёт задача комплексного описания обонятельной семантики. Также должна быть изменена процедура проведения Sniffin's

sticks test в части обследования на выявление абсолютного порога чувствительности, так как действующий в настоящее время протокол даёт искажённые результаты, а предложенное изменение в процедуре позволяет исключить возможные источники ошибок и избежать этих искажений.

Все полученные данные занесены и оформлены в программе Microsoft Excel. Анализ данных проводился в программе IBM SPSS Statistics 23 классическими способами статистики: *t*-тест, критерий Стьюдента, Манна-Уитни и Краскала-Уоллиса, а также нелинейным методом упругих карт в программе VidaExpert. Само исследование проводилось на базе ФМБА России и Красноярского государственного медицинского университета.

Результаты и обсуждение

Диагностика состояния ольфакторной функции проводилась при помощи Sniffin' stick test («Burghart Messtechnik», Germany), с определением трех показателей: пороговой чувствительности, дифференциальной чувствительности и идентификации конкретного запаха. При тестировании используется набор фломастеров с одорантами в различных концентрациях. Процедура тестирования проводилась по предложенному авторами теста протоколу и включала в себя соблюдение следующих условий:

- наличие хорошо проветренного помещения, спокойная обстановка,
- пациент сидит с закрытыми глазами напротив исследующего,
- исследуемый не принимал пищу и не курил как минимум за 45 минут до исследования,
- никто из участников не пользовался парфюмерией на момент проведения теста.

Испытание состоит из трех частей и имеет определённую последовательность (первый, второй и третий субтест). Первый субтест (определение порога обоняния) проводится по следующей схеме: имеется 16 триплетов по три фломастера: один из трёх с *n*-бутанолом в разных концентрациях. Сначала пациенту предлагается первый триплет с наибольшей концентрацией одоранта, если пациент чувствует, то переходим к самому слабому запаху, а далее увеличиваем концентрацию, пока испытуемый не почувствует запах. Основная цель данного субтеста – определить минимальную концентрацию одоранта, которую исследуемый способен отличить от плацебо.

Второй субтест (дискриминация запахов): предлагалось 16 триплетов, в каждом из которых один из запахов отличался от двух других, задача исследуемого определить этот отличающийся искомый запах. Третий субтест (идентификация): состоял из 16 фломастеров с различными запахами, название каждого из которых пациент должен выбрать из 4 предложенных вариантов. В каждом субтесте максимально можно было набрать по 16 баллов, все баллы суммировались. Выше 30 баллов за все 3 субтеста – показатель нормы, 17-29 баллов показатель гипосмии, а ниже 16 – anosmia.

Обонятельная способность была протестирована у 45 пациентов с БП, 40 человек с ЭТ и 64 условно здоровых людей (контрольная группа). Группа здоровых людей состояла из 33 мужчин и 31 женщины в возрасте от 20 до 79 лет. Из контроля исключались те, у кого в анамнезе есть воспалительные заболевания слизистой оболочки носа и пазух. Кроме того, все пациенты, имеющие некоторые другие неврологические заболевания, были исключены из исследования. Из всей группы здоровых людей всего 10 человек назвали свое обоняние сниженным, 5 — усиленным, остальные считают его нормальным. 17 человек из 64 являются курящими (из них 13 мужчин и 4 женщины). С болезнью Паркинсона было протестировано 45 людей в возрасте от 35 до 78 лет, из них 15 мужчины и 30 женщин. Из всей группы всего 23 человека назвали свое обоняние сниженным, а 22 считают его нормальным. 7 человек из 45 являются курящими (из них 2 мужчин и 5 женщины). С диагнозом «эссенциальный тремор» было протестировано 40

человек, из них 12 мужчины и 28 женщин, в возрасте от 22 до 82 лет. Из всей группы всего 7 человек назвали свое обоняние сниженным, 3 — усиленным, 30 считают его нормальным. 7 человек из 40 являются курящими (из них 2 мужчин и 5 женщины).

В первом тесте был определён порог обоняния. В группе людей с БП среднее значение составило 2,44 балла, минимальное количество баллов, полученных испытуемым — 0, максимальное — 7. Среднее значение баллов, набранных людьми с диагнозом ЭТ в данном тесте — 3,85, минимальное — 0, максимальное — 9. Минимально набранное количество баллов среди здоровых людей — 0, максимальное — 11, среднее значение данной группы по первому тесту — 5,1.

Вторым тестом определялась дискриминация — способность выбрать два одинаковых запаха из трех предлагаемых. Средний балл в группе людей с БП — 8,76 баллов, минимально был набран 1 балл, максимально — 13. Люди с ЭТ набрали в среднем 10 баллов, минимум в ходе второго теста было получено 4 балла, максимально — 15. Средний балл, набранный здоровыми людьми в данном тесте — 11,53 балла, минимальный и максимальный баллы — 4 и 15, соответственно.

Третий тест служил для определения идентификации, то есть способности определять запах по предложенным четырём наименованиям. В ходе эксперимента, люди с БП лучше узнавали запах рыбы, хуже всего запах лимона и яблока, минимальное значение суммы баллов в этой группе 0, максимальное 13, среднее значение 6,87. Люди с ЭТ лучше всего узнавали запах чеснока, хуже всего запах лимона, минимальное значение суммы баллов в этой группе 5, максимальное 14, среднее значение — 10,08. Здоровые люди лучше узнавали запах чеснока, хуже всего запах лимона и лакрицы (что объясняется этническими и культурными особенностями населения Красноярского края), минимальное значение суммы баллов в данной группе 6, максимальное 16, среднее значение 11,28.

Таблица 1

Результаты исследования обонятельной функции

	Тест 1	Тест 2	Тест 3		Сумма по результатам 3-х тестов (количество испытуемых)
	Среднее значение, баллы	Среднее значение, баллы	Среднее значение, баллы	Знание запахов	
Здоровые	5,11 ± 2,32	11,53 ± 2,28	11,28 ± 2,18	Лучше: чеснок, хуже: лимон и лакрица	Аносмия-3 Гипосмия-32 Нормосмия-29
ЭТ	3,85 ± 2,34	10 ± 2,65	10,08 ± 2,47	Лучше: чеснок, хуже: лимон	Аносмия-2 Гипосмия-31 Нормосмия-7
БП	2,44 ± 1,91	8,76 ± 2,47	6,87 ± 2,69	Лучше: рыба, хуже: лимон и яблоко	Аносмия-14 Гипосмия-30 Нормосмия-1

В группе людей с БП аносмия наблюдается у 14 человек (31,1 %), у 30 исследуемых — гипосмия (66,7 %) и лишь 1 человек набрал 30 баллов, что является минимальным порогом нормы (2,2%). Из людей с ЭТ только у двоих людей выявлена аносмия (5 %), у 31 человека — гипосмия (77,5 %) и нормальное обоняние у 7

исследуемых (17,5 %). У 3 представителей здоровых людей — anosmia (4,7 %), гипосмия у 32 человек (50 %) и 29 здоровых людей баллы, соответствующие норме (45,3 %). Все полученные данные обобщены и представлены в виде баллов (Таблица 1).

Далее был проведен анализ на наличие различий между всеми группами, различия находились при помощи *t*-критерия Стьюдента, Манна-Уитни и Краскала-Уоллиса. В результате во всех трёх тестах были найдены достоверные различия между всеми группами исследуемых на уровне значимости $\alpha = 0,05$.

Помимо классических способов обработки данных был использован нелинейный метод упругих карт для выделения кластеров обследуемых, вследствие сложностей объективной оценки обонятельного анализатора. На рисунке 1 А представлена упругая карта здоровых людей, протестированных вторым и третьим субтестом (розовый пятиугольник и фиолетовый круг – это второй и третий субтесты соответственно). Рисунки 1 Б и 1 В показывают упругие карты для пациентов с БП и ЭТ (также результаты второго и третьего субтестов). Во всех трех картах выделены кластеры второго и третьего субтестов, что подтверждает их эффективность и значимость. При добавлении результатов первого субтеста в упругие карты, кластеры обследуемых не выделяются, так как независимо от заболевания все обследуемые плохо справлялись с субтестом 1, поэтому результаты субтеста 1 не включены в представленные упругие карты.

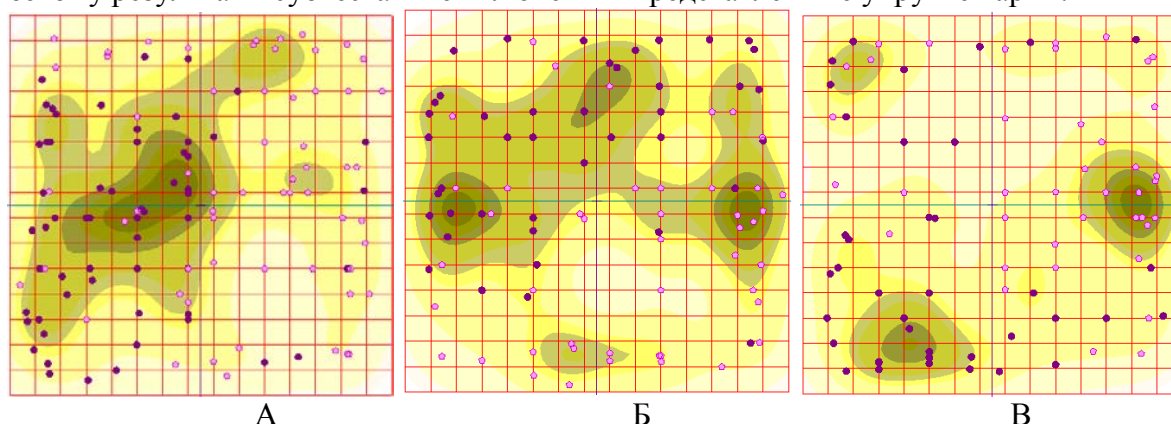


Рисунок 1. Упругая карта распределения здоровых людей (А), пациентов с ЭТ (Б) и пациентов с БР (В), результаты второго и третьего субтестов.

Для понимания недостатка первого субтеста опишем процедуру его проведения более подробно. Каждый пациент обследовался по следующей схеме. Для начала ему предлагалось понюхать фломастер с самой высокой концентрацией пахучего агента, для того, чтобы убедиться, что пациент в принципе воспринимает данный запах. Затем пациенту предлагалось понюхать триплет фломастеров № 16 (самая маленькая концентрация *n*-бутанола). Далее триплеты фломастеров выдавались от меньшей к большей концентрации запаха до верного определения пахнущего фломастера с последующим контролем. Собственно, описанный порядок тестирования пациентов и является источником систематической ошибки. Оригинальная технология тестирования предполагает, что исследуемый чувствует определенный порог концентрации, не учитывая адаптации обонятельного анализатора, которая происходит всего за 10 секунд.

Действительно, вычислим коэффициенты корреляции между всеми парами ответов, получаемых в первом субтесте, по всей выборке больных, принимавших участие в обследовании; Таблица 1 содержит эти коэффициенты корреляции. Заметим, что формально тестирование включало в себя 16 проб, однако в Таблице 1 представлено лишь 10 из них. Это связано с тем, что пробы с 11 и далее давали нулевой результат для всех

испытуемых (никто ничего не чувствовал). Поэтому эту часть испытания мы не включали в анализ.

Таблица 1

Значения коэффициентов корреляции между последовательными испытаниями в первом субтесте Sniffins теста; j — номер испытания. Фоном выделены пары с повышенным значением корреляции.

j	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	0,484	0,316	0,268	0,195	0,136	0,115	0,064	0,049	0,031
2		0,653	0,554	0,402	0,280	0,238	0,131	0,102	0,064
3			0,849	0,616	0,429	0,364	0,201	0,156	0,097
4				0,726	0,505	0,429	0,237	0,184	0,115
5					0,696	0,591	0,326	0,254	0,158
6						0,849	0,469	0,365	0,227
7							0,552	0,429	0,267
8								0,777	0,484
9									0,622

Хорошо видно, что высокие значения коэффициентов корреляции наблюдаются в серии последовательных испытаний $\langle j; j+1 \rangle$. При этом падение корреляций с ростом «расстояния» между испытаниями носит вполне системный характер. Такое согласованное изменение коэффициентов корреляции свидетельствует о наличии дополнительного «сигнала», который порождён самой процедурой тестирования. Этот сигнал есть следствие индукции: испытуемый сообщает о том, что он чувствует запах, хотя на самом деле он его не чувствует. Именно здесь проявляется влияние психологии восприятия на биологию.

Для исключения указанных недостатков первого субтеста была разработана иная технология тестирования испытуемых в первом субтесте; её применение позволило получить лучшие результаты тестирования. Модифицированный протокол тестирования предполагает предъявление триплетов с запахом разных концентраций в случайном порядке. Такое изменение протокола привело к существенному улучшению результатов (Таблица 2). К настоящему времени модифицированный протокол обследования использовался только на здоровых людях. Очевидны значимые изменения при использовании модифицированной методики проведения теста, между данными найдены статистически значимые различия ($p < 0,001$).

Таблица 2

Значения суммарных баллов, полученных в ходе тестирования в рамках оригинального и модифицированного протоколов обследования.

	Результат первичного обследования	Повторное обследование
Среднее значение	4,67	8,75
Стандартное отклонение	1,92	2,22

Далее следует поговорить об особенностях третьего субтеста, в котором испытуемым необходимо было идентифицировать запах, выбрав правильный вариант из четырёх предложенных. Некоторые из запахов, предложенных авторами теста, не подходят для проведения данного исследования в нашем регионе, что объясняется этническими и культурными особенностями населения Красноярского края. Например, такие запахи, как «лакрица», «скипидар» и «анис» знакомы далеко не всем.

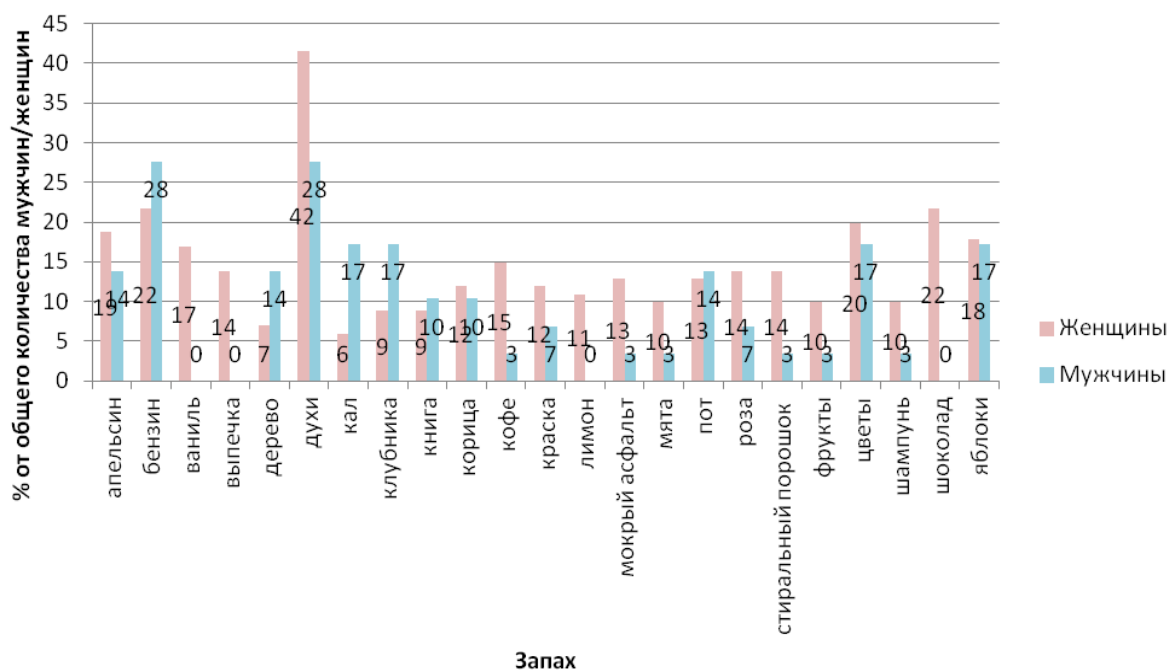


Рисунок 2. Процентное соотношение мужчин и женщин, вспомнивших данные запахи.

Для модификации третьего субтеста было проведено следующее исследование: людям предлагалось за одну минуту вспомнить и записать как можно больше запахов, которые первые пришли им на ум. Таким образом было опрошено 130 человек. Наиболее часто встречаемыми запахами оказались запах духов, бензина, апельсина и цветочные запахи. На рисунке 2 показано процентное соотношение мужчин и женщин, вспомнивших указанные запахи.

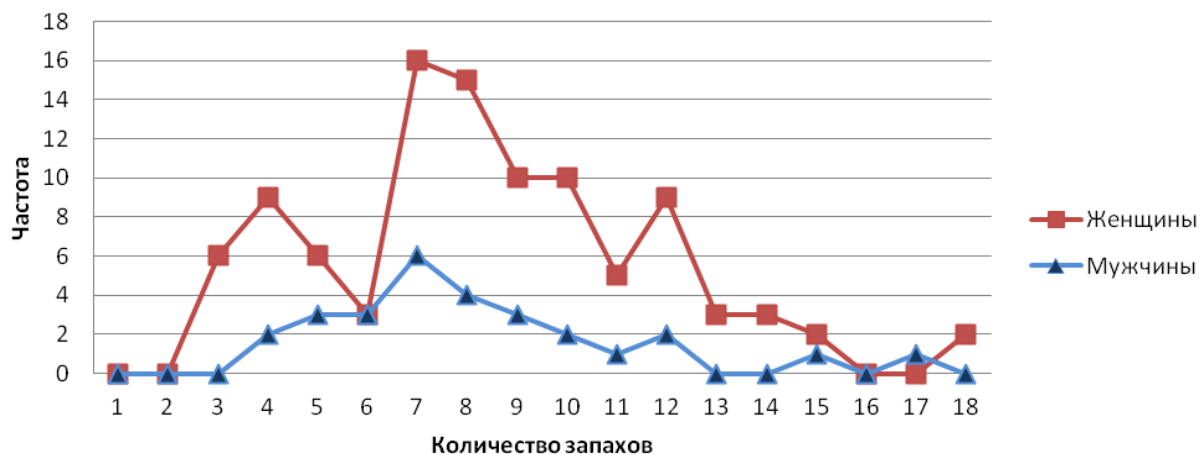


Рисунок 3. Распределение количества запахов, вспомненных женщинами и мужчинами

Кроме того, было обнаружено, что среднее количество запахов и стандартное отклонение у мужчин и женщин отличаются незначительно: среднее количество запахов у мужчин — 8,179, у женщин — 8,594, стандартное отклонение — 3,092 и 3,496, соответственно. По критерию Манна-Уитни статистически значимых различий по показателям количества запахов между мужчинами и женщинами не обнаружено. Кроме того, критерий χ^2 Пирсона показал, что пол не влияет на количество вспомненных запахов. Однако на рисунке 3 явно видно, что разница между результатами женщин и

мужчин есть, следовательно, для анализа влияния пола на спонтанное знание запахов стандартные статистические критерии не подходят.

По итогам обонятельных тестов людей с БП и ЭТ были построены упругие карты: на рисунке 4 А упругая карта, учитывающая результаты всех трёх субтестов, на рисунке 4 Б — только результаты второго и третьего субтестов. Красным квадратом обозначены люди с болезнью Паркинсона, синим треугольником — пациенты с диагнозом «эссенциальный тремор».

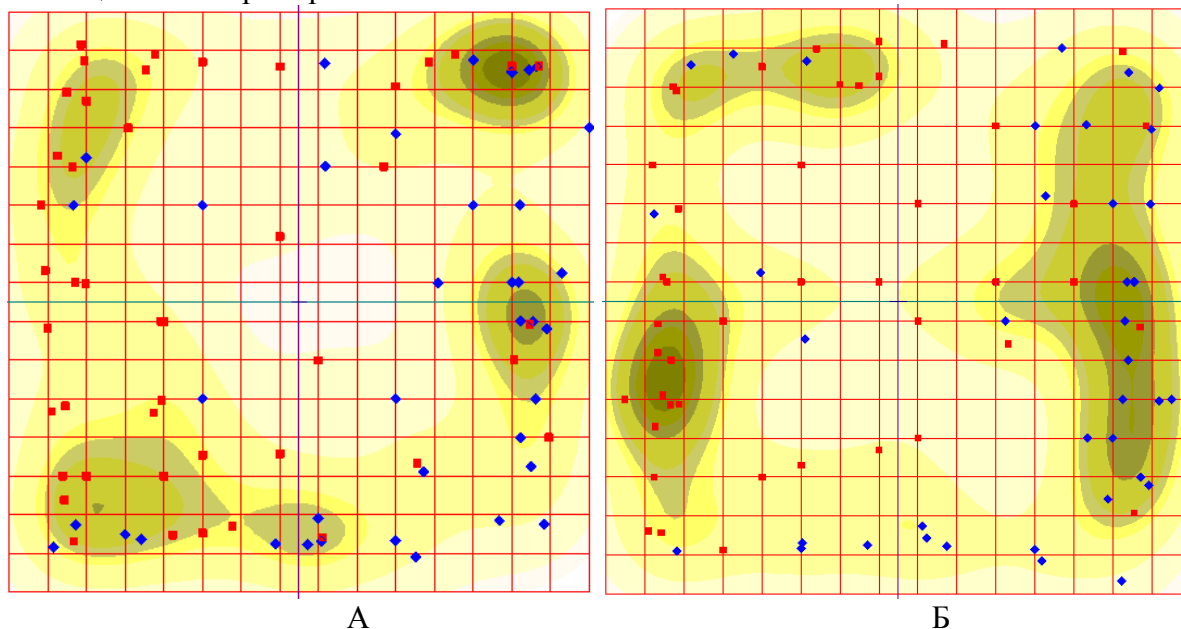


Рисунок 4. Распределение людей с БП и ЭТ по результатам всех обонятельных тестов

На картах видно, что все больные поделились на определенные группы, но были и те, кто ни к какой группе не принадлежали. Таким образом, были выделены два кластера: люди, которые распределились по группам и те, кого нельзя отнести ни к одной из групп. Между этими кластерами было проведено сравнение стандартными статистическими методами и обнаружено, что в случае, где учитывались все 3 обонятельных теста, статистически значимые различия наблюдаются только по второму и третьему показателям первого субтеста ($p < 0,006$ и $p < 0,023$, соответственно) и по шестому показателю третьего субтеста ($p < 0,002$), все остальные показатели статистически значимых различий не имеют. В том случае, когда результаты первого субтеста не учитывались, статистически значимые различия между кластерами были обнаружены по седьмому показателю второго субтеста ($p < 0,001$) и суммой баллов, набранных во втором субтесте ($p = 0,029$), а также по девятому и тринадцатому показателям третьего субтеста ($p = 0,015$ и $p = 0,008$, соответственно).

Исследование тремора включало 5 тестов и проводилось с помощью системы анализа колебаний потенциала Нейротех Колибри на четырёх датчиках: на кистях и предплечьях обеих рук. В первом тесте показатели были определены в покое; во втором испытуемые находились в положении стоя с закрытыми глазами и вытянутыми прямо перед собой руками (поза Ромберга); в третьем тесте испытуемые касались правой рукой кончика носа, находясь в положении стоя с закрытыми глазами; в четвёртом тесте пациенты касались левой рукой кончика носа, находясь в положении стоя с закрытыми глазами; пятый тест проводился в движении, испытуемые передвигались по комнате.

Дрожание было проанализировано у 90 человек: 30 условно здоровых людей и по

30 пациентов с диагнозами «болезнь Паркинсона» и «эссенциальный тремор». Были исследованы различия в значениях частоты и амплитуды электромиограммы (ЭМГ) правой и левой руки в каждой из представленных групп людей. Статистически значимые различия между правой и левой рукой были найдены в контрольной группе здоровых во втором, третьем и пятом тестах, а также в группе больных ЭТ в первом, втором, третьем и пятом тестах, что может быть связано с разным развитием мышц, их состоянием и выраженностью подкожного жирового слоя. В группе людей с БП различия не обнаружены. Учитывая средний возраст исследуемых людей с БП (61 год) и их функциональное состояние, можно предположить, что в их жизни отсутствуют значимые физические нагрузки, а следовательно и преобладание одной из рук отсутствует, также возможно, что классические методы статистики неспособны обнаружить различия в данной группе.

Кроме того, был проведён анализ на наличие различий по данным показателям между исследуемыми группами. По показателю частоты колебаний потенциала электромиограммы были найдены достоверные различия с датчиков на левой кисти: между людьми с болезнью Паркинсона и людьми с диагнозом «эссенциальный тремор» — во всех пяти тестах; между здоровыми людьми и людьми с диагнозом «эссенциальный тремор» — в первом, третьем и четвёртом тесте; между здоровыми людьми и людьми, страдающими болезнью Паркинсона — в пятом тесте. С датчиков на правом предплечье достоверные различия по данному показателю были найдены: между здоровыми людьми и людьми с болезнью Паркинсона — в третьем тесте и между здоровыми людьми и людьми с диагнозом ЭЕ — в пятом тесте. А также статистически значимые различия по показателю частоты колебаний потенциала ЭМГ с датчиков на левом предплечье были найдены между здоровыми людьми и людьми с болезнью Паркинсона в пятом тесте.

Как было упомянуто ранее, также был проведён анализ на наличие различий между исследуемыми группами по показателю амплитуды колебаний потенциала ЭМГ. В результате, были найдены достоверные различия в первом тесте между людьми с болезнью Паркинсона и здоровыми людьми, а также здоровыми и людьми с диагнозом ЭЕ, по показателям с датчиков на правой кисти. В этом же тесте были найдены различия по показателям с датчиков на правом предплечье между группами здоровых людей и людей с диагнозом ЭТ, а также по показателям с датчиков на левой кисти — в третьем и пятом тестах.

Тремор больных ЭТ, как правило, уменьшается в покое и увеличивается при активной деятельности, в отличие от БП. Отличительной особенностью болезни Паркинсона, наоборот, является тремор покоя, который значительно снижается или исчезает во время движения или других активных действий пациента. С этим могут быть связаны статистически значимые различия между этими группами людей в покое и тестах, предполагающих движение, а также различия между здоровыми и людьми с ЭТ в кинетических тестах и здоровыми людьми и больными с БП в первом тесте (в покое). Однако можно заметить, что не на всех датчиках в данных случаях были обнаружены различия, это может говорить о том, что у больных могут встречаться различные виды тремора или же о том, что стандартные методы статистики не всегда способны обнаружить различия.

Кроме того, видно, что показатель частоты колебаний потенциала электромиограммы является наиболее показательным для данного обследования, чем показатель амплитуды, при котором различия между группами людей с БП и ЭТ не были найдены ни в одном из проведённых тестов. Что касается показателя частоты, можно заметить, что различия между людьми с болезнью Паркинсона и людьми с диагнозом «эссенциальный тремор» были найдены во всех из проведённых тестов по показателям с датчиков на левой кисти, тогда как показатели с датчиков на правой конечности не

поделили этих больных между собой. Можно сделать вывод, что тремор левой конечности различается в большей степени, что скорее всего связано с тем, что у преобладающего числа людей левая рука менее развита физически, чем правая.

Далее была построена упругая карта на основе всех показателей тремора, представленная на рисунке 5. Красным квадратом обозначены люди с болезнью Паркинсона, синим треугольником — пациенты с диагнозом «эссенциальный тремор».

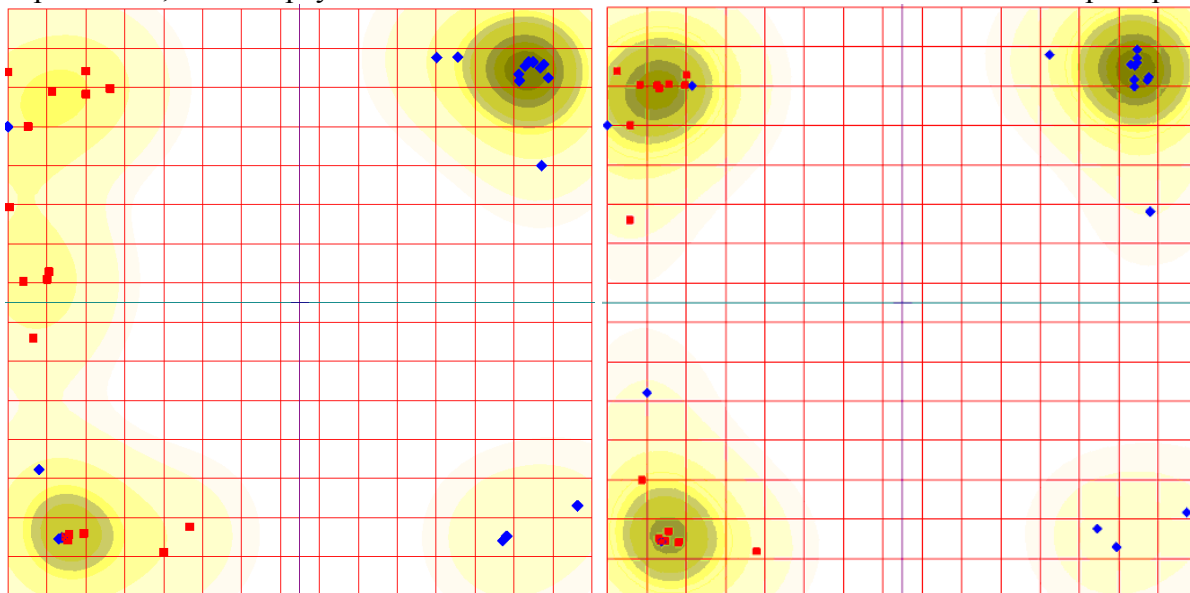


Рисунок 5. Распределение людей с БП и ЭТ по результатам исследования тремора (слева) и сочетания исследования тремора и обонятельных тестов (справа).

В дальнейшем данные обонятельных тестов и данные исследования тремора рук пациентов были объединены в единую базу, в результате чего была построена упругая карта, учитывающая все эти показатели (рисунок 5). На карте видно, что при объединении полученных данных пациенты с различными заболеваниями очень хорошо разделились друг от друга, образовав 4 отдельных кластера. Было принято решение сравнить показатели людей, входящих в разные кластеры, между собой.

В итоге сравнения полученных кластеров больше всего различий было обнаружено между первым и вторым, это объясняется тем, что в первом кластере находятся преимущественно люди с БП, а во втором исключительно пациенты с ЭТ. Также видно, что группа с БП и группа с ЭТ образовали по 2 отдельных кластера, это может быть связано с различной латерализацией дебюта заболевания или же с тем, что некоторые из исследуемых людей находились в стрессе [2]. В ходе анализа полученных данных были найдены различия, в основном, в показателях гироскопа и акселерометра, обнаруженных различий в данных электромиограммы и результатах обонятельных тестов значительно меньше.

Список литературы

1. Алексеева Н.С., Иллариошкин С.Н., Пономарева Т.А., Федотова Е.Ю., Иванова-Смоленская И.А. Нарушение обоняния при болезни Паркинсона. Неврологический журнал. 2012;1:10-14.
2. Жукова, И.А., Жукова, Н.Г., Ижболдина, О.П., Никитина, М.А., Алифирова, В.М., 2015. Анализ методов оценки обоняния у пациентов с болезнью Паркинсона.

РАЗРАБОТКА КОГНИТИВНЫХ АГЕНТОВ ДЛЯ SMART- СИСТЕМЫ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ И УПРАВЛЕНИЯ СЛОЖНЫМИ ОБЪЕКТАМИ

Г.А. Самигулина¹, З.И. Самигулина²

¹ Институт информационных и вычислительных технологий КН МОН РК,
г. Алматы, galinasamigulina@mail.ru

² Казахстанско - Британский Технический Университет, г. Алматы,
zarinasamigulina@mail.ru

В связи с прогрессом в области IT технологий, микропроцессорной техники и стремительному развитию перспективных биоинспирированных подходов искусственного интеллекта (ИИ) в настоящее время актуальной задачей является создание Smart - систем прогнозирования и управления сложными объектами, функционирующими в условиях неопределённости параметров для различных прикладных областей, например, разработка приложений для систем промышленной автоматизации и технологических процессов нефтегазовой отрасли. Проблемы функционирования таких систем связаны с огромным количеством неучтенных факторов, влияющих на систему и необходимостью обработки огромного потока многомерных данных в реальном масштабе времени. Нейронные сети [1], эволюционные алгоритмы [2], роевой интеллект [3] и другие методы ИИ широко применяются при создании интеллектуальных систем управления во многих отраслях промышленности: нефтегазовой, аэрокосмической, энергетической и др.

Искусственные иммунные системы (ИИС) [4,5] и модифицированные алгоритмы, разработанные на их основе представляют определенный интерес при создании таких Smart-систем. По данным ведущего мирового издательства Springer только за последние несколько лет было опубликовано около 140 000 работ по данной тематике с приложениями для различных сложных объектов от диагностики состояния воздушных турбин, до исследований в области электрических распределённых систем [6].

Целью исследования является создание многофункциональной ИИС для систем промышленной автоматизации в нефтегазовой отрасли, состоящей из подсистем, реализующих основные механизмы и алгоритмы функционирования иммунной системы человека. Рассматриваются алгоритмы ИИС на основе молекулярного узнавания, клонального отбора и негативной селекции, а также модифицированные алгоритмы на основе комбинирования различных методов искусственного интеллекта [7]. Многофункциональная искусственная иммунная система используется при оценке состояния и прогноза поведения Smart - системы, для диагностики оборудования, поддержки принятия решения и оперативного управления на основе корректировки поведения системы.

Разработка многофункциональной искусственной иммунной системы осуществляется с использованием мультиагентного подхода [8]. Использование данного подхода при создании современных приложений в промышленной автоматизации удобно для реализации различных интеллектуальных методов. Мультиагентная система состоит из множества взаимодействующих агентов, функционирующих в среде и обладает рядом достоинств, таких как: самоорганизованность, гибкость, т.е. система может быть дополнена и модифицирована, масштабируемость, многофункциональность и оптимальное распределение вычислительных ресурсов.

Когнитивные агенты, благодаря их сложности, наличию знаний и способностей к рассуждениям о своем поведении и внешней среде, могут быть более автономными, способные к автоматическому накоплению и использованию знаний в процессе работы, обладают адаптивными способностями, что обеспечивает эффективную работу установок и комплексов в динамически изменяющихся условиях [9].

Постановка задачи формулируется следующим образом: необходимо разработать многофункциональную мультиагентную Smart-систему прогнозирования и управления сложными объектами на основе модифицированных алгоритмов искусственного интеллекта и искусственных иммунных систем для современных распределённых систем управления предприятиями (Distributed Control System, DCS) фирмы Honeywell на нефтеперерабатывающем заводе ТенгизШевройл.

Управление технологическим процессом делится на несколько независимых уровней защиты, которые представляют собой прогнозируемые и непрогнозируемые события. Smart – система работает с сегментом прогнозируемых событий [10].

Для исследования выбрана база данных суточных замеров показаний с датчиков абсорбера среднего давления технологической Установки 300 [11] по очистке газа от кислых компонентов предприятия ТенгизШевройл.

Разработан следующий алгоритм функционирования Smart-системы прогнозирования и управления сложным объектом.

Алгоритм:

Шаг 1. Подключение к хранилищу данных распределённой системы управления предприятием. Формирование базы данных параметров сложного объекта, состоящей из показаний с датчиков. Например, используются: LIC31053–датчик уровня; TI31050–датчик температуры; PDI31003–перепад давления; FIC31005–датчик расхода; QRAH31001–анализатор H_2S в газе и т.д. Размерность базы данных $R=11 \times 700$, 7700 экземпляров данных.

Шаг 2. Выбор метода оптимизации данных: алгоритма серых волков (GWO, grey wolf optimiser), алгоритма случайного леса (RF, random forest) [7], алгоритма роя частиц (PSO, particle swarm optimization), алгоритма муравьиной колонии (ACO, ant colony optimization), алгоритма пчелиной колонии (ABC, artificial bee colony optimization), метода главных компонент (PCA, principal component analysis) для редукции малоинформативных дескрипторов и построения оптимального набора дескрипторов, так как избыточность и не информативность дескрипторов снижает качество прогноза.

Шаг 3. Формирование оптимальной базы данных параметров (дескрипторов), описывающих поведение сложного объекта на основе выбранного алгоритма оптимизации.

Шаг 4. Решение задачи классификации.

Выделено 3 класса:

- 1 класс – приоритет тревоги «аварийный», сигнализация alarm включена;
- 2 класс – приоритет тревоги «высокий», сигнализация alarm выключена;
- 3 класс – приоритет тревоги «низкий», сигнализация alarm выключена [10].

Шаг 5. Выбор алгоритма искусственных иммунных систем. Например, моделирование на основе алгоритма распознавания искусственной иммунной системой (Artificial Immune Recognition System, AIRS), моделирование с использованием алгоритма клональной селекции (Clonal Selection, CLONALG), иммунносетевое моделирование (Artificial Immune System, AIS) [8].

Шаг 6. Оценка эффективности моделирования на базе алгоритмов искусственных иммунных систем.

Шаг 5. Выбор модифицированного алгоритма на основе лучшего прогностического результата.

Шаг 6. Прогноз и принятие решений по управлению сложным объектом.

Ниже в таблице приведены основные агенты для Smart-системы прогнозирования и управления сложными объектами.

Таблица
Описание агентов

Наименование агентов	Обозначение агентов	Функции агентов
1	2	3
Агент базы данных	Adb (Database agent)	работа с базами данных, состоящими из дескрипторов, характеризующих объект управления
Агент менеджер	Am (Agent manager)	взаимодействие и координация работы агентов.
Агент онтологий	Ao (Ontology agent)	построение онтологических моделей, структурирование входных и выходных данных.
Агент помощник	Aa (Assistant Agent)	формирование подсказок для пользователей при вводе параметров алгоритмов и функционировании системы
Агент статистики	As (Statistics Agent)	статистический анализ данных
Агент оптимизации набора дескрипторов	Adso (Descriptors Set Optimization Agent)	редукция малоинформативных дескрипторов и построение оптимального набора данных на основе применения различных алгоритмов искусственного интеллекта
Агент искусственной иммунной системы	Aais (Artificial Immune System Agent)	распознавание образов и прогнозирование
Агент поддержки и принятия решений	Asdm (Agent support and decision making)	выбор алгоритмов для определенного типа задач, выдача рекомендаций по управлению системой

Таким образом, предлагается создание принципиально новой многофункциональной искусственной иммунной системы на основе новых модифицированных алгоритмов, объединяющей в себе все достоинства каждого подхода ИИ и реализованной с использованием мультиагентных и когнитивных технологий.

Исследования проводятся при финансовой поддержке Комитета Науки Министерства Образования и Науки Республики Казахстан по гранту № AP05130018 (2018-2020 гг.), по теме: «Разработка когнитивной Smart – технологии для интеллектуальных систем управления сложными объектами на основе подходов искусственного интеллекта».

Список литературы

1. Silva I.N., Hernane Spatti D., Andrade Flauzino R., Liboni L.H.B., Reis Alves S.F. Artificial Neural Networks / I.N.Silva, Spatti D.Hernane, Flauzino R.Andrade, L.H.B.Liboni, Alves S.F. Reis. - Springer, 2017. –277p.
2. Chun L., Kroll A.A. Centralized Multi-Robot Task Allocation for Industrial Plant Inspection by Using A and Genetic Algorithms / L.Chun, A.A.Kroll // Artificial Intelligence and Soft Computing. - Springer, 2012. - Vol. 7268. -P. 466 - 474.
3. Padma S.L., Sekhar D.S., Ketan P.B. Artificial Intelligence and Evolutionary Algorithms in Engineering Systems / S.L.Padma, D.S.Sekhar, P.B.Ketan - Springer, 2015. -Vol.1. - 862 p.
4. Wei Zhang. Fault Diagnosis Method Based on Artificial Immune System / ZhangWei // Failure Characteristics Analysis and Fault Diagnosis for Liquid Rocket Engines. –Springer, Berlin, Heidelberg, 2016. – P. 193 – 217.
5. Alizadeh E., Meskin Nader, Khorasani Khashayar. A Negative Selection Immune System Inspired Methodology for Fault Diagnosis of Wind Turbines / E.Alizadeh, Nader Meskin, Khashayar Khorasani // IEEE Transactions on Cybernetics. – 2017. – №99. – P. 1-15.
6. Lima F., Lotufo A., Minussi C. Wavelet-artificial immune system algorithm applied to voltage disturbance diagnosis in electrical distribution systems / F.Lima, A.Lotufo, C.Minussi // IET Generation, Transmission & Distribution. – 2015. – Vol. 9. – №11. – P. 1104 – 1111.
7. Samigulina G.A., Samigulina Z.I. Modified immune network algorithm based on the Random Forest approach for the complex objects control / G.A. Samigulina, Z.I. Samigulina // Artificial Intelligent Review. – Willy, 2018. <https://doi.org/10.1007/s10462-018-9621-7>.
8. Samigulina G.A., Massimkanova Zh.A. Multi-agent system for forecasting based on modified algorithms of swarm intelligence and immune network modeling / G.A. Samigulina, Zh.A. Massimkanova // Proceedings of the 12th International Conference Agents and Multi-agent Systems: Technologies and Applications (KES-AMSTA-18). – Australia, 2018. – P.199-208. https://doi.org/10.1007/978-3-319-92031-3_19.
9. Цзя Лу. Когнитивные агенты и системы распределенной обработки информации и управления объектами в динамически изменяющихся условиях: диссертация кандидата технических наук / Цзя Лу. - Санкт-Петербург, 2011. - 181 с.
10. Samigulina G.A., Samigulina Z.I. Development of Smart technology for complex objects prediction and control on the basis of a distributed control system and an artificial immune systems approach / G.A. Samigulina, Z.I. Samigulina // Advances in Science. Technology and Engineering Systems Journal (ASTESJ). – USA, 2019. - Vol 4. - Issue №3. – P.75-87.
11. Technological regulations for the technological process of hydrocarbon gases cleaning at the plant 300. TengizShevroil LLP. - 2016.-357 p.

СЕТЕВАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ ПРОЕКЦИЙ МИРОВОЗЗРЕНИЯ NETWORK ORGANIZATION OF WORLDVIEW PROJECTIONS

В.П.Сизиков¹, В.И. Разумов²

¹Омский государственный университет путей сообщения, v_p_sizikov@mail.ru

²Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
razumovvi@omsu.ru

1. Введение. Оппозиция: Природа (φύσις)/Знание (γνῶσις), возникла в период античности, но обращение к ней очень актуально в настоящее время. Развитие науки избрало в качестве магистрального направления движение от Природы к Знанию. При этом и по мере расширения в интеллектуальной культуре позиций материализма Знание в отличие от Природы не имеет субстанциального статуса и его существование возможно только по мере наличия его носителя – человека, наделенного сознанием. В такой традиции рассматривается поиск истины как достоверного знания об устройстве Природы, а также открытие законов как описания фундаментальных взаимодействий в физической реальности. Хотя приведенные установки кажутся многим убедительными, стоит указать, как минимум, на два обстоятельства. Первое. Логика и математика рассматривают истину функциональной оценкой высказываний. Онтологически это можно осмыслить как то, что знания логики и математики субстанциальны. Более того, с учетом метафизического статуса они первенствуют над состояниями переменчивой Природы и ее объектов. Второе. С конца XX и с началом XXI в. установка ученых на открытие законов утрачивает актуальность [1].

Есть основание утверждать, что оппозиция Природа/Знание нуждается в переосмыслении. Наука и интеллектуальная культура в целом могут разворачиваться на пути от Знания к Природе. Да, следует помнить, что подобные установки были свойственны натурфилософии до появления позитивизма, подвергнувшего данный путь жесткой критике. Однако в особый мир Знание выделяет К.Р. Поппер [2], а В.В. Налимов встраивает информацию и знания непосредственно в научную картину мира [3]. Опыты информационной интерпретации физических понятий предпринимались в ветви кибернетики – гомеостатике [4].

В данной работе продемонстрируем возможность конструирования законов, предметом которых являются знания. Субстратом для этого выступают категории, включенные в состав номологической базы (НБ) [5]. В вопросе о законах знания в качестве реальности выступает мировоззрение.

2. К Знанию как субстанции. Обязательной составляющей автоматизированных устройств является экспертная система, а такая система, в отличие от вычислительных программ, базируется на использовании знаний. И давно стоит проблема о представлении знаний в таких системах, о поиске наиболее универсальной его модели. Поначалу указанная проблема затрагивала и факт вычислимости самих моделей представления, но теперь этот факт проблемы уже не несет [6]. Какие же модели представления знаний актуальны на роль наиболее универсальных для использования в экспертных системах? Вслед за решением этого вопроса актуальным становится и отношение к Знанию как субстанции.

Прежде всего, искомая модель должна состоять из наиболее универсальных по смыслу понятий, чтобы иметь возможность охватить любую предметную область деятельности. Каждое конкретное следует выражать через определенную интерпретацию универсальных понятий. К этому моменту надо относиться как к вполне естественной процедуре, полагаться на исчерпание всего конкретного утопично. Даже для роботов каждое конкретное должно определяться через их обучение, через их опыт

пребывания в условиях этого конкретного, и при смене конкретной работы заново надо быть готовым к соответствующему обучению и обретению опыта.

Далее, сам факт обучения означает, что конкретное должно прививаться сразу к комплексу универсальных понятий, в том числе и к смыслу такого комплекса. Так что универсальные понятия сами должны быть надежно упорядочены в достаточной мере осмысленные комбинации, которые тоже играют роль универсальных понятий, но более высокого разряда.

Наконец, для эффективности работы важно, чтобы комбинации были по возможности более краткими, а количество комбинаций при этом существенно превышало число используемых в деятельности опорных базовых понятий. И ориентиры на смыслы дают в этом деле намного более эффективный подход, чем просто использование пересчета подмножеств, характерное при опоре на языки формальных логик.

Принятие во внимание этих моментов приводит к представлению знаний в формате структуры НБ [5, 7]. И опыт работы с НБ уже не одним делом доказал эффективность использования Знания как субстанции в учебном процессе [8].

3. Организация знаний в номологической базе. В этот раз мы воспользуемся таблицей и через нее поясним, как организуются и прорабатываются знания в НБ.

Блоки из не связанных друг с другом категорий (К)			Законодательные части в русле определенного мировоззрения (М)		
V0	V1	V2	Мини-законы (L)	Объективные законы в М (OL)	Представители в М (R)
K-00	K-15	K-27	L-0	OL-0	R-0
K-01	K-13	K-28	L-1		
K-02	K-14	K-26	L-2		
K-03	K-18	K-21	L-3	OL-1	
K-04	K-16	K-22	L-4		
K-05	K-17	K-20	L-5		
K-06	K-12	K-24	L-6	OL-2	
K-07	K-10	K-25	L-7		
K-08	K-11	K-23	L-8		
K-09	K-1E	K-2G	L-9	OL-3	R-1
K-0A	K-1C	K-2H	L-A		
K-0B	K-1D	K-2F	L-B		
K-0C	K-1H	K-2A	L-C	OL-4	
K-0D	K-1F	K-2B	L-D		
K-0E	K-1G	K-29	L-E		
K-0F	K-1B	K-2D	L-F	OL-5	
K-0G	K-19	K-2E	L-G		
K-0H	K-1A	K-2C	L-H		
K-0I	K-1M	K-2Q	L-I	OL-6	R-2
K-0J	K-1N	K-2O	L-J		
K-0K	K-1L	K-2P	L-K		
K-0L	K-1P	K-2K	L-L	OL-7	
K-0M	K-1Q	K-2I	L-M		
K-0N	K-1O	K-2J	L-N		
K-0O	K-1J	K-2N	L-O	OL-8	
K-0P	K-1K	K-2L	L-P		
K-0Q	K-1I	K-2M	L-Q		

В таблице четвертый столбец представляет 27 мини-законов НБ, справа в их обозначении проставлены однозначно закрепленные за ними номера-индексы. В первых трех столбцах располагаются мини-категории НБ, разделенные на три блока по 27 штук, и справа в обозначении каждой из этих категорий проставлены однозначно закрепленные за ней две «цифры», первая из которых указывает номер блока, а вторая – номер-индекс места расположения в блоке. Мини-категории в таблице сгруппированы так, что в каждой строке мини-закон оказывается в НБ триадой из указанных в этой строке мини-категорий, при этом номер мини-категории из первого столбца совпадает с номером мини-закона.

В примере таблицы мини-законы расположены в порядке возрастания их номеров, но на деле описанные строки из четырех элементов могут располагаться в любом порядке. Различным порядкам расположения мини-законов будут отвечать различные законодательные проекции мировоззрения, а сама последовательность индексов мини-законов в порядке их расположения в таблице сверху вниз вправе считаться 27-значным кодом выстроенной проекции. Для каждой фиксированной проекции мировоззрения в пятом столбце таблицы располагаются 9 объективных законов такой проекции, а в шестом столбце – 3 ее представителя, сгруппированные указанным в таблице образом из мини-законов. Можно и вполне естественно говорить о 3-значном коде у каждого объективного закона и о 9-значном коде у каждого представителя. Уже при таком варианте получается 27! различных законодательных проекций мировоззрения, что практически неисчерпаемо.

На деле, конечно, многие из проекций будут повторять одна другую по содержанию, разве что с иным порядком расположения в них объективных законов и представителей. Кроме того, некоторые проекции очень важно бывает объединять в группы, рассматривать в едином комплексе. На этот счет предусматриваются объединения в ранге базовых мутаций, в ранге теорий всего, в ранге смысловых единиц развития. Однако и при таких объединениях разнообразие комплексов останется практически неисчерпаемым. В свою очередь, указанное представление в форме таблицы делает возможным организацию автоматической проработки законодательных проекций мировоззрения, в том числе поиска и выбора нужного из уже заготовленного в НБ.

В общем случае нельзя также исключать из внимания и такие проекции мировоззрения, которые не являются законодательными. На деле в каждом из первых трех столбцов таблицы допустимы произвольные перестановки расположенных в нем мини-категорий НБ. При этом в четвертом столбце в каждой строке будет прописываться имя триады из мини-категорий, оказавшихся в этой строке. В пятом столбце будут прописываться имена объединений из трех соответствующих триад, а в шестом – имена объединений из девяти соответствующих триад. Переход к общему случаю приводит к кубическому росту числа различных проекций мировоззрения, делая разнообразие комплексов еще более неисчерпаемым. И вновь указанное представление в форме таблицы делает возможным организацию автоматической проработки всех проекций мировоззрения в НБ. Однако осмысление, формирование и использование комплексов из таких проекций таит больше трудностей и в целом менее эффективно. Как-никак, но здесь придется использовать для проекций уже, как минимум, 81-значные коды.

4. Интерпретации как обучение и опыт по конкретике. Разумеется, материалы, которые используются для приложений, выступают относительно универсальными по сравнению с прикладными. При использовании в приложениях эти универсальные материалы наделяются конкретикой через подходящие интерпретации, обретенные в процессе обучения или опыта.

Так и к понятиям НБ следует отнести как наиболее универсальным в сфере знаний и при использовании их в приложениях заботиться о придании им подходящих интерпретаций. Не исключено, что какие-то интерпретации могут быть уже надежно выработаны и закреплены на уровне учебных материалов. Это можно представить как наличие в учебнике пары таблиц, одна из которых выступает одной из возможных реализаций таблицы с понятиями из НБ, а другая повторяет ее, но с указанием нужных интерпретаций вместо этих понятий. Формировать таблицу с интерпретациями, как и сам учебник, должны, конечно, специалисты по соответствующей предметной деятельности. Однако не исключен здесь и обратный ход, когда используется та часть НБ, в которой не все понятия определены, и специалисты могут помочь преодолеть имеющуюся неопределенность. Как-никак, НБ содержит практически неисчерпаемое число универсальных понятий, до конца осмысленной всегда будет лишь ничтожно малая их часть, так что какая-то деятельность вполне может потребовать обращения к еще не осмысленным в НБ понятиям.

Однако всех возможных ситуаций тоже заранее перебрать и, тем более, издать под них учебники никогда не получится. Поэтому не менее важно держать ориентиры на умение формировать интерпретации понятий НБ непосредственно в процессе опыта. Это особо актуально при формировании автоматизированных устройств и их экспертных систем. Здесь кстати очень мог бы помочь опыт обучения нейросетей. Более того, в перспективе нейросети могли бы стать инструментом и по формированию таблиц интерпретаций для разных видов предметной деятельности.

5. Заключение. С помощью НБ демонстрируется возможность работы со знаниями, добиваясь сочетания смысло-содержательного и формально-математического, универсального (сама НБ) и конкретного (описание с помощью НБ). Использование НБ доведено до исчисления проекций мировоззрения.

Список литературы

1. Разумов В.И. К новой парадигме закона / В.И. Разумов, В.П. Сизиков // Вестник Омского ун-та. – 2012. – № 2. С. 213–219.
2. Поппер К.Р. Логика научного исследования: Пер. с англ. / К.Р. Поппер / Под общ. ред. В.Н. Садовского. – М.: Республика, 2004.
3. Налимов В.В. Спонтанность сознания личности. Вероятностная теория смыслов и смысловая архитектура / В.В. Налимов. – М.: Изд-во «Прометей» МГПИ им. Ленина, 1989.
4. Gorsky Y. Danger of development of a global catastrophe and the need for new information concepts / Y. Gorsky, V. Razumov, A. Teslinov // Kybernetes. The International Journal of Systems and Cybernetics. – Volume 28, Numbers 8 and 9. – 1999. pp. 929–938.
5. Разумов В.И. Приложения информационных основ синтеза систем: ДИС-развёртки и парадигма закона. Монография [Электронный ресурс] / В.И. Разумов, В.П. Сизиков. Электронное издание № 33934. № гос. регистр. 0321304636, ФГУП НТИЦ «Информрегистр». – Омск. 2014.
6. Гуц А.К. Синтетическая вычислимость: учебное пособие / А.К. Гуц. – Омск: Изд-во ОмГУ, 2016.
7. Сизиков В.П. Теории всего и смысловое развитие / В.П. Сизиков, В.И. Разумов // Нейроинформатика, ее приложения и анализ данных: Материалы XXV Всероссийского семинара, 29 сентября – 1 октября 2017 года / Под ред. А.Н. Горбаня, отв. за вып. М.Ю. Сенашова. – Красноярск: Институт вычислительного моделирования СО РАН, 2017. – С. 79–84.
8. Сизиков В.П. Системный анализ: Учебно-методическое пособие / В.П. Сизиков; Омский гос. ун-т путей сообщения. – Омск, 2019.

НЕЙРОСЕТЕВЫЕ АЛГОРИТМЫ КЛАССИФИКАЦИИ ПАТОЛОГИИ ЛЕГКИХ НА РЕНТГЕНОВСКИХ СНИМКАХ

К.В.Симонов¹, Ю.А.Хамад², А.С.Кенц³

¹Институт вычислительного моделирования СО РАН, simonovkv@icm.krasn.ru

²Сибирский федеральный университет,

Институт космических и информационных технологий, каф. ПМКБ,

y.albayati8@gmail.com

³Федеральный Сибирский научно-клинический центр ФМБА России,

anzhelika.kents@gmail.com

Введение

В настоящее время заболеваемость органов дыхания занимает лидирующее положение, что приводит к востребованности новых рентгенологических исследований. Рентгенография грудной клетки являются наиболее часто используемым методом визуализации для диагностики различных заболеваний легких и наиболее широко используемым диагностическим методом из-за его низкой радиации и отсутствия побочных эффектов. Интерпретация рентгеновских снимков основана на опыте рентгенолога и качестве рентгеновского изображения.

Компьютерный скрининг может помочь в ранней диагностике, а стандартная рентгенография грудной клетки является наиболее распространенным методом визуализации [1]. Важными этапами анализа таких изображений являются точное определение границ легких и их классификация как нормальных, так и аномальных (с патологиями). Этот инструмент ранней диагностики обычно используется в клинических условиях для мониторинга дефектов в области сердца, а также заболеваний легких. В некоторых диагностических случаях, информация, основанная на непосредственно связанных изображениях границ легких, может быть извлечена и без дальнейшего анализа. Например, наличие неправильной формы, измерения общего объема легких свидетельствует о серьезных заболеваниях, таких как увеличение сердца, пневмония и др. [2].

Отметим, что в настоящее время компьютерная диагностика стала частью рутинной клинической работы. Обнаружение рентгенологических областей легких является важным компонентом, особенно при определении, является ли легкое нормальным или аномальным (с патологией) [3-5]. Обнаружение областей легкого обычно является первым шагом в компьютерном анализе рентгенографии грудной клетки. Информация о геометрических характеристиках легких позволяет проводить дальнейшую оценку их состояния.

В последние годы предложены различные методы сегментации изображений, позволяющие получить границу легких. Эти методы используют разные подходы. В частности, предлагается подход, основанный на правилах, которые содержат последовательности шагов, таких как пороговые или морфологические вычислительные процедуры. Методы, основанные на этом подходе, имеют в основном эвристические предположения и, в итоге, получаем приближенные оценки. Эти результаты могут быть использованы в качестве этапа инициализации для применения более надежных алгоритмов сегментации [6].

В работе [5] предложен метод сегментации области легких в изображениях с использованием фильтра Canny Edge и далее выполняется обработка морфологии. Другой, более общий подход, учитывающий классификацию пикселей, моделирует интенсивности внутри и снаружи областей легких и классифицирует пиксели изображения либо на объекте (поле легкого), либо на фоне. В последние годы разработаны методы, в которых используются модели формы или внешнего вида легких.

Помимо этих общих подходов исследователи используют комбинацию различных подходов. Например, в [3] предложили использовать сегментацию с применением графов с информацией о значимости, основанную на глобальной функции контраста. В работе [4] для сегментации легких использовался метод оптимизации графа в сочетании с моделью легкого.

Появление цифровой рентгенографии грудной клетки и возможность цифровой обработки изображений дали новый импульс компьютерному скринингу в диагностике. Тем не менее, несмотря на успехи, стандарт классического рентгенологического изображения является очень сложным объектом для визуализации. Отметим, что для определения наличия патологий (возможных заболеваний) широко используется подход, основанный на искусственных нейронных сетях (ИНС) [7-10]. Программы, использующие ИНС, способны к самообучению и справляются с изменяющимися обстоятельствами в процессе моделирования исходных данных.

В работе описывается решение задачи построения четких границ легких, которые приводят к лучшей классификации исследуемых изображений. Предлагаем набор вычислительных процедур (методику) для обработки и подготовки изображения для дальнейшего анализа снимков специалистами рентгенологами. В этих настройках методики можно выделить два основных компонента: улучшение качества изображения и формирование границ легких с генерацией карты границ. На последнем этапе проводится классификация изображений с помощью двоичного классификатора ИНС.

1. Методика анализа изображений

Целью исследования является разработка вычислительной методики, которая включает этапы сегментации и классификации изображений для выявления границ, а также отклонений в легких. Наличие патологий определяется в предложенной методике тремя этапами. В большинстве случаев изображения (или наборы изображений) имеют заметный шум и разные уровни контрастности из-за технических характеристик используемого устройства. Подавление шума с помощью медианного фильтра и усиление контраста проводятся на первом этапе. На втором этапе проводится определение границ легких. На этом этапе выполняются пороговая обработка по методу Оцу и формирование выпуклой оболочки точек внешнего контура. Третий этап посвящен классификации изображений (выявление патологии). Выделение признаков основано на алгоритме GLCM, а классификация изображений на рентгеновских снимках производится классификатором PNN.

Предварительная обработка. Основная задача предварительной обработки – повышение качества изображений. Этот этап помогает улучшить некоторые параметры изображений (например, отношение сигнал / шум) и улучшить визуальный внешний вид, удаляя ненужный шум и нежелательные части фона. С учетом возможных вариантов помех на изображениях в качестве основного фильтра для подавления шума выбран медианный фильтр.

Помимо подавления шумов, во время обработки медицинских изображений требуется усиление контрастности для интересующей области. В предлагаемой методике используется подход, основанный на алгоритме BCET, потому что контраст изображения можно растянуть или сжать без изменения гистограммы входного изображения. Кроме того, используется и другой подход – адаптивная обработка с ограничением контрастности (CLANE) [11]. Показаны результаты повышения контрастности для рентгеновского изображения с патологией и без патологии. Также показано, что результаты с использованием BCET лучше подходят для определения площади легких путем определения порога по сравнению с результатами применения алгоритма CLANE. Это связано с тем, что область легких темнее, чем на исходном

изображении, а контраст сосудов, тканей и ребер невелик. Однако результаты CLAHE могут использоваться в качестве дополнительных данных для расчета диагностических признаков. На рисунке изображена принципиальная схема предложенного подхода.

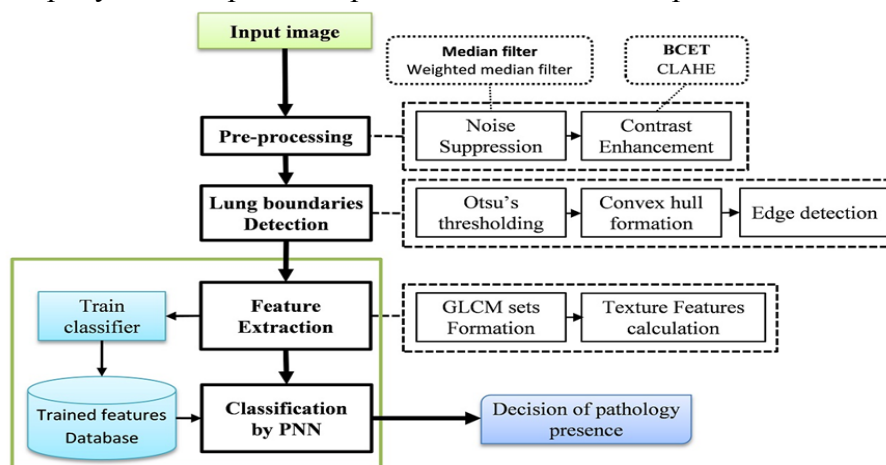


Рис. Алгоритмическая схема (методика) обработки и анализа изображений

Сегментация. Высокая точность сегментации в медицинской визуализации позволяет точно идентифицировать заболевание. Существует два подхода к сегментации изображения: подход на основе разрыва и подход на основе подобия. Подход, основанный на разрыве, представляет собой идентификацию изолированных точек, или линий, или краев на изображении (например, определение границ легких в рентгеновских снимках). Подход, основанный на сходстве, представляет собой группировку сходных значений интенсивности изображения. Сегментация легких основана на геометрических особенностях, таких как края. Сегментация легких с обнаружением краев является фундаментальным и важным этапом предварительной обработки, поскольку края представляют контурные особенности в соответствующем изображении [5].

Установление порога является одним из подходов, основанных на сходстве. В случае порогового изображения темный объект (кроме границ изображений) означает, что легкие и другие части являются его фоном. Для пороговой сегментации выбран метод Оцу. Это позволяет адаптивно определять глобальный порог. Чтобы определить контур границ легкого, изображение условно делят на две половины. Затем для обеих половин строится выпуклая оболочка, чтобы задать множество точек на плоскости [12]. После этого обе половины объединяются в одно изображение. Наконец, контурное представление формируется детектором краев Canny. Показаны примеры сегментации легких с обнаружением границы. Полученное решение задачи – сегментированное изображение способствует специалистам рентгенологам поставить диагноз. Информация о сегментах легких позволяет оценить размер и особенности легких, которые могут быть полезны для диагностической оценки.

Следующая решаемая задача – классификация изображений. Точность классификации зависит от качества извлеченных признаков. Матрица совпадений уровней серого является надежным способом статистического анализа изображений, которая используется для оценки характеристик изображений относительно статистики второго порядка. Способ GLCM определяется как построение двумерной матрицы совместных вероятностей между парами пикселей на изображении, как распределение совместно встречающихся значений с заданным смещением (dx, dy) для изображения с размером N×M. Особенности описания изображений выбраны в соответствии с [13]: энергия (F8), контраст (F2), корреляция (F3), автокорреляция (F1), энтропия (F9),

однородность (F10), различие (F7), оттенок кластера (F6), распространенность кластера (F5), максимальная вероятность (F12), сумма квадратов (F13), обратный разностный момент (F21), средняя сумма (F14), разница суммы (F16), энтропия суммы (F15), разница разности (F17), энтропия разности (F18) и информационная мера корреляции (F19). Показаны примеры графического представления на основе GLCM для областей легких. Для лучшего восприятия результаты изображены в инвертированных значениях. Чтобы получить лучшие результаты классификации, матрицы GLCM созданы для различных смещений (от 2 до 4 пикселей) и углов (0° , 45° , 90° и 135°).

2. Классификация рентгеновских изображений

Классификатор используется для обнаружения аномальных изображений (изображений с патологией). Чтобы провести классификацию изображений, использовали вероятностную нейронную сеть (PNN), которая относительно нечувствительна к выбросам и генерирует точно предсказанные целевые оценки вероятности. PNN – это нейронная сеть с прямой связью, основанная на байесовских правилах и анализе дискриминанта ядра Фишера.

Нейросеть PNN состоит из 4 уровней: входного уровня, уровня шаблона, уровня суммирования и уровня принятия решения. В реализации программного обеспечения, чтобы отличить отклонения от нормальных изображений, использована обобщенная форма слоев. Решение: входной вектор классифицируется как класс А, если общий входной сигнал положительный. Важное преимущество PNN – скорость обучения, т.е. вес не «обучен», а назначен. Существующие веса никогда не будут чередоваться, только новые векторы вставляются в матрицы весов при обучении. Поскольку обучение может быть осуществлено с помощью матричных манипуляций, производительность алгоритма PNN очень высокая [14].

В качестве первого этапа экспериментальное исследование выполнялось на двух наборах данных [15]. Первый набор (MC) содержал 138 рентгеновских снимков грудной клетки, а также 80 нормальных и 58 случаев с проявлениями патологии (туберкулез). Второй набор (SH) содержал 662 рентгенограммы грудной клетки. При этом было 326 нормальных случаев и 336 случаев с проявлениями туберкулеза.

Рентгеновские снимки предоставлялись в форматах png и dicom. Размеры рентгеновских изображений составляли 4020×4892 или 4892×4020 пикселей для набора MC и от 1250×1136 до 3000×2989 пикселей для набора SH. Надежность и правильность определения границ легких оценивали по следующим показателям: показатель качества (FOM), коэффициент подобия Jaccard (Ω), чувствительность к коэффициенту подобия Dice (DSC), среднее расстояние до контура (ACD), а также полученная точность решения задачи. Эти показатели в основном зависят от значений TP, TN, FP, FN и REC_{nt} , где TP – количество пикселей, правильно идентифицированных как область легкого, TN – количество пикселей, правильно обнаруженных в качестве фона, FP – количество пикселей, ошибочно идентифицированных как область легких, а FN – количество пикселей, ошибочно обнаруженных в качестве фона.

Величина «базовая кромка» (REC_{nt}) представляет собой количество краевых пикселей в эталонной карте, созданной экспертом. Показатель FOM представляет уровень сходства двух контуров. Коэффициент подобия (Jaccard) представляет собой метрику перекрытия. Это позволяет количественно определить область перекрытия между сегментацией по алгоритму и эталонными границами. Другой перекрывающейся мерой является коэффициент подобия Dice.

Эти меры имеют значение от 0 до 1; где 1 – указывает на полностью перекрывающуюся сегментацию. Значение классификации для каждого пикселя не зависит от их расстояния до опорной границы. Следовательно, одних перекрывающихся

показателей недостаточно для оценки производительности алгоритма для обнаружения области. Поэтому дополнительно используются оценки расстояния на основе метрики, такой как среднее расстояние до контура (ACD) для количественного определения расстояния между краем легкого и расчетной границей. Метрика ACD – определяет минимальное расстояние каждой точки на границе S к контуру R.

В работе приведены статистические данные и оценки решения задачи – обнаружение границ легких. Для расчета искомым оценок были объединены наборы данных из базы MC и SH. Приводится визуальное представление обнаруженных границ легких, определяется граница легких, полученная предлагаемым способом на основе разработанной методики. Сравнительный анализ предлагаемого способа и известных методов основан на коэффициенте сходства Jaccard, коэффициенте подобия Dice, а также на среднем расстоянии до контура, представлены результаты соответствующих расчетов.

Для дополнительной проверки и оценки точности классификатора PNN проведено обучение на совместном наборе изображений из наборов данных MC и SH. Учебный набор содержал 40 изображений с патологиями и 40 изображений без патологий. Точность классификации PNN проверена на этом наборе изображений. Экспериментальные исследования показали, что средняя точность классификации составляет 96%. Точность для набора данных SH выше, чем для набора данных MC. Ошибка классификации аномальных изображений составляет около 4-5%.

Выводы

В статье представлен подход (вычислительная методика) для определения границ легких и классификации изображений в обычных рентгенограммах передней части грудной клетки. Определяем области легких, размеры областей и неровности формы с помощью методов сегментации, которые используются при обработке изображений на рентгенограммах грудной клетки. Из изображения извлекаем объекты интереса с использованием матрицы совпадений уровней серого (GLCM). Это позволяет классифицировать как нормальное изображение, так и аномальное (с патологиями), используя алгоритм вероятностной нейронной сети (PNN). Предложенный метод имеет преимущества в связи со сравнительно более коротким временем обучения и повышенной точностью.

Метод обнаружения областей легкого дает точность, которая совпадает с оценками других методов по коэффициентам подобия Жакара (Jaccard) и Дайса (Dice). Средние значения этих показателей составляют 0,915 и 0,955, соответственно. Средняя точность классификации составляет от 94,98% до 95,77% и зависит от набора данных. Ошибка классификации изображений составляет (4-5%), что недостаточно для полной компьютерной автоматизации процесса обработки и анализа рентгеновских снимков. Однако разработанная вычислительная методика, которая основана на предложенных и описанных выше алгоритмах, может быть использована в качестве составляющей системы поддержки принятия диагностических решений специалистами рентгенологами.

Список литературы

1. Wan Ahmad, Wan Siti Halimatul Munirah, Wan Mimi Diyana Wan Zaki, Mohammad Faizal Ahmad Fauzi, and Wooi Haw Tan. Classification of Infection and Fluid Regions in Chest X-Ray Images // IEEE International Conference on Digital Image Computing: Techniques and Applications (DICTA). — 2016. — P. 1 – 5.

2. Qin, Chunli, Demin Yao, Yonghong Shi, and Zhijian Song. Computer-aided detection in chest radiography based on artificial intelligence: a survey // *Biomed Eng Online*. — 2018. — V. 17. — № 1. — P. 113. doi:10.1186/s12938-018-0544-y.
3. Li, Xin, Leiting Chen, and Junyu Chen. A visual saliency-based method for automatic lung regions extraction in chest radiographs // *IEEE 14th International Computer Conference on Wavelet Active Media Technology and Information Processing (ICCWAMTIP)*. — 2017. — P. 162 – 165.
4. Jaeger, Stefan, Alexandros Karargyris, Sema Candemir, Les Folio, Jenifer Siegelman, Fiona Callaghan, Zhiyun Xue, Kannappan Palaniappan, Rahul K. Singh, Sameer Antani, George Thoma, Yi-Xiang Wang, Pu-Xuan Lu, and Clement J. McDonald. Automatic tuberculosis screening using chest radiographs // *IEEE transactions on medical imaging*. — 2014. — V. 33. — № 2. — P. 233 – 245.
5. Saad, Mohd Nizam, Zurina Muda, Noraidah Sahari Ashaari, and Hamzaini Abdul Hamid. Image segmentation for lung region in chest X-ray images using edge detection and morphology // *IEEE International Conference on Control System, Computing and Engineering (ICCSCE 2014)*. — 2014. — P. 46 – 51.
6. Annangi, Pavan, Sheshadri Thiruvankadam, A. Raja, Hao Xu, Xiwen Sun, and Ling Mao. A region based active contour method for X-ray lung segmentation using prior shape and low level features // *IEEE International Symposium on Biomedical Imaging: From Nano to Macro*. — 2010. — P. 892 – 895.
7. Azar, Ahmad Taher, and Shaimaa Ahmed El-Said. Probabilistic neural network for breast cancer classification // *Neural Computing and Applications*. — 2013. — V. 23. — № 6. — P. 1737 – 1751.
8. Wang, Chunliang. Segmentation of multiple structures in chest radiographs using multi-task fully convolutional networks. In *Scandinavian Conference on Image Analysis*. 2017. P. 282–289. Springer, Cham.
9. Kieu, Phat Nguyen, Hai Tran, Thai Hoang Le, Tuan Le, and Thuy Thanh Nguyen. Applying Multi-CNNs model for detecting abnormal problem on chest x-ray images // *IEEE 10th International Conference on Knowledge and Systems Engineering (KSE)*. — 2018. — P. 300 – 305.
10. Akram, Sheeraz, Muhammad Younus Javed, Usman Qamar, Aasia Khanum, and Ali Hassan. Artificial Neural Network based Classification of Lungs Nodule using Hybrid Features from Computerized Tomographic Images // *Appl. Math. Inf. Sci.* — 2018. — V. 9. — № 1. — P. 183 – 195.
11. Kumbhar, Uday, Vishal Patil, and Shekhar Rudrakshi. Enhancement of Medical Images Using Image Processing In Matlab // *International Journal of Engineering Research and Technology*. — 2013. — V. 2. — № 4. — P. 2359 – 2364.
12. Mark de Berg, Otfried Cheong, Marc van Kreveld, and Mark Overmars. *Computational Geometry: Algorithms and Applications*. Springer Berlin Heidelberg, — 2008.
13. Gómez, Wilfrido, Wagner Coelho Albuquerque Pereira, and Antonio Fernando Catelli Infantosi. Analysis of co-occurrence texture statistics as a function of gray-level quantization for classifying breast ultrasound // *IEEE transactions on medical imaging*. — 2012. — V. 31. — № 10. — P. 1889 – 1899.
14. Nandhagopal, N., Gandhi, K. R., and Sivasubramanian, R. Probabilistic Neural Network Based Brain Tumor Detection and Classification System // *Research Journal of Applied Sciences, Engineering and Technology*. — 2015. — V. 10. — № 12. — P. 1347 – 1357.
15. Jaeger, Stefan, Sema Candemir, Sameer Antani, Yi-Xiang J. Wang, Pu-Xuan Lu, and George Thoma. Two public chest X-ray datasets for computer-aided screening of pulmonary diseases // *Quantitative imaging in medicine and surgery*. — 2014. — V. 4. — № 6. — P. 475 – 481.

О СООТНОШЕНИИ ВЛИЯНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ И ТАКСОНОМИЧЕСКИХ РАЗЛИЧИЙ ДЛЯ ГЕНОВ СЕМЕЙСТВА *atp* МИТОХОНДРИЙ НЕКОТОРЫХ ГРИБОВ

В.Д. Федотовская¹, Т.О. Шпагина¹, А.И. Колесникова¹, М.Г. Садовский^{1,2}

¹Сибирский федеральный университет, ИФБиБТ,

²Институт вычислительного моделирования СО РАН,
viktoria.fedotovskaia@gmail.com, kolesnikova.denovo@gmail.com,
shpagusa@mail.ru, msad@icm.krasn.ru

Введение

Несмотря на значительные успехи современной молекулярной биологии и биоинформатики, проблема связи структуры биологических макромолекул и определяемых ими функций всё ещё далека от полного разрешения. Напротив, накапливаются всё новые данные, которые позволяют увидеть проблему в новом свете и ставят новые вопросы. Сама по себе постановка вопроса о связи структуры и функции достаточно сложна и требует специального обсуждения. Не вдаваясь в обсуждение того, что можно считать структурой, зафиксируем, что в рамках настоящей работы под структурой будет пониматься частотный словарь триплетов W_3 , определённый тем или иным образом. Постановка вопроса о связи структуры и функции здесь заключается в следующем: верно ли, что различные генетические тексты (это могут быть гены, геномы, фрагменты тех и других, иные участки последовательностей ДНК) образуют сравнительно чётко выраженные кластеры (плотные группы) в пространстве частот указанных триплетов, и если да, то верно ли, что состав таких кластеров является неравномерным с точки зрения функций, определяемых этими генетическими текстами?

Ранее подобная постановка использовалась для анализа связи структуры и таксономии на примере геномов хлоропластов [1 – 3] либо митохондрий [4]. В работах [6, 7] показано, что для случая сочетанного анализа всего семейства генов *atp* функциональные различия между отдельными генами оказываются гораздо сильнее, чем таксономическое положение их носителей. В настоящей работе исследуется связь структуры генов, их функциональной роли и таксономии носителей на примере гена *atp6* митохондрий грибов: верно ли, что влияние таксономии «восстановится», если распределение генов по кластерам изучать только для одного гена из семейства (а именно, гена *atp6* митохондрий грибов). Ещё одной задачей исследования было выявление наиболее значимых факторов различия получаемых кластеров для случая редуцированного (аминокислотного) алфавита соответствующих последовательностей.

В рамках настоящей работы под структурой будет пониматься частотный словарь триплетов, определяемый по последовательности гена. Точнее, будем рассматривать два вида частотных словарей — $W_{(3,1)}$ и $W_{(3,3)}$, — отличающиеся величиной шага t рамки считывания. Дадим более строгое определение. Пусть $\mathfrak{Z}$ — нуклеотидная последовательность генома митохондрии того или иного гриба. Мы будем полагать, что геном идеален: в нём нет иных символов, кроме тех, которые составляют его алфавит $\aleph = \{A, C, G, T\}$, и аннотация генома исчерпывающе описывают любой его участок. На основе аннотации выделим в геноме последовательность L длины M , соответствующую тому или иному гену. В рамках настоящей работы выделялись последовательности L генов АТФсинтаз (*atp6*, *atp8* и *atp9*) в двух вариантах: в форме гена, содержащегося в ДНК (то есть, с включением интронов) и в форме зрелой мРНК, где все интроны были исключены.

Под частотным словарем $W_{(3,t)}$ толщины 3 будем понимать список всех троек

$\omega = \nu_1\nu_2\nu_3$ идущих подряд нуклеотидов, выделяемых в последовательности L окном считывания длиной 3 нуклеотида, перемещающимся вдоль по L с шагом в t нуклеотидов. В настоящей работе рассматривались словари $W_{(3,t)}$ с $t=1$ и $t=3$; впредь мы их будем обозначать W_3 и $\bar{W}_3$, соответственно. Для построения частотного словаря необходимо каждый триплет $\omega \in W_3$ ($\omega \in \bar{W}_3$, соответственно) снабдить его частотой. Частота f_ω — это отношение числа копий n_ω данного слова к общему числу всех триплетов N , где N — сумма всех n_ω :

$$f_\omega = \frac{n_\omega}{N}. \quad (1)$$

Для исследования были использованы данные, содержащиеся в открытом доступе в базе NCBI-банка. Было отобрано 223 генома митохондрий различных грибов пяти отделов. С помощью программы CLC из всех геномов выделялись фрагменты, соответствующие генам семейства *atp*; при этом выделение делалось в двух формах: в форме собственно гена (т.е. с включением в последовательность интронов) и в форме CDS (последовательности, не содержащей интронов). Затем каждая из последовательностей преобразовывалась в частотные словари двух типов — W_3 и $\bar{W}_3$, соответственно, с помощью *ad hoc* программы. Далее с помощью программы *VidaExpert* (<http://bioinfo-out.curie.fr/projects/vidaexpert/>) анализировалось распределение точек (частотных словарей) в пространстве частот триплетов.

Сформулируем ещё раз строго две задачи, решённые в настоящем исследовании:

- проверить структурированность, выделяемую на множестве частотных словарей редуцированной размерности (равной 21) для словарей $\bar{W}_3$; эта размерность соответствует размерности «аминокислотного пространства» — синонимические кодоны будут объединены в одну группу;
- проверить структурированность, выделяемую на множестве частотных словарей W_3 и $\bar{W}_3$, построенных по одному гену (отдельно для генов *atp6*, *atp8* и *atp9*) и сравнить её со структурированностью, выделяемой на совместном множестве всех этих генов (см. [6, 7]).

Решение первой задачи позволит выявить наиболее важные кодоны, обеспечивающие разделимость кластеров.

Методы кластеризации

Переход от последовательностей к частотным словарям позволяет использовать все методы анализа многомерных метрических данных, в том числе методы кластеризации данных и их визуализации. В рамках настоящей работы использовались два метода кластеризации: метод динамических ядер (линейный) и метод упругих карт (нелинейный). Опишем кратко каждый из них.

Метод динамических ядер — классический метод классификации; она строится с помощью линейных делителей, минимизирующих суммарные расстояния от точек, составляющих класс, до плоскостей, делящих множество на классы (детали см. в [5]). Кроме этого метода, в работе активно использовался метод упругих карт — нелинейный метод визуализации и кластеризации данных.

Опишем этот метод. На первом шаге найдём первую и вторую главные компоненты для множества данных и построим на них как на осях плоскость. Выделим в этой плоскости подмножество (обычно квадрат) такого размера, чтобы все данные проектировались внутрь этого квадрата. Затем найдём все проекции точек (частотных словарей, в нашем случае) на этот квадрат.

На втором шаге соединим каждую точку данных с её проекцией математической пружины; такая пружина обладает бесконечной растяжимостью и её свойства не меняются по мере растяжения. На третьем шаге заменим исходно жёсткую поверхность квадрата на гибкую мембрану, которая может деформироваться и отпустим всю систему так, чтобы она достигла конфигурации, соответствующей минимуму общей энергии деформации. Важным ограничением в такой процедуре является сохранение топологии исходного множества: эластичную мембрану нельзя разрывать и склеивать.

На четвёртом шаге переопределим положение каждой точки исходного множества на деформированной мембране, а именно, найдём ортогональную проекцию каждой точки. Наконец, удалим все математические пружины, позволив мембране занять исходное положение и стать снова плоским квадратом. Получившаяся конструкция и будет называться упругой картой с данными [8].

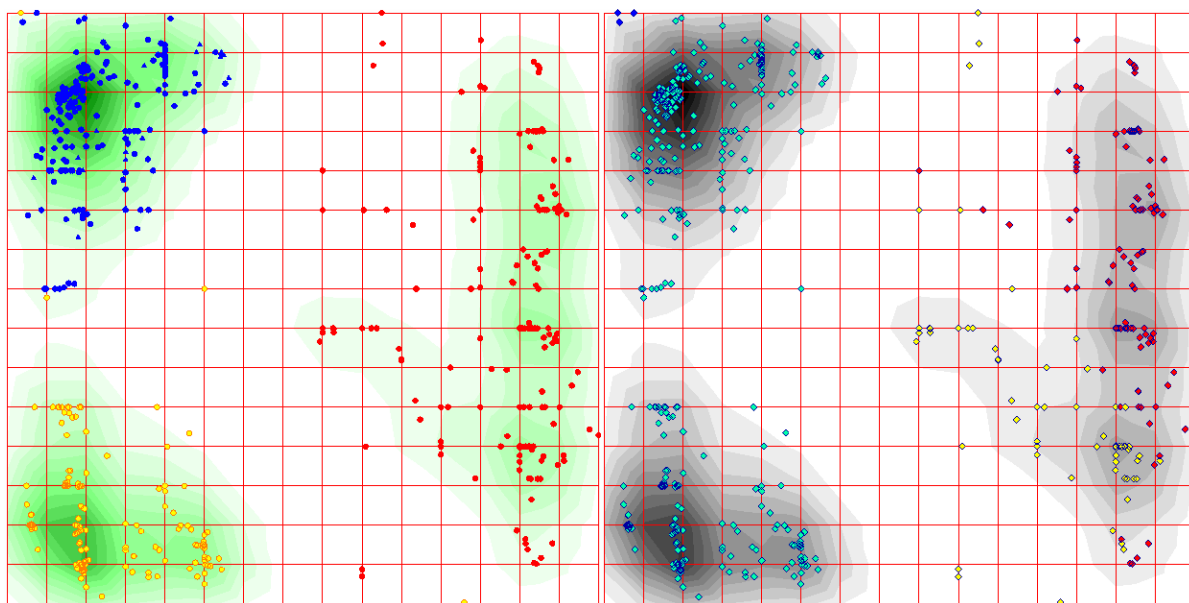


Рис. 1. Распределение генов *atp6* (синие кружки), *atp8* (красные кружки) и *atp9* (жёлтые кружки) на упругой карте размера 16×16 (слева) и распределение тех же генов методом динамических ядер на 4 класса (справа).

После такого переопределения точек на поверхности упругой карты введём для выявления кластеризации локальную плотность. Для этого каждую точку на карте (определённую во внутренних координатах) снабдим колоколообразной сферически симметричной функцией (например, функцией Гаусса)

$$\gamma_j(r) = A \cdot \exp \left\{ -\frac{(r - r_j)^2}{\lambda^2} \right\}, \quad (2)$$

где индекс j перечисляет все точки на карте. Затем просуммируем функции (2) по всем точкам и построим линии уровня; построенная таким образом суммарная функция выявит области повышенной локальной плотности точки на карте, эти точки будут интерпретироваться как кластеры.

Результаты и обсуждение

В исследовании использовались данные открытого доступа в базе NCBI-банка. Изучалось 223 генома митохондрий различных грибов пяти отделов, программой CLC из всех геномов выделялись фрагменты, соответствующие генам семейства *atp*; при этом выделение делалось в двух формах: в форме собственно гена (т.е. с включением в последовательность интронов) и в форме CDS (последовательности, не содержащей

интронов). Затем каждая из последовательностей преобразовывалась в частотные словари двух типов — W_3 и $\overline{W}_3$, соответственно, с помощью *ad hoc* программы. Далее с помощью программы *VidaExpert* (<http://bioinfo-out.curie.fr/projects/vidaexpert/>) анализировалось распределение точек (частотных словарей) в пространстве частот триплетов и частот аминокислотных остатков (для случая словаря $\overline{W}_3$).

Представим результаты изучения распределения генов семейства АТФсинтаз митохондрий некоторых грибов-патогенов хвойных Сибири в пространстве редуцированной размерности — в пространстве частот аминокислот. На Рисунке 1 представлена упругая карта с распределением генов семейства АТФсинтаз в разрезе трёх генов — *atp6*, *atp8* и *atp9* (слева) — и при классификации методом динамических ядер на 4 класса (справа). Хорошо видно, что соответствие выделяемых на упругой карте кластеров генам (*atp6*, *atp8* или *atp9*) не оставляет желать лучшего. Это распределение заметно точнее того, которое наблюдается в 64-мерном пространстве частот триплетов [9]. Отметим, что классификация генов методом динамических ядер достаточно слабо устойчива: деление на три класса даёт весьма низкий (порядка 0,50) уровень устойчивости, деление на четыре класса повышает устойчивость до 0,78, однако его всё равно едва ли можно считать значимым. Здесь под уровнем устойчивости понимается доля тех запусков метода динамических ядер, которая привела к одной и той же конечной конфигурации в распределении точек. Отметим, что доля волатильных генов (т.е. генов, совокупно меняющих свою принадлежность к тому или иному классу) для рассматриваемого случая ниже, чем для случая, описанного в [9].

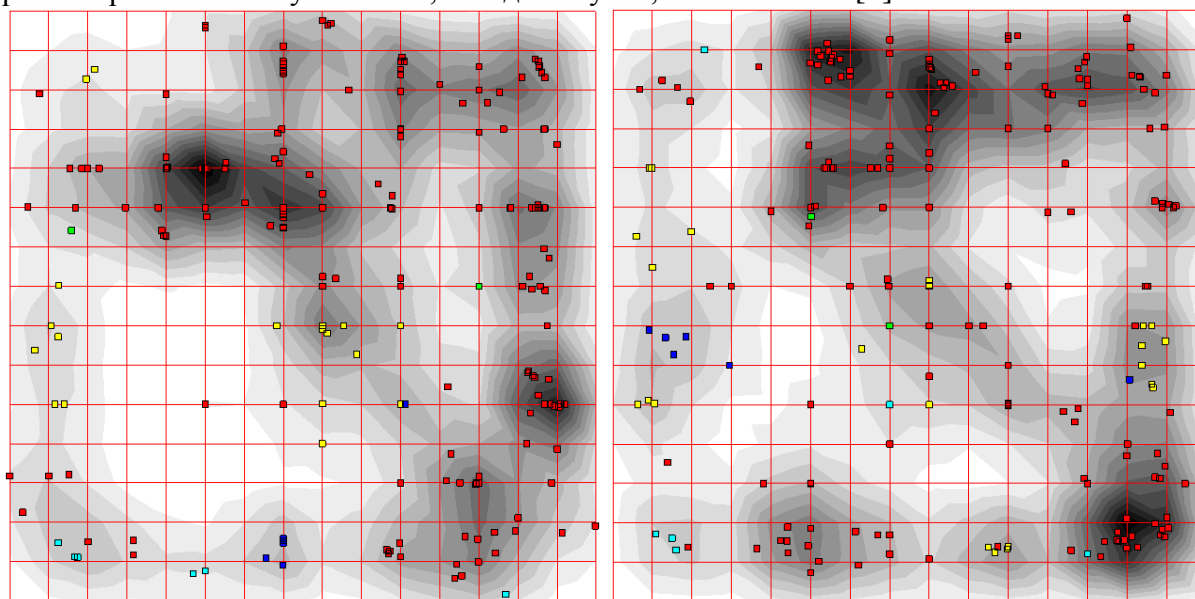


Рис. 2. Распределение различных отделов по упругой карте, построенной только по частотам триплетов (словари W_3 и $\overline{W}_3$ слева и справа, соответственно) для гена *atp6*.

Рассмотрим теперь результаты распределения частотных словарей для случая единственного гена. Поясним сказанное. Если выше рассматривались все три гена АТФсинтаз для 223 геномов митохондрий некоторых грибов, то теперь мы перейдём к анализу распределения генов (преобразованных в частотные словари W_3 и $\overline{W}_3$, соответственно) только одного вида: *atp6*, *atp8* или *atp9* отдельно. Иными словами, если

для семейства генов был обнаружен сильный приоритет функции (то есть, вида конкретного гена из семейства АТФсинтаз) над таксономией, то в рамках анализа лишь по одному гену можно ожидать обратного эффекта — преобладающего влияния таксономии носителя гена, что видно из упомянутых рисунков. Обозначения на Рисунках 2, 3 таковы: *Ascomycetes* — красный, *Basidiomycetes* — желтый, *Blastocladiomycota* — зеленый, *Chytridiomycota* — голубой и *Zygomycetes* — синий.

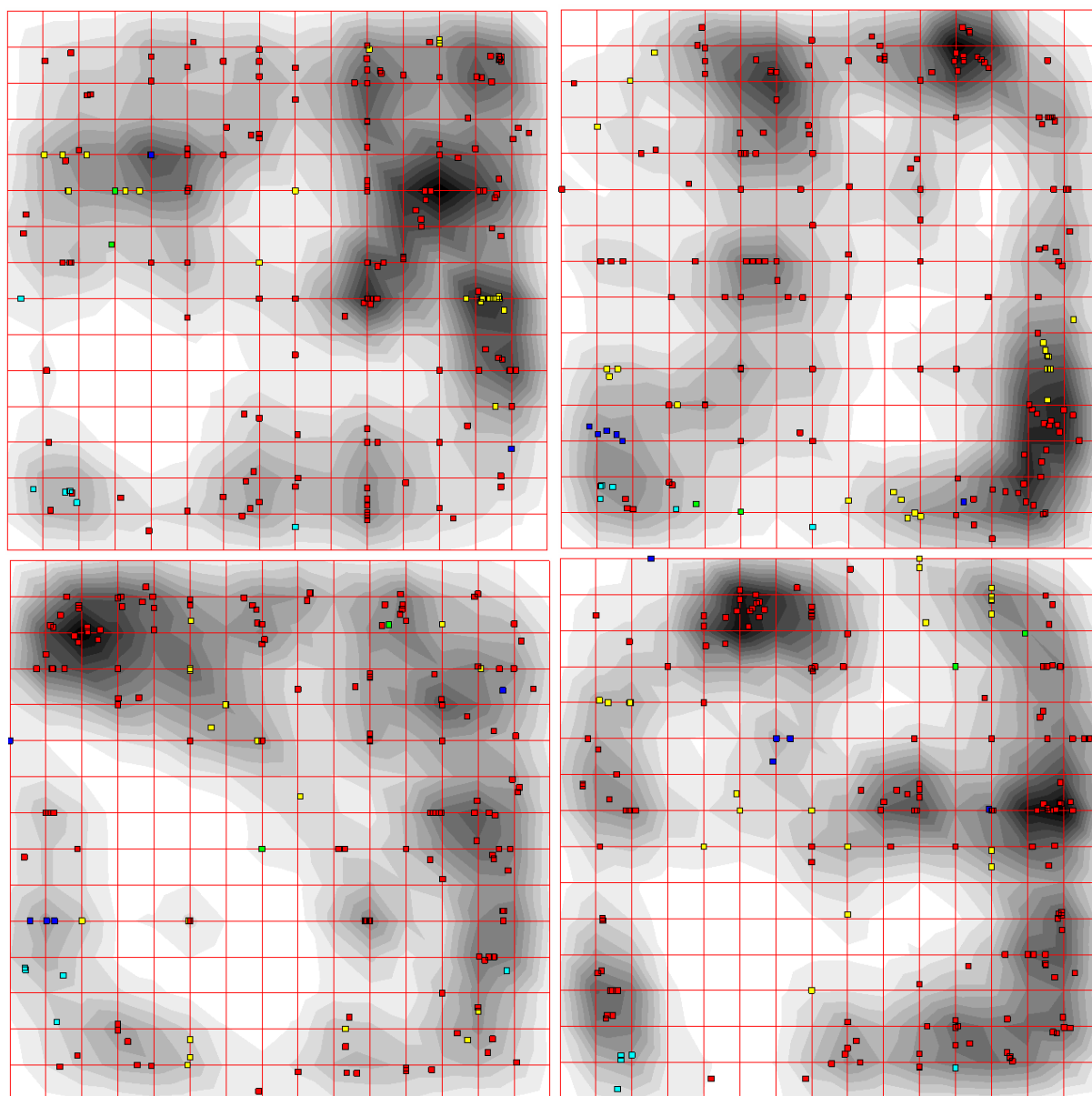


Рис. 3. Распределение различных отделов по упругой карте, построенной только по частотам триплетов (словари W_3 и $\bar{W}_3$ слева и справа, соответственно) для гена *atp8* (сверху) и гена *atp9* (снизу).

Анализ данных, представленных на Рисунках 2 и 3, показывает, что для случая кластеризации по частотам триплетов, определяемых только для одного гена — вне зависимости от того, какой ген из трёх в семействе используется — распределение на уровне отделов весьма близко к равномерному. Здесь существенное влияние может оказывать тот факт, что в целом использованная в настоящей работе база весьма сильно смещена: два отдела в ней представлены очень обильно, а остальные — на порядок (и

даже больше) меньше. Такое смещение может приводить к различным эффектам, среди которых может быть и сильное перемешивание сверхпредставленных объектов по другим классам (кластерам), в которые бы они не попали в случае нормальной базы.

Тем не менее, сравнительный анализ кластеров, показанных на Рисунке 1 и на Рисунках 2 и 3 показывает, что если для случая анализа по ансамблю генов всех трёх видов (*atp6*, *atp8* и *atp9*) выделившиеся по локальной плотности кластеры чётко ассоциированы с видом конкретного гена, то для случая одного гена выделяется большее число кластеров. Несмотря на то, что эти кластеры (см. Рисунки 1 – 3) не имеют чётко выраженной связи с отделом, возможно, они имеют более выраженную связь с таксонами более низкого уровня. Если такое случится, это будет первым результатом, противоречащим тем, которые были обнаружены ранее [4, 6]. Однако эта проверка выходит за рамки настоящей статьи.

Список литературы

1. Садовский М.Г., Сенашова М.Ю., Малышев А.В. Восьмикластерная структура геномов хлоропластов наземных растений // ЖОБ. 2018, т.79(2), С.124 – 134.
2. Садовский М.Г., Сенашова М.Ю., Малышев А.В. Chloroplast Genomes Exhibit Eight-Cluster Structuredness and Mirror Symmetry // LNBI, vol.10813, 2018, pp.186 – 196.
3. Садовский М.Г., Сенашова М.Ю., Путинцева Ю.А. Eight Clusters, Synchrony of Evolution and Unique Symmetry in Chloroplast Genomes: The Offering from Triplets. В: Chloroplasts and Cytoplasm: Structure and Functions (ser. Cell Biology Research Progress), Eds. Carl Dejesus and Lourdes Trask, 2018, Nova Science Publishers, Inc., N.-Y., pp.25 – 95.
4. Садовский М.Г., Путинцева Ю.А., Чернышова А.И., Федотова В.С. Genome structure of organelles strongly relates to taxonomy of bearers // LNBI, vol.9043, Part II, 2015, pp.481 – 490.
5. Фукунага К. Введение в статистическую теорию распознавания образов. М.: Наука, 1979. — 368 с.
6. M.G.Sadovsky, Yu.A.Putintseva, T.O.Shpagina, V.D.Fedotovskaya, A.I.Kolesnikova Function vs. taxonomy: the case of fungi mitochondria ATPsynthase genes // LNBI, vol.11465, 2019, pp.335 – 345.
7. Садовский М.Г., Колесникова А.И., Шпагина Т.О., Федотовская В.Д. Влияние функциональных различий сильнее влияния таксономических различий для генов семейства *atp* митохондрий грибов // «Моделирование неравновесных систем», Материалы XX Всерос. семинара, 5 – 7 октября 2018 г., Красноярск, 2018, с.49 – 54.
8. Gorban, A.N., Zinovyev, A.Yu. Fast and user-friendly non-linear principal manifold learning by method of elastic maps // 2015 IEEE International Conference on Data Science and Advanced Analytics, Campus des Cordeliers, Paris, France, October 19 – 21, 2015, с.1 – 9, 2015.
9. Колесникова А.И., Шпагина Т.О., Федотовская В.Д., Садовский М.Г. Влияние функциональных различий сильнее влияния таксономических различий для генов семейства *atp* митохондрий грибов // «Моделирование неравновесных систем», Материалы XX Всерос. семинара, 5 – 7 октября 2018 г., Красноярск, 2018, с.49 – 54.

ВЗАИМОСВЯЗЬ МЕЖДУ ЗЛОКАЧЕСТВЕННОЙ И ДОБРОКАЧЕСТВЕННОЙ ПАТОЛОГИЕЙ И ПОКАЗАТЕЛЯМИ РАЗВЕРНУТОГО АНАЛИЗА КРОВИ

А.А.Феллер¹, Е.А. Мартынова¹, Д.В. Черняев², Р.А. Зуков^{1,2}, Э.В. Семенов²
Е.В. Слепов², М.Г. Садовский^{1,3}

¹Красноярский государственный медицинский
университет им. В.Ф.Войно-Ясенецкого Минздрава РФ

²КГБУЗ «Красноярский краевой клинический онкологический
диспансер имени А.И. Крыжановского»

³Институт вычислительного моделирования СО РАН, msad@icm.krasn.ru

Введение

Злокачественные новообразования являются одним из ведущих факторов смертности в мире. Существенное и качественно сильное развитие методов диагностики, лечения и профилактики этих заболеваний до сих пор не решило проблемы; напротив, и практикующие медики, и учёные находят всё новые и новые виды раковых опухолей [1]. Несмотря на все достижения молекулярной и клеточной биологии, полученные в этой области, всё ещё не до конца использованными являются данные классических, традиционных анализов и медицинских обследований. Здесь важным подходом к указанной проблеме является анализ и выявление связей в слабоструктурированных многомерных базах данных, содержащих ту или иную информацию о таких больных.

Ведущей идеей здесь является поиск и выделение неоднородностей в этих базах, а не проверка раннее сформулированных гипотез. Суть подхода состоит в следующем: сперва выявить неоднородности в распределении точек (пациентов, в нашем случае) в пространстве данных, а затем проверить то, насколько эти выявленные неоднородности (элементы внутренней структурированности) связаны с различными показателями, характеризующими вид опухоли, течение болезни и/или состояние пациента. Выяснилось, что такие связи могут быть обнаружены и в такой казалось бы хорошо изученной сфере, как данные развёрнутого анализа крови, полученные стандартизованными методиками и доступные в любом лечебно-профилактическом учреждении и являющимися обязательными при госпитализации любого больного.

В настоящей работе исследовалась клиническая база данных, содержащая результаты определения развёрнутого анализа крови у пациентов КГБУЗ КККОД. Для работы была подготовлена индексированная база, в которой не было лакун и ошибок в записях. В исходной базе данных было представлено 972 пациента, каждый из которых характеризовался 47 полями: 7 полей характеризуют пациента по социально-демографическим показателям, а также содержат указание на диагноз (с комментариями) и указание на наличие сопутствующих заболеваний. В остальных полях содержатся данные по развёрнутому анализу крови. База содержит два типа одинаковых данных по этому анализу: полученные автоматически (с помощью анализатора Act 5 diff анализатора, 27 показателей) и вручную (13 показателей). На автоматическом анализаторе снимались следующие показатели: относительное количество базофилов (BAS%), эозинофилов (EOS%), нейтрофилов (NEUT%), моноцитов (MON%), лимфоцитов (LYM%), иммуноглобулинов (IG%), ретикулоцитов (RET%); уровень гемоглобина (HGB) и гематокрит (HCT); средний объём эритроцита (MCV); среднее содержание гемоглобина в эритроците (MCH); средняя концентрация гемоглобина в эритроците (MCHC); ширина распределения эритроцитов по форме (RDW-SD); ширина распределения эритроцитов по объёму (RDW-CV); абсолютное количество эритроцитов (RBC), тромбоцитов (PLT), лейкоцитов (WBC), ретикулоцитов (RET); тромбокрит (PCT); средний объём тромбоцитов (MPV); фракция ретикулоцитов высокой

флюоресценции (HFR); фракция незрелых ретикулоцитов (IRF); фракция ретикулоцитов низкой флюоресценции (LFR); фракция ретикулоцитов средней флюоресценции (MFR); коэффициент больших тромбоцитов (P-LCR); индекс распределения тромбоцитов (PDW); эквивалент гемоглобина в эритроцитах (RET-He). Окончательно база, использовавшаяся в анализе, содержала записи о 876 пациентах, каждый из которых характеризовался 24 полями. Для каждого больного в модифицированную базу включались следующие показатели развернутого анализа крови: относительное количество базофилов (BAS%), эозинофилов (EOS%), нейтрофилов (NEUT%), моноцитов (MON%), лимфоцитов (LYM%), иммуноглобулинов (IG%); гематокрит (HCT) и уровень гемоглобина (HGB); среднее содержание гемоглобина в эритроците (MCH); средняя концентрация гемоглобина в эритроците (MCHC); средний объем эритроцита (MCV); средний объем тромбоцитов (MPV); коэффициент больших тромбоцитов (PLCR); тромбокрит (PCT); индекс распределения тромбоцитов (PDW); абсолютное количество тромбоцитов (PLT), эритроцитов (RBC), лейкоцитов (WBC); ширина распределения эритроцитов по объему (RD-WCV); ширина распределения эритроцитов по форме RD-WSD; скорость оседания эритроцитов (СОЭ). Кроме того, каждый больной характеризовался набором из трёх атрибутивных полей: возраст, пол и диагноз заболевания в кодировке МКБ-10.

Целью исследования являлось выявление и описание связи между показателями развернутого анализа крови, полученного у больных различными видами рака, за исключением больных с онкологией системы крови, и нозологией онкологического заболевания. Для выявления такой связи проводился анализ равномерности и однородности распределения больных по показателям развернутого анализа крови. Каждый больной был представлен точкой в 21-мерном пространстве метрических данных. Центральный вопрос исследования заключался в том, насколько структурировано распределены в этом пространстве больные. Иными словами, можно ли выявить группы больных, формирующих плотные кластеры в указанном пространстве, и только по этим данным: не используя никакой информации о виде заболевания, возрасте и поле больного. Затем проверялось, насколько выделенные кластеры однородны: верно ли, что эти кластеры содержат в основном больных, характеризующих близостью каких-либо показателей, в том числе и атрибутивных. Иначе говоря, попадают ли пациенты с одним и тем же заболеванием либо одним и тем же иным атрибутивным показателем, в один кластер. Изучался и двойственный вопрос: насколько разные кластеры содержат пациентов с одинаковыми атрибутивными показателями.

Анализу связи результатов развернутого анализа крови с различными типами ЗНО посвящён ряд публикаций. В работе [4] показано, что развернутый анализ крови является эффективным показателем особенностей течения болезни и эффектов лечения у больных раком молочной железы и толстой кишки для случаев весьма специального вида лечения: интраоперационной химиотерапии на аутосредах организма. Работа [3] посвящена выявлению связи между различными диагностическими показателями, включая данные развернутого анализа крови и особенностями течения рака яичников. Показано, что существует возможность уточнения раннего диагноза этого заболевания, а также прогноза его течения, по этим показателям. В работе [5] изучены связи клинического, биохимического и иммунологического анализа крови у больных с раком молочной железы. При этом отсутствие существенных внутригрупповых разбросов изученных показателей свидетельствует о сохранении стабильных процессов метаболизма и общей устойчивости организма обследованных пациенток. Работа [1] посвящена дифференциальной диагностики карциноидных опухолей желудочно-кишечного тракта в том числе с помощью показателей развернутого анализа крови.

Показано, что данные развернутого анализа крови могут быть эффективно использованы для дифференциальной диагностики определенного вида раковых опухолей желудочно-кишечного тракта. Работа [6] посвящена изучению параметров дооперационного развернутого анализа крови как прогностического маркера оценки вероятности метастазирования в лимфатических узлах при карциноме эндометрия. Пациенты, прошедшие полное хирургическое лечение, надёжно могут быть классифицированы на группу риска по метастазированию в лимфатических узлах и тех, для которых вероятность такого метастазирования минимальна. Эта кластеризация проводилась на основе линейного логистического регрессионного анализа, который выявил независимую связь между увеличением количества нейтрофилов и поражением лимфатических узлов. Эту тему продолжает работа [10], в которой проведена оценка вероятности возникновения рака эндометрия на основе данных развернутого анализа крови. Для диагностики были использованы биомаркеры, связанные с воспалительным процессом и показатели развернутого анализа крови. Показано, что средние показатели распределения эритроцитов по объёму и ширине являются биомаркерами, которые можно использовать в качестве прогностического маркера у пациентов с раком эндометрия и которые являются дешевыми, воспроизводимыми и легко доступными из полных панелей анализа крови, а также перспективным методом исследования в любом ЛПУ.

Работа [8] посвящена выявлению пациентов с такими показателями развернутого анализа крови, которые указывают на большую вероятность колоректального рака, что позволяет направлять таких пациентов на ранее колоноскопическое обследование. Определенные показатели развернутого анализа крови надёжно указывают на то, что у пациента возможен колотеральный рак, который требует дополнительной диагностики. В основе данной работы лежит обработка многомерных данных методами машинного обучения, что совпадает с подходом, используемым в нашей работе. Работа [7] посвящена анализу корреляции между предоперационными показателями тромбоцитов и хирургических факторов у больных с раком шейки матки. В работе показано, что некоторые показатели развернутого анализа крови могут служить дополнительным инструментом для предоперационной диагностики рака шейки матки. Наконец, работой, полностью лежащей в русле нашего исследования, является статья [9], которая также посвящена изучению простых скрининговых методов диагностики миелолейкоза с использованием параметров развернутого анализа крови и его компонентов. Этот метод направлен на разработку более простого и доступного метода для скрининга хронического миелолейкоза. По показателям развернутого анализа крови было выявлено, что абсолютное количество базофилов эффективно для скрининга хронического миелолейкоза. Ключевой вопрос работы состоял в следующем: насколько точно можно предсказать результаты некоторых сложных и дорогостоящих обследований по данным развернутого анализа крови? В результате проведенного исследования показано, что для случаев миелолейкоза можно выявить такие надёжные связи, которые позволяют использовать данные развернутого анализа крови как надёжные предикторы развития заболевания.

Материалы и методы

Начальный этап работы заключался в проведении стандартного анализа данных. В программе «STATISTICA» каждая переменная в базе данных была проверена на нормальность распределения, при этом выявлено, что большинство переменных не являются нормально распределёнными. Кроме того, для каждой переменной были вычислены средние значения и их стандартные отклонения и построены гистограммы. После описательной статистики определялись коэффициенты корреляции между

значениями переменных. (Таблица 1). Этот анализ выявил сильную связь между некоторыми показателями. К ним относятся следующие пары: гематокрит-гемоглобин (0.96), среднее содержание гемоглобина в эритроците-средний объем эритроцита (0.91), количество лимфоцитов-количество нейтрофилов (0.96), средний объем тромбоцитов-коэффициент больших тромбоцитов (0.95), средний объем тромбоцитов-индекс распределения тромбоцитов (0.93), коэффициент больших тромбоцитов-индекс распределения тромбоцитов (0.94), тромбокрит-абсолютное количество тромбоцитов (0.96), ширина распределения эритроцитов по объёму-ширина распределения эритроцитов по форме (0.85). Для того, чтобы избавиться от линейных связей, из анализа исключался один из показателей в парах с высоким коэффициентом корреляции. Однако гемоглобин и гематокрит являются важными показателями в развёрнутом анализе крови, поэтому данные по их значениям были сохранены для дальнейшего анализа. Таким образом, были исключены: среднее содержание гемоглобина в эритроците (MCH), количество нейтрофилов (NEUT), средний объем тромбоцитов (MPV), индекс распределения тромбоцитов (PDW), коэффициент больших тромбоцитов (PLCR), количество тромбоцитов (PLT), ширина распределения эритроцитов по форме (RD-WSD). Для дальнейшего анализа использовались 14 показателей.

На следующем этапе работы проводился кластерный анализ. В настоящем исследовании использовались: метод динамических ядер (*k*-means) и метод упругих карт. Они рассматриваются как два основных метода кластеризации: линейный и нелинейный. Метод динамических ядер был использован в качестве линейного метода кластеризации без учителя. Метод динамических ядер достаточно хорошо известен, реализован во многих пакетах прикладных программ, его особенности хорошо изучены и описаны. Выбор метода классификации без учителя обосновывается сложностью исходных данных. Методом упругих карт, в свою очередь, проводилась нелинейная кластеризация (и визуализация многомерных данных).

Метод упругих карт — это метод приближения многомерных данных двумерными поверхностями, данные приближаются двумерным квадратом, который деформируется так, чтобы максимально точно пройти сквозь данные. Упругая карта служит для нелинейного сокращения размерности данных. В многомерном пространстве данных располагается поверхность, которая приближает имеющиеся точки данных и при этом является, по возможности, не слишком изогнутой. Данные проецируются на эту поверхность и потом могут отображаться на ней, как на карте. Её можно представлять себе, как упругую пластину, погруженную в пространство данных и прикрепленную к точкам данных пружинками.

С помощью свободно распространяемого ПО VidaExpert была сделана кластеризация по данным (деление каждого показателя на кластеры), как методом динамических ядер, так и с помощью упругой карты.

Результаты

Анализ распределения больных в изучаемой базе методом динамических ядер не выделил никакой структуры: выделяемые классы для различного числа классов отличались сильной неустойчивостью. В связи с этим был использован метод упругих карт. На Рисунке 1 показана кластерная структура, выделяемая в исследованной базе данных методом упругих карт. Хорошо видно, что на карте выделяется три или четыре — в зависимости от принятого уровня детализации описания — кластера.

Таблица 1

Значения корреляций между показателями развёрнутого анализа крови

ерем.	озр	AS%	OS%	CT	GB	G%	YM%	CH	CHC	CV	ON%	PV	EUT%	-LCR	CT	DW	LT	BC	DW- CV	DW- SD	BC	ОЭ
озр	,0000	,0576	,0976	,0043	0,0091	,0338	,1237	,0442	,0576	,0910	,0235	,0241	,1087	,0641	,0579	,0749	,0738	,0599	,0881	,1215	,1105	,0290
AS%	,0576	,0000	,1113	,0638	,0323	,0329	,0250	0,0347	,0573	,0215	,0301	0,0401	,0379	,0503	0,0010	,0187	,0260	,0085	0,0324	0,0216	,0268	,0263
OS%	,0976	,1113	,0000	,0821	,0687	,0105	,1103	,0607	,0544	,1271	,0338	,0230	,0643	,0896	,0324	,0548	,0384	,0435	,0638	,0825	,0812	,0467
CT	,0043	,0638	,0821	,0000	,2044	,0349	,1609	,1007	,1015	,1168	,1040	,0500	,2077	,1426	,0482	,0851	,2053	,2098	,1378	,1210	,2449	,0405
GB	0,0091	,0323	,0687	,2044	,0000	0,0351	,0323	,0921	,0980	,1268	,0516	,1101	,0653	,1038	,0651	,0973	,0558	,1630	,1087	,0812	,0990	,0690
G%	,0338	,0329	,0105	,0349	0,0351	,0000	,0587	,0304	,0108	,0676	,0310	,0110	,0318	,0082	,0242	,0842	,0524	,0473	,0718	,0460	,0893	,0139
YM%	,1237	,0250	,1103	,1609	,0323	,0587	,0000	,0707	,1250	,1687	,1201	,0923	,3472	,2051	,0679	,0779	,2662	,2441	,1106	,1860	,3310	,0352
CH	,0442	0,0347	,0607	,1007	,0921	,0304	,0707	,0000	,0721	,2522	,0508	,0638	,0826	,0687	,0830	,0901	,1389	,1109	,1780	,1519	,0687	,0747
CHC	,0576	,0573	,0544	,1015	,0980	,0108	,1250	,0721	,0000	,1148	,0636	,0725	,0659	,0673	,0302	,0852	,0756	,1318	,1214	,1329	,1067	,0368
CV	,0910	,0215	,1271	,1168	,1268	,0676	,1687	,2522	,1148	,0000	,0412	,0550	,1369	,1612	,0750	,1535	,2611	,1705	,2081	,2232	,2193	,0903
ON%	,0235	,0301	,0338	,1040	,0516	,0310	,1201	,0508	,0636	,0412	,0000	,0120	,1513	,1436	,0505	,0718	,0943	,1356	,0775	,1087	,1651	,0649
PV	,0241	0,0401	,0230	,0500	,1101	,0110	,0923	,0638	,0725	,0550	,0120	,0000	,0033	,2206	,0522	,2448	,1235	,0738	,0582	,0493	,0471	0,0559
EUT%	,1087	,0379	,0643	,2077	,0653	,0318	,3472	,0826	,0659	,1369	,1513	,0033	,0000	,2236	,0625	,0461	,2534	,2462	,1165	,1524	,3886	,1136
-LCR	,0641	,0503	,0896	,1426	,1038	,0082	,2051	,0687	,0673	,1612	,1436	,2206	,2236	,0000	,0389	,2665	,2066	,2071	,1101	,0608	,2576	,0218
CT	,0579	0,0010	,0324	,0482	,0651	,0242	,0679	,0830	,0302	,0750	,0505	,0522	,0625	,0389	,0000	,0050	,2096	,0343	,0816	,1023	,1074	,1467
DW-PLT	,0749	,0187	,0548	,0851	,0973	,0842	,0779	,0901	,0852	,1535	,0718	,2448	,0461	,2665	,0050	,0000	,1315	,1169	,0754	,0274	,1302	0,0191
BC	,0738	,0260	,0384	,2053	,0558	,0524	,2662	,1389	,0756	,2611	,0943	,1235	,2534	,2066	,2096	,1315	,0000	,1551	,1696	,1589	,3517	,1040
DW-CV	,0599	,0085	,0435	,2098	,1630	,0473	,2441	,1109	,1318	,1705	,1356	,0738	,2462	,2071	,0343	,1169	,1551	,0000	,1268	,1511	,2514	,0278
DW-SD	,0881	0,0324	,0638	,1378	,1087	,0718	,1106	,1780	,1214	,2081	,0775	,0582	,1165	,1101	,0816	,0754	,1696	,1268	,0000	,2783	,1010	,1110
BC	,1215	0,0216	,0825	,1210	,0812	,0460	,1860	,1519	,1329	,2232	,1087	,0493	,1524	,0608	,1023	,0274	,1589	,1511	,2783	,0000	,1742	,0660
ОЭ	,1105	,0268	,0812	,2449	,0990	,0893	,3310	,0687	,1067	,2193	,1651	,0471	,3886	,2576	,1074	,1302	,3517	,2514	,1010	,1742	,0000	,1060

В отличие от метода упругих карт, кластеризация методом динамических ядер фактически не дала никакого результата: формально классы (при делении множества точек на 2 – 6 классов) выделялись, однако их выделение было весьма неустойчивым: различные реализации метода давали сильно различающиеся конфигурации распределения больных по классам. В связи с этим было принято решение не использовать в дальнейшем анализе методы линейной кластеризации.

Для целей анализа особенностей кластеризации было определено распределение опухолей разного типа по локализации в исследуемой базе данных; эти результаты представлены в Таблице 2.

Таблица 2

Распределение опухолей разного типа по локализации. 1 – злокачественные новообразования, 2 – доброкачественные новообразования, 3 – новообразования неопределённого характера

Локализация	1	2	3
губы, полости рта и глотки	33	0	3
органов пищеварения	120	15	30
органов дыхания и грудной клетки	63	2	15
костей и суставных хрящей	3	0	0
новообразования кожи	9	5	7
мезотелиальной и мягких тканей	11	3	3
молочной железы	165	1	11
женских и мужских половых органов	215	2	17
мочевыделительных путей	29	5	17
глаза, головного мозга и других отделов ЦНС	6	1	0
Щитовидной железы и других эндокринных желез	3	8	0
неточно обозначенных вторичных локализаций	23	2	7
лимфоидной, кроветворной и родственных им тканей	40	0	1

На следующем этапе проводилась проверка того, насколько неоднородна распределены больные с различными видами опухолей в выделенных кластерах. Для этого на упругих картах, отображающих распределение больных по кластерам, делалась разметка в соответствии с видом опухолей. Оказалось, что распределения по видам опухоли не имеет никакой корреляции с выделяемыми кластерами: все кластеры содержали больных с разными типами опухолей в пропорциях, близких к средним по базе. Кроме этого, изучалось распределение локализаций опухолей по выделенным кластерам. Если для видов опухолей использовалась только три метки — для доброкачественных, злокачественных, и неопределенного типа опухолей, то типов локализации выделялось значительно больше. Таблица 1 содержит данные по распределению опухолей разного типа по их локализации.

Построенная карта использовалась для выявления связи между кластерами и атрибутивными характеристиками больных. Для этого на построенной упругой карте выделялись цветом точки, у которых атрибутивные признаки попадали в требуемый интервал. На Рисунке 2 представлены распределения больных с различными уровнями гематокрита (Рис.2а) и тромбоцита (Рис.2б).

На Рисунке 2а показано распределение больных с пониженным (голубые точки), нормальным (красные треугольники) и повышенным (тёмно-синие ромбы) уровнем гематокрита. Хорошо видно, что распределение больных, различающихся по этому

показателю, весьма неравномерно: больные с противоположными (но ненормальными) значениями гематокрита сосредоточены в различных частях упругой карты. Несмотря на то, что больные с ненормальными значениями гематокрита не образуют отдельных кластеров, выявляемых по локальной плотности, они, тем не менее, сгруппированы в компактные группы, чётко отличимые одна от другой. Похожая картина наблюдается и для распределения больных по значениям тромбокрита: на Рисунке 2б голубыми ромбами показаны больные, характеризующиеся значениями тромбокрита от нормального и ниже. Иными словами, у подавляющего большинства больных тромбоциты выше нормы. Тот факт, что малая часть больных с нормальным и пониженным тромбоцитом занимает области на карте, удалённые от основного скопления больных с этим показателем, может быть обусловлено видом используемой упругой карты. Поясним сказанное: мы использовали прямоугольную карту; при использовании сферической карты голубые точки распределились в одной подобласти.

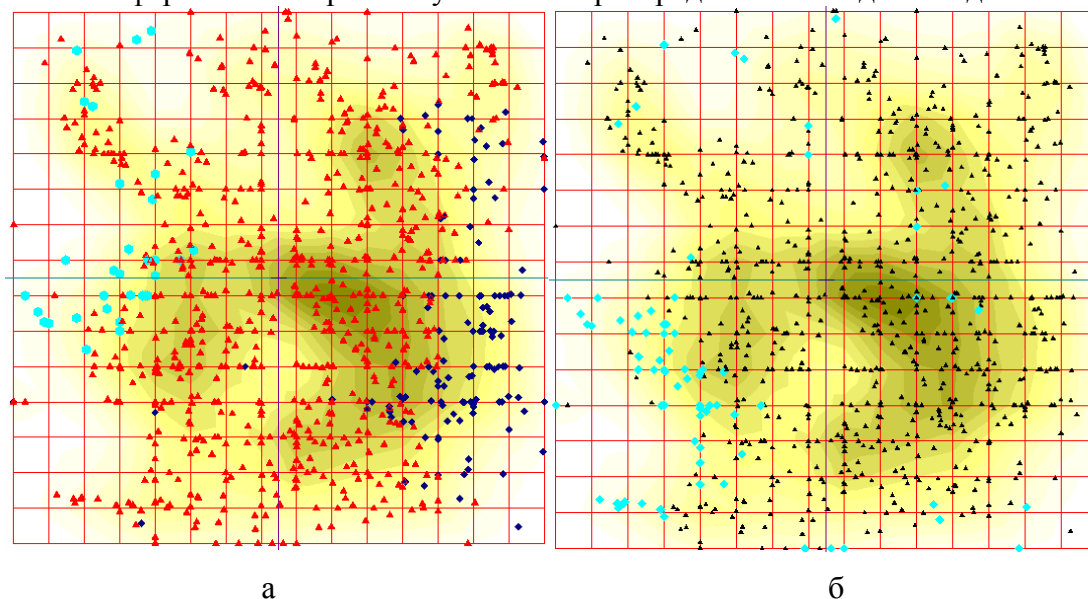


Рисунок 2. Распределение больных с различными уровнями гематокрита (Рис.2а) и тромбокрита (Рис.2б) на упругой карте (параметры карты те же, что и на Рис.1).

Мы проводили систематическое исследование особенностей группирования по каждому из показателей развёрнутого анализа крови. Было установлено, что для ряда показателей наблюдается чёткое группирование по уровням значений указанных показателей: выше нормы, норма и ниже нормы. Такими показателями являются базофилы, эозинофилы, гематокрит, гемоглобин, лимфоциты, тромбоциты и СОЭ; все остальные показатели не являются информативными с этой точки зрения: больные с различными уровнями этих показателей распределены по упругой карте почти равномерно. Тем самым, такие показатели не могут быть использованы для прогноза кластерной принадлежности больного.

На следующем этапе проверялось распределение пациентов по кластерам в зависимости от уровня того или иного показателя развёрнутого анализа крови. Для этого на построенной упругой карте последовательно выделялись цветом точки, у которых переменные попадали в требуемый интервал. Для каждой из переменных развёрнутого анализа крови определялся интервал значений (от минимального по базе до максимального), который разбивался на 10 равных частей. Затем последовательно на упругой карте выделялись точки, для которых значения этой переменной были не менее текущего порога — от минимального до максимального. Здесь было выявлено два типа

распределений больных по кластерам. Первый тип («звёздное небо») характеризуется почти случайным и равномерным распределением пациентов по упругой карте; такой тип распределения наблюдается для переменных BAS, EOS, WBC и IG. На Рисунке 3 показано такое распределение для эозинофилов. Хорошо видно, что рост уровня содержания эозинофилов ведёт к сравнительно равномерному заполнению упругой карты.

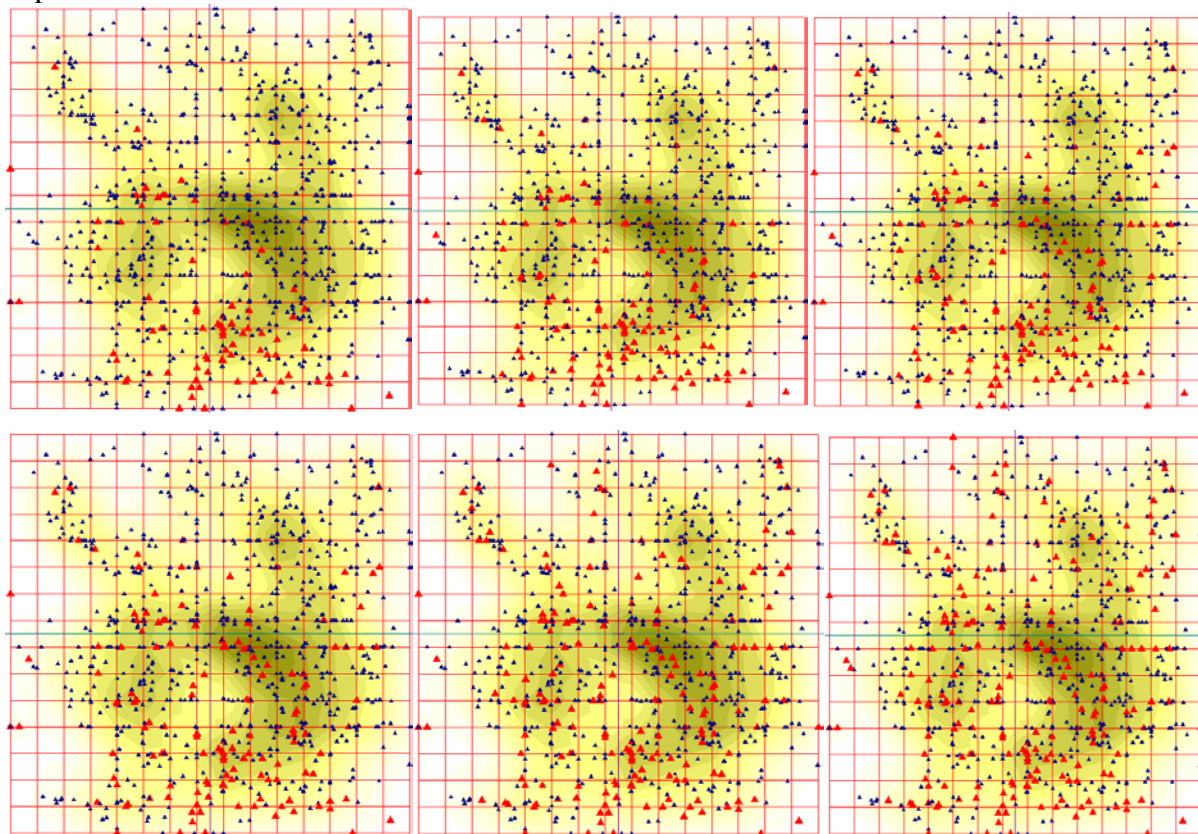


Рисунок 3. Представленность больных с различными уровнями эозинофилов (слева направо и сверху вниз): уровни 0,5, 1,0, 2,0, 2,5, 4,0 и 9,9, соответственно.

Для второго типа распределений («волна») характерно постепенное заполнение всего поля карты и представленных на ней кластеров. Иными словами, пациенты со всё возрастающими значениями определённых переменных развёрнутого анализа крови чётко выраженным образом заполняли сформировавшиеся кластеры. На Рисунке 3 представлены распределения больных с различными уровнями лимфоцитов.

Последовательность заполнения упругой карты пациентами со всё возрастающими значениями содержания лимфоцитов в крови (см. подписи к Рисунку 3), показанная на этом Рисунке, выглядит как постепенное, с выраженным фронтом, заполнение карты от одного края к другому. Это однозначно свидетельствует, что больные с ЗНО структурированы по значениям содержания лимфоцитов в крови, в том числе, и в пределах нормы. Анализ соответствующих заполнений, получаемых по другим показателям (не показаны здесь в виду ограниченность объёма статьи) показывает, что разные показатели имеют различный характер заполнения; в частности, все они «стартуют» с различных частей упругой карты. Такой характер заполнения упругой карты пациентами, отличающимися значением соответствующих показателей развёрнутого анализа крови, свидетельствует о том, что эти показатели являются независимыми. Более того, такое заполнение упругой карты с разных начальных положений для различных показателей развёрнутого анализа крови явным образом

свидетельствует о том, что при развитии раковых патологий проявляется действие принципа Либиха. Этот принцип в неформальном представлении утверждает, что в условиях стресса у какой-либо системы (и организм человека здесь не исключение) все ресурсы начинают согласованно направляться по одному каналу (направлению). Тот факт, что карты начинают заполняться с разных сторон, если строить заполнения для различных показателей развёрнутого анализа крови, свидетельствует о том, что такого рода концентрация и скоррелированность имеют место и для случая раковых заболеваний, которые, вне всякого сомнения, можно считать стрессовым состоянием организма.

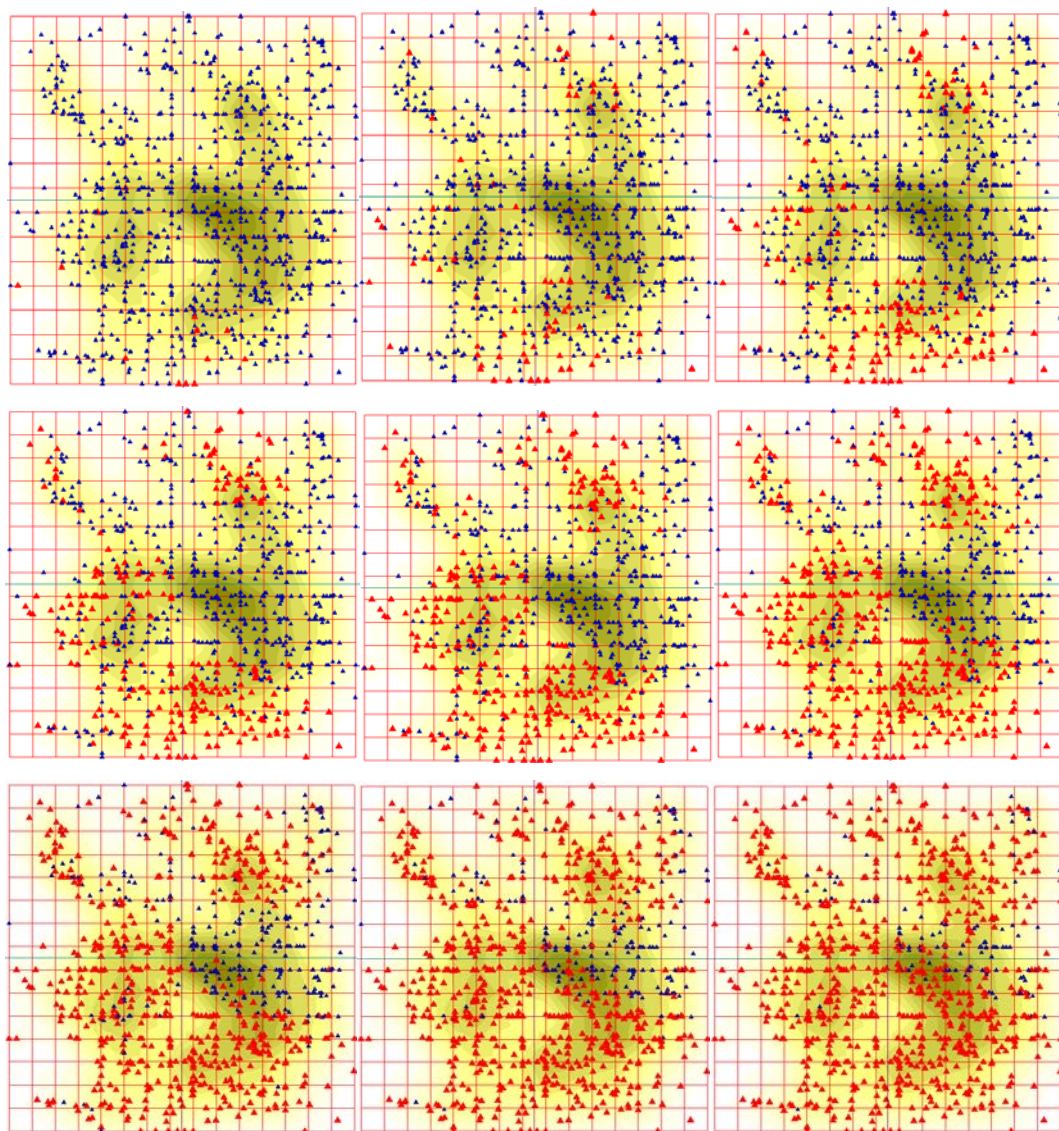


Рисунок 4. Представленность больных с различными уровнями лимфоцитов (слева направо и сверху вниз): уровни 12, 14, 18, 22, 26, 30, 34, 38 и 42, соответственно.

В заключение следует сказать, что развёрнутый анализ крови, несмотря на свою долгую историю и статус классического обследования при любых заболеваниях, всё ещё может нести много нового знания, которое не было доступно исследователям и практикующим врачам до создания инструментов нелинейного статистического анализа. Можно надеяться, что последовательное и систематическое исследование совместных распределений больных с различными уровнями показателей развёрнутого анализа

крови сможет принести много нового и неожиданного как для теоретической медицины, так и для клинической практики.

Список литературы

1. Бородин, Ю. И. Коррекция эндотоксикоза при некоторых онкологических заболеваниях / Ю. И. Бородин, М. С. Любарский, Ю. Э. Наров, В. В. Морозов, С. А. Фурсов // Бюллетень СО РАМН. – 2004. – №2. – С. 7-12.
2. Горбань, А. Н. Нейронные сети на персональном компьютере / А. Н. Горбань, Д. А. Россиев ; под общ. ред. В. И. Быков. – Новосибирск: Наука, 1996. – 276 с.
3. Долгова, Д. Р. Способ уточняющей диагностики прогрессирующих форм рака яичников / Д. Р. Долгова, Т. Н. Генинг, Т. В. Абакумова, И. И. Антонеева, А. А. Бутов, И. А. Корчагина, А. Ю. Тузеева, А. В. Фомина // Клиническая лабораторная диагностика. – 2015. – №10. – С. 68-96.
4. Орловская, Л. А. Интраоперационная химиотерапия на аутосредах организма в улучшении результатов комплексного лечения больных раком молочной железы и толстой кишки / Л. А. Орловская, Н. В. Солдаткина, Л. Э. Емельянова, В. Н. Касьяненко, М. Л. Малейко, Д. С. Петров, А. В. Дашков, В. Х. Анапалян, В. А. Донцов, Д. А. Харатегзов, И. В. Гончаров, М. Н. Гулева // Известия вузов. Северо-Кавказский регион. Сер. Естественные науки. – 2005. – №S10. – С. 68-74.
5. Саптарова, Л. М. Оценка некоторых показателей биохимического, клинического и иммунологического анализа крови у больных с раком молочной железы / Л. М. Саптарова, Э. Н. Когина, Ю. Н. Саптаров, Ш. Н. Галимов, О. А. Князева // Современные проблемы управления и регулирования, сборник научных статей. Пенза. – 2018. – С. 246-253.
6. Emre, E. T. Can preoperative complete blood count parameters be used as predictive markers for lymph node metastasis in endometrial carcinomas? / E. Emre, Ö. Eyyüp, F. Y. Ayşe // Cyprus J Med Sci.–2018. – № 3. – P. 168-172.
7. Emre, E. T. Is there any correlation between preoperative platelet indices and surgical prognostic factors in patients with cervical cancer? / E. T. Emre, F. Y. Gülin, L. K. Hüseyin, A. K. Edip, F. Y. Ayşe // Cyprus Journal of Medical Sciences. –2019. – № 1. – P.38-42.
8. Hornbrook, M. C. Early colorectal cancer detected by machine learning model using gender, age, and complete blood count data. / M. C. Hornbrook, R. Goshen, E. Choman, M. O'Keeffe-Rosetti, Y. Kinar. // Dig Dis Sci. – 2017. – №62. – P. 2719-2727.
9. Ogasawara, A. A simple screening method for the diagnosis of chronic myeloid leukemia using the parameters of a complete blood count and differentials / A. Ogasawara, H. Matsushita, Y. Tanaka, Y. Shirasugi, K. Ando, S. Asai, H. Miyachi // Clinica Chimica Acta. –2019. – № 489. – P. 249 -253.
10. Yayla, A. C. Evaluation of complete blood count parameters to predict endometrial cancer / C. Yayla, E. E. Bostanc, E. Cogendez, C. Kilicci, F. Uzun // Innovative Endocrinology of Cancer. – 2018. – №12. – P. 1-6.

МЕТОД АППАРАТНОЙ РЕАЛИЗАЦИИ РЕКУРРЕНТНЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

А.Г. Хантимиров, О.В. Непомнящий, Н.Ю. Сиротинина

Сибирский федеральный университет,

Институт космических и информационных технологий, каф. вычислительная техника

В настоящее время наблюдается значительный интерес и технологический рост в области проектирования и применения нейронных сетей. Известно большое количество программных реализаций различных моделей нейронных сетей. Этот подход имеет свои преимущества, однако для многих реальных задач не может быть применен, т.к. не обеспечивает достаточного быстродействия и требует большой вычислительной мощности. В связи с этим ведется активная разработка аппаратной реализации нейронных сетей в виде специализированных микросхем.

Большинство известных аппаратных реализаций имеют архитектуру многослойного перцептрона. Данная модель нейронных сетей эффективно используется для решения задач классификации, распознавания образов и т.д. [1]. Однако в многослойных нейронных сетях отсутствует память о предыдущих состояниях, что ограничивает использование такой архитектуры в ряде задач, в частности, для управления динамическими системами. В этих случаях наилучшими представляются рекуррентные архитектуры, обладающие динамической памятью [2], причем, учитывая жесткие ограничения на время реакции и объем аппаратуры, для контуров управления актуальной является их аппаратная реализация. К достоинствам аппаратной реализации рекуррентных нейронных сетей можно отнести высокий параллелизм вычислений, меньшее энергопотребление, что делает возможным размещение встраиваемых нейронных модулей управления непосредственно вместе с объектом управления. В то же время, традиционная модель рекуррентных нейронных сетей имеет сложные алгоритмы обучения и требует больших объемов памяти для хранения весов. С целью упрощения алгоритмов функционирования и их адаптации к аппаратной реализации были созданы такие модели, как сети эхо-состояний, модель неустойчивых состояний и пр. [3]. В данной статье рассматриваются вопросы аппаратной реализации модели на основе многомерных вычислений [4].

Традиционные сети эхо-состояний

На рисунке 1 изображена архитектура традиционной сети эхо-состояний, включающая в себя три слоя нейронов. Входной слой из K нейронов содержит текущее значение входного сигнала, обозначенного $u(n)$. Выходной слой, содержащий L нейронов, производит выходное значение сети, обозначенное $y(n)$, в течение операционной фазы. Скрытый слой сети с N нейронами называется резервуаром, его состояние в момент времени n обозначается как $x(n)$.

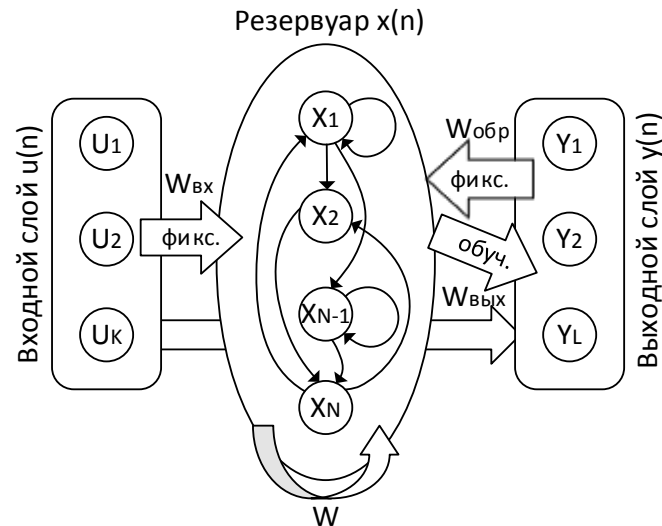


Рис.1. Архитектура традиционной сети эхо-состояний.

В случае традиционной сети эхо-состояний, внутренние синаптические связи описываются четырьмя матрицами: входных весов $W^{вх}$, весов резервуара W , обратной связи $W^{обр}$ и выходных весов $W^{вых}$. Все матрицы, кроме $W^{вых}$, задаются случайно при создании сети и остаются неизменными на всем протяжении ее работы. Обучению подвергается только матрица $W^{вых}$. Благодаря такой архитектуре задача обучения рекуррентной нейронной сети сводится к задаче линейной регрессии.

Не существует жестких ограничений для генерации проецирующих матриц $W^{вх}$ и $W^{обр}$. Обычно они задаются случайно с нормальным или равномерным распределением. Матрица соединений резервуара, тем не менее, имеет ограничения согласно свойства эхо-состояния. Это свойство достигается, когда спектральный радиус матрицы W меньше либо равен единице. Например, W может быть сгенерирована при помощи нормального распределения и нормализована по ее максимальному собственному значению. В данной работе будет использоваться ортогональная матрица для описания соединений резервуара; такая матрица создана применением QR-разложения к случайной матрице, сгенерированной при помощи стандартного нормального распределения. Матрица W также может быть масштабирована параметром обратной связи, используемым в уравнении (1).

Обновление резервуара сети в момент времени n описывается следующим уравнением:

$$x(n) = \tanh(\rho W x(n-1) + \beta W^{вх} u(n) + \beta W^{обр} y(n-1)), \quad (1)$$

где β и ρ обозначают коэффициент проекции и параметр обратной связи, соответственно.

Предполагается, что спектральный радиус матрицы соединений резервуара W равен единице. В качестве функции активации нейронов резервуара выбран гиперболический тангенс. Нелинейность функции активации предотвращает сеть от вырождения ограничением области возможных значений от -1 до 1. Функция выходного слоя вычисляется как:

$$\hat{y}(n) = g(W^{вых} [x(n); u(n)]), \quad (2)$$

где точка с запятой обозначает конкатенацию двух векторов и $g(\cdot)$ обозначает функцию активации выходных нейронов. Эта функция может быть линейной, или вида «победитель получает все».

Целочисленные сети эхо-состояний

Целочисленные сети эхо-состояний представляют собой архитектуру рекуррентных нейронных сетей эхо-состояний, реализованных на основе парадигмы многомерных вычислений. Такой подход к реализации рекуррентных сетей предполагает собой возможность эффективной аппаратной реализации.

В многомерных вычислениях каждый операнд представляется в виде случайных векторов очень большой размерности – тысячи бит. Информация используется в распределенном представлении, в котором отдельно взятые биты не могут быть четко интерпретированы. Вычисления с распределенным представлением используют статистические свойства векторных пространств с большой размерностью, что позволяет проводить приближительные высокопараллельные вычисления, устойчивые к ошибкам в отдельных битах.

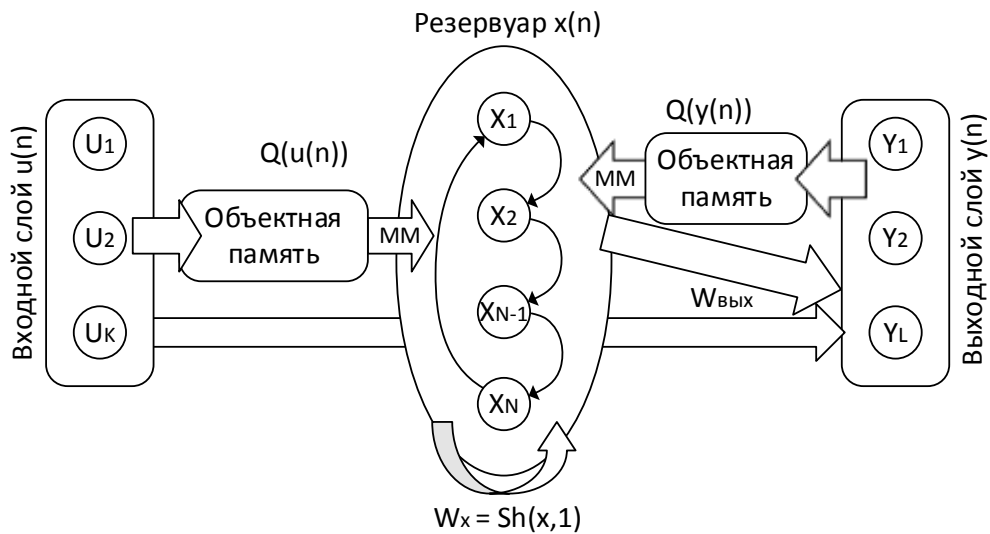


Рис.2. Архитектура целочисленной сети эхо-состояний.

Архитектура целочисленной сети эхо-состояний изображена на рисунке 2. Такая сеть схожа по структуре с традиционной сетью эхо-состояний (см. рисунок 1) с тремя слоями нейронов: входным $u(n)$ содержащим K нейронов, выходным $y(n)$, содержащим L нейронов, и резервуаром $x(n)$ из N . Обучение считывающей матрицы $W^{вых}$ для целочисленной сети аналогично обучению выходной матрицы традиционной сети эхо-состояний.

Остальные компоненты целочисленной сети отличаются от традиционной сети эхо-состояний. Во-первых, активации входного и выходного слоев проецируются на резервуар в форме многомерных биполярных векторов [5] размера N , обозначенных, как $u^{MM}(n)$ и $y^{MM}(n)$. Для задач, где входные и выходные данные описаны конечным алфавитом, при условии, что каждый символ может быть интерпретирован независимо, отображение N -мерного пространства достигается простым присвоением случайного многомерного биполярного вектора каждому символу в алфавите и хранению их в объектной памяти [4]. В случае непрерывных данных (например, действительных чисел), производится квантование непрерывных данных и их преобразование в конечный алфавит. Способ и точность квантования зависят от решаемой задачи. Если существует потребность в сохранении схожести между уровнями квантования, применяются схемы сохранения расстояния [6, 7], которые позволяют сохранить линейную или нелинейную

схожесть между уровнями. Непрерывные значения также могут быть представлены в виде многомерных векторов варьированием их плотности распределения.

Другой особенностью целочисленной сети эхо-состояний является способ создания рекуррентности в резервуаре. Вместо вычислительно сложной операции перемножения матриц, это свойство реализовано при помощи перестановок вектора резервуара. Перестановки вектора могут быть описаны в матричной форме, совпадающей по функциональному назначению с матрицей W традиционной сети эхо-состояний (рисунок 1). Одним из основных условий задания такой матрицы является равенство ее спектрального радиуса единице. Тем не менее, эффективная реализация перестановки может быть достигнута циклическим сдвигом, отмеченным как $Sh(\cdot)$. На рисунке 2 обозначены рекуррентные соединения нейронов в резервуаре с рекуррентностью посредством циклического сдвига на одну позицию. В таком случае, векторно-матричное перемножение $Wx(n)$ обозначается как $Sh(x(n), 1)$.

В качестве нелинейности функции активации резервуара целочисленная сеть эхо-состояний использует ограничение (3). С точки зрения реализации, целесообразно хранить значения элементов многомерного вектора в ограниченном диапазоне, используя пороговое значение (отмеченное как k):

$$f_k(x) = \begin{cases} -k, & x \leq -k \\ x, & -k < x < k \\ k, & x \geq k \end{cases} \quad (3)$$

В целочисленной сети эхо-состояний резервуар обновляется только целочисленными биполярными векторами и после ограничения, значения нейронов остаются целочисленными в диапазоне от $-k$ до k . Таким образом, каждый нейрон представлен с помощью $\log_2(2k+1)$ битов памяти. Например, если $k = 7$, существует 15 различных значений нейрона, хранящихся всего в 4 битах.

Подводя итог приведенных различий, обновление целочисленной сети эхо-состояний можно описать как:

$$x(n) = f_k(Sh(x(n-1), 1) + u^{MM}(n) + y^{MM}(n-1)). \quad (4)$$

Моделирование

Для экспериментальных исследований характеристик целочисленной сети эхо-состояний, разработаны программные модели традиционной и целочисленной сетей на языке Matlab. Задача эксперимента – выявить возможность сети запоминать входные значения и работать с временными последовательностями, сравнить надежность работы целочисленной и обычной рекуррентной нейронной сети, оценить возможность аппаратной реализации в базисе программируемых логических интегральных схем (ПЛИС).

В качестве тестовой задачи дача эксперимента на вход подавалась последовательность случайных символов конечного алфавита. Каждому символу соответствовал определенный многомерный вектор, состоящий из наборов 0 и 1, и заданный случайным образом при инициализации сети. Задача, решаемая сетью, сводилась к тому, чтобы определить какой символ поступил на вход сети определенное количество шагов тому назад. Количество символов, поданных на вход сети после символа, который «угадывается» на данном шаге, в данной статье называется задержкой. Таким образом, модель сети выполняет некоторую ретроспективу, угадывает, какой символ подавался на вход определенное количество шагов назад.

Результаты исследований приведены на рисунке 3.

Сравнивалась работа обычной и целочисленной рекуррентной нейронных сети, содержащих 1000 нейронов в резервуаре (рисунок 3А). Из графика видно, что до задержки в 9 операционных циклов обе сети идеально справляются с задачей, однако после происходит спад эффективности целочисленной сети.

Для оценки эффективности аппаратной реализации на базе ПЛИС так же моделировалась работа обычной и целочисленной рекуррентной нейронных сетей, количество нейронов в резервуаре в данном случае взято с учетом количества логических вентилях, занимаемых резервуаром. На графике (рисунок 3Б) видно, что целочисленная сеть эхо-состояний значительно превосходит традиционную в точности распознавания входного символа.

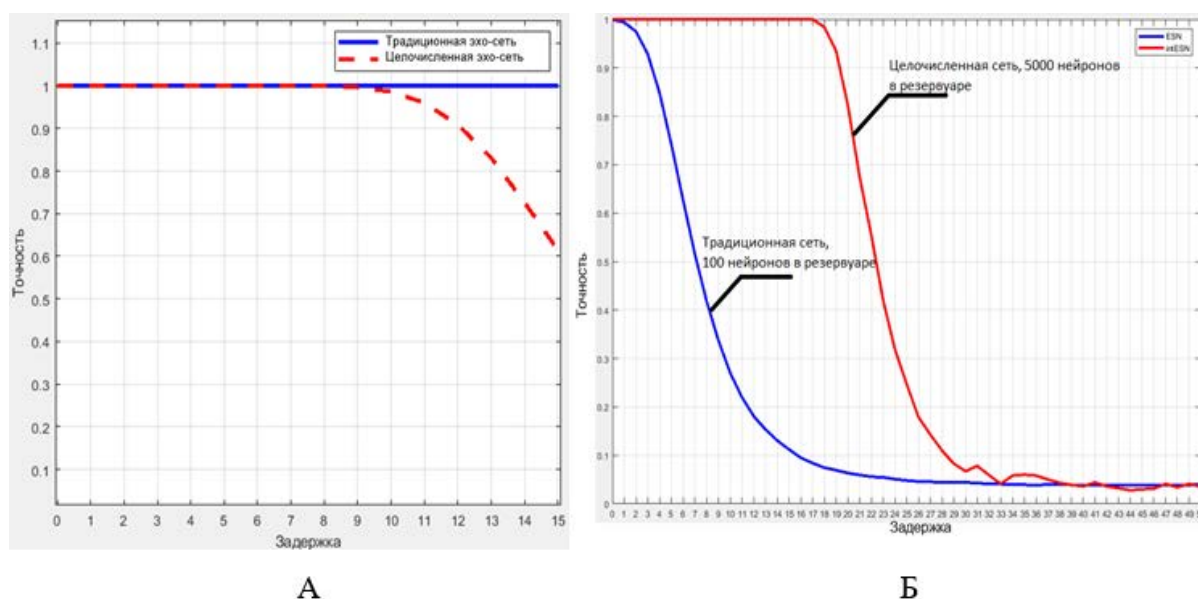


Рис.3. График зависимости точности определения входного символа от количества итераций задержки.

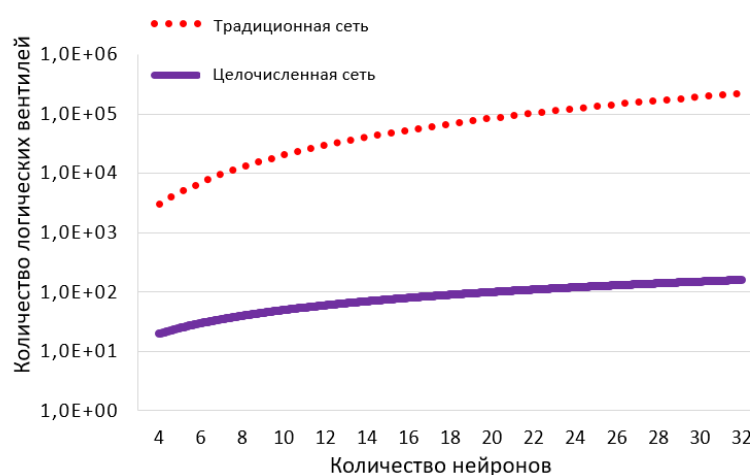


Рис.4. График зависимости количества логических вентилях, занимаемых резервуаром, от количества нейронов резервуара.

В связи с выгодной с точки зрения аппаратной реализации архитектурой целочисленной сети эхо-состояний, при одинаковых аппаратных затратах возможно разместить большее количество нейронов в резервуаре.

Для подтверждения данной теории, на языке описания аппаратуры VerilogHDL, для ПЛИС Cyclone IV, были описаны ПЛИС-проекты резервуаров традиционной и целочисленной сетей эхо-состояний. Согласно результатам синтеза, составлен график зависимости количества используемых логических вентилях от количества нейронов в резервуаре (рисунок 4). Как видно из графика, уже при небольшом количестве нейронов, резервуар целочисленной сети занимает на 2-3 порядка меньше логических вентилях.

Заключение

Согласно проведенному сравнительному анализу, подтверждена возможность эффективного использования модели целочисленной сети эхо-состояний в аппаратных приложениях. Возможный выигрыш по занимаемым аппаратным ресурсам резервуаром составляет 2-3 порядка уже при минимальном количестве нейронов резервуара, при этом, разница увеличивается при увеличении количества нейронов резервуара, в связи с нелинейным возрастанием аппаратных затрат традиционной сети эхо-состояний. Дальнейшей задачей является исследование эффективности аппаратной реализации целочисленной сети эхо-состояний на задачах управления объектом в динамической среде.

Список литературы

1. Jawandhiya, P. Hardware design for machine learning / P. Jawandhiya // International Journal of Artificial Intelligence and Applications. — 2018. — Vol.9. — №.1. P.63 – 84.
2. Lukosevicius, M. Reservoir computing approaches to recurrent neural network training / M. Lukosevicius, H. Jaeger // Computer Science Review. — 2009. — Vol. 3. — № 3. P. 127 – 149.
3. Maass, W. Real-Time Computing Without Stable States: A New Framework for Neural Computation Based on Perturbations / W. Maass, T. Natschlager, H. Markram // Neural computation. — 2002. — Vol. 14. — № 11. P. 2531 – 2560.
4. Kanerva, P. Hyperdimensional computing: An introduction to computing in distributed representation with high-dimensional random vectors // Cognitive Computation. — 2009. — Vol. 1. — № 2. P. 139 – 159.
5. Gallant, S. I. Positional binding with distributed representations / S.I. Gallant, P. Culliton // International Conference on Image, Vision and Computing (ICIVC). — 2016. — P. 108 – 113.
6. Widdows, D. Reasoning with vectors: A continuous model for fast robust inference / D. Widdows, T. Cohen // Logic Journal of the IGPL. — 2015. — Vol. 23. — № 2. P. 141 – 173.
7. Wang, H. Recurrent Neural Networks: Associative Memory and Optimization / H. Wang, Y. Wu, B. Zhang, K.L. Du // Information Technology & Software Engineering. — 2019. — Vol. 1. — № 2. P. 1 – 15.

БИБЛИОМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ИНИЦИАТИВНЫХ НАУЧНЫХ ПРОЕКТОВ ПО ОБЛАСТИ ЗНАНИЯ "ХИМИЯ И НАУКИ О МАТЕРИАЛАХ", ПОДДЕРЖАННЫХ РОССИЙСКИМ ФОНДОМ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Р.А. Чиженкова

Институт биофизики клетки РАН, *chizhenkova@mail.ru*

Введение

За последние десятилетия развилось четкое понимание значения фундаментальной науки для перспектив развития общества и человечества в целом [3, 6, 9, 12, 16, 17]. В связи с этим развитие науки вошло в ранг непосредственных государственных интересов, что привело к организации соответствующих Фондов [8, 10]. В 1992 г. по опыту других развитых стран для финансовой поддержки работы научных коллективов и отдельных ученых в РФ был создан Российский Фонд Фундаментальных Исследований (РФФИ) [1, 2, 4]. Материалы относительно 20-летнего юбилея РФФИ отражены в специальном выпуске журнала "Вестник РФФИ" [4]. Тем не менее, в открытых публикациях не был сделан анализ научных направлений проектов, поддержанных Фондом, что послужило причиной возникновения наших библиометрических исследований [13-17].

Основным видом деятельности РФФИ является проведение конкурса инициативных, т.е. непосредственно исследовательских, проектов. За 20 лет была оказала финансовая поддержка 58667 инициативным проектам [13, 16, 17]. Поддержанные проекты касались восьми областей знания.

Суммарные материалы результатов конкурсов инициативных научных проектов по восьми областям знания уже были опубликованы в наших работах [14 - 17]. Настоящие исследования посвящены библиометрическому рассмотрению проектов по области знания "Химия и науки о материалах", поддержанных РФФИ в течение 20-летнего периода.

Материалы и методы

Представленные здесь сведения основываются на данных, опубликованных в Информационных бюллетенях (ИБ) РФФИ, выходящих раз в год и освещающих итоги прошедшего конкурса, которые позволяют рассмотреть количественные данные его результатов по разным областям знания.

Для каждого года составлялась обширная таблица с материалами конкурса проектов по области знания "Химия и науки о материалах" относительно чисел выделенных грантов и поданных заявок. На основе этого вычислялась процентная вероятность поддержки проектов. Проводили объединение результатов по анализируемым рубрикам за весь временной период и вычисляли статистическую значимость различия величин, составляющих совокупности. Для статистического анализа использовали сравнение двух выборочных долей вариантов. Кроме того, применяли корреляционный анализ.

Результаты и обсуждение

Число поддержанных РФФИ инициативных проектов по области знания "Химия и науки о материалах" за 20 лет составляло 8145, что равняется 13.88% от общего числа по всем инициативным проектам - 58667. Динамика чисел соответствующих грантов за 20-летний период представлена в табл. 1.

Таблица 1

Динамика чисел поддержанных инициативных проектов по области знания «Химия » науки о материалах" в течении 20-летнего периода

Годы	Инициативные проекты			
	Химия	% от суммы	Все области знания	% от областей знания
1993	480	8,89	2845	16,87
1994	416	5,11	2856	14,57
1995	403	4,94	2674	15,07
1996	659	8,09	4742	13,90
1997	429	5,27	2637	16,27
1998	445	5,46	2971	14,98
1999	422	5,18	3132	13,47
2000	368	4,52	2809	13,10
2001	390	4,79	3058	12,75
2002	415	5,10	3046	13,62
2003	363	4,46	2612	13,90
2004	370	4,54	2543	14,55
2005	459	5,64	2936	15,63
2006	365	4,48	3022	12,08
2007	344	4,22	2610	13,18
2008	367	4,51	2947	12,45
2009	379	4,65	2801	13,53
2010	356	4,37	2738	13,00
2011	372	4,57	2922	12,73
2012	343	4,21	2766	12,40
Сумма	8145	100	58667	13,88
Среднее	407,25	5	2933,35	13,88

Выделенных грантов по области знания "Химия и науки о материалах" приходилось на один год от 343 до 659. В среднем их число равнялось 407.25. Табл. 1 показывает, что в первое десятилетие рассматриваемого периода числа поддержанных проектов были выше, чем во второе. Пиковое значение числа грантов имело место в 1996 г.. Кроме того, в начальные сроки 20-летнего периода отмечались существенные колебания чисел поддержанных проектов.

Число полученных заявок в ИБ указано только за годы 1996-2000 и 2002-2011, т.е. за 16 лет. За это время было получено 21764 заявок относительно инициативных проектов по области знания "Химия и науки о материалах", что составляет 14.49% от их общего числа - 150189. Динамика чисел поданных заявок по области знания "Химия и науки о материалах" за исследуемый период отражена в табл. 2.

Таблица 2

Динамика чисел поданных заявок по инициативным проектам в области знания "Химия и науки о материалах" в течение рассматриваемого периода.

Годы	Инициативные проекты			
	Химия	% от суммы	Все области знания	% от областей знания
1993				
1994				
1995				
1996	2511	11,54	15722	15,97
1997	1827	8,39	11129	16,42
1998	1452	6,67	9633	15,07
1999	1512	6,95	9968	15,17
2000	1219	5,60	8169	14,92
2001				
2002	1378	6,33	9056	15,22
2003	1196	5,50	8000	14,95
2004	1189	5,46	7839	15,17
2005	1306	6,00	8475	15,41
2006	1179	5,42	9149	12,89
2007	1121	5,15	7963	14,08
2008	1145	5,26	8530	13,42
2009	1183	5,44	8752	12,52
2010	1173	5,39	9066	12,94
2011	1237	5,68	9658	12,81
2012	1136	5,22	9080	12,51
Сумма	21764	100	150189	14,49
Среднее	1360,3	6,25	9386,813	14,49

Числа поданных заявок по области знания "Химия и науки о материалах" за один год колебались от 1121 до 2511 при среднем значении 1360.25. На табл. 2 видно, что в начале рассматриваемого периода числа поданных заявок были преимущественно выше с пиковым значением в 1996 г., а также претерпевали наиболее выраженные колебания.

Описанные количественные характеристики выделенных грантов и предварительно поданных заявок по области знания "Химия и науки о материалах"

позволили определить вероятность поддержки посылаемых материалов. В течение 16 лет, по которым в ИБ даны числа заявок, из 21764 заявок по области знания "Химия и науки о материалах" было поддержано 6456 проектов, что составило 29.66%. Динамика процентных чисел поддержанных проектов по годам показана на табл. 3.

Таблица 3

Динамика процентных чисел поддержанных инициативных научных по области знания "Химия и науки о материалах" в течение рассматриваемого периода

Годы	Инициативные проекты.		
	Химия.		
	Гранты	Заявки	% под-держанных
1993			
1994			
1995			
1996	659	2511	26,25
1997	429	1827	23,48
1998	445	1452	30,65
1999	422	1512	27,91
2000	368	1219	30,19
2001			
2002	415	1378	30,12
2003	363	1196	30,35
2004	370	1189	31,12
2005	459	1306	35,15
2006	365	1179	30,96
2007	344	1121	30,69
2008	367	1145	32,05
2009	379	1183	32,04
2010	356	1173	30,35
2011	372	1237	30,07
2012	343	1136	30,19
Сумма	6456	21764	29,66
Среднее	403,5	1360,3	29,66

Годовые значения процентных чисел поддержанных проектов по области знания "Химия и науки о материалах" составляли от 23.48 до 35.15 при среднем значении 29.66. Как следует из рис. 3, пиковое значение данного показателя имело место в 2005 г., а наиболее заметные колебания процентных чисел поддержанных проектов отмечались в начальной части 16-летнего периода.

Следует признать, что за 20 лет своей деятельности РФФИ оказал значительную поддержку проведению исследований в области знания "Химия и науки о материалах". Химия как наука сформировалась в XVII веке и в настоящее время представляет одну из наиболее значимых областей естественно-научных дисциплин [5]. Несомненны ее достижения в XX веке [7]. Данная область знания имеет связь с иными областями, поскольку включает себя и неорганическую и органическую химию, а также физическую химию и математическую и квантовую химию. Она охватывает широкий спектр направлений деятельности (нефтехимия, радиохимия, фармацевтическая химия и т.д.). Отсюда - исследования в области знания "Химия и науки о материалах" крайне необходимы в XXI веке.

В течение рассматриваемого периода наблюдались существенные колебания годовых величин как чисел выделенных грантов, так и чисел подаваемых заявок, а также процентных чисел поддержанных проектов. Отмечалось некоторое сходство динамик чисел грантов и чисел заявок и выраженное их отличие от динамики процентных чисел поддержанных проектов. Тем не менее, во всех трех случаях колебания соответствующих величин отмечались преимущественно в начальной части анализируемого периода. При этом колебания чисел грантов были в 1.92 раза, сделанных заявок - 2.24 раза и процентов поддержанных проектов - в 1.50 раз.

На основе корреляционного анализа было обнаружено наличие четкого параллелизма чисел выделенных грантов и чисел подаваемых заявок и ($r = 0.94$; $p < 0.01$), что свидетельствует о значительной роли общего состояния внутренней возможности Фонда в поддержке научных проектов. Кроме того, была выявлена положительная корреляционная взаимосвязь чисел выделенных грантов, и чисел подаваемых заявок по области знания "Химия и науки о материалах" с соответствующими величинами суммарных данных по всем областям знания в конкурсе инициативных проектов ($r = 0.85$ и 0.95 ; $p < 0.01$). Аналогичный факт имел место среди процентных чисел поддержанных проектов ($r = 0.81$; $p < 0.01$), что также позволяет предположить ведущее значение финансовых ресурсов РФФИ в результатах его деятельности.

Заключение

Организация РФФИ для поддержки работы научных коллективов и отдельных ученых явилась очень своевременным мероприятием только-что возникшей РФ. За время деятельности РФФИ была оказана существенная поддержка проведению фундаментальной исследований, в том числе и по области знания "Химия и науки о материалах". Для повышения возможности поддержки научных проектов весьма желательно увеличение финансового наполнения Фонда. Российское правительство в ближайшие годы намерено увеличить ресурсное наполнение Фонда, о чем было сказано во время выступления В.В. Путина на Общем собрании Российской академии наук в 2012 г., где он дал высокую оценку работе Фонда [11].

Список литературы

1. Алфимов М.В. Российский фонд фундаментальных исследований: десять лет служения российской науке // Вестник РФФИ. - 2002. - № 1(27). - С. 5-39.

2. Алфимов М.В., Минин В.А., Либкинд А.Н. Страна наука - РФФИ // Вестник РФФИ. - 2000. - № 2(20). - С. 5-29.
3. Арутюнов В.С. Наука как один из важнейших институтов современного государства // В: Наука России. От настоящего к будущему / Ред В.С. Арутюнов, Г.В. Лисичкин, Г.Г. Малинецкий. - М.: Книжный дом "ЛИБРОКОМ", 2009. - С. 9-29.
4. Вестник РФФИ 20 лет: Специальный выпуск. - 2012.
5. Девятова С.В., Купцов В.И. Феномен научной революции XVII века // Вопросы философии. - 2013. - № 12. - С. 59-67.
6. Ефремов Ю.Н. Зачем нужна наука миру и России // Вестник РФФИ. - 2000. - № 1(19). - С. 40-43.
7. Золотов Ю.А. О химическом анализе и о том, что вокруг него. - М.: Наука, 204. - 477 с.
8. Коннов В.И. Самоуправление на "передовой": становление национального научного фонда США // Вестник РФФИ. - 2007. - №4(54). - С. 10-15.
9. Лебедев С.А. Праксиология науки // Вопросы философии. - 2012. - №4. - С. 52-63.
10. Обама Б. Выступление в Национальной академии наук 27-ого апреля 2009 г. // В защиту науки. Бюл. № 6. Ред. Э.П. Кругляков. - М.: Наука, 2009. - С. 185-198.
11. Путин В.В. Выступление на Общем собрании Российской академии наук 22 мая 2012 // В защиту науки. Бюл. № 11. Ред. Э.П. Кругляков. - М.: Наука, 2012. - С. 7-14..
12. Чиженкова Р.А. Динамика нейрофизиологических исследований действия неионизирующей радиации во второй половине XX-ого века. - М.: Издат. дом Акад. Естествознания, 2012. - 88 с.
13. Чиженкова Р.А. Библиометрический анализ научных проектов, поддержанных Российским Фондом Фундаментальных Исследований за 20 лет: виды конкурсов // Успехи современного естествознания. - 2014. - №5(часть 2) - С. 145-150.
14. Чиженкова Р.А. Библиометрический анализ инициативных научных проектов по разным областям знания, поддержанных Российским Фондом Фундаментальных Исследований за 20 лет // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. - 2014. - №7. - С. 100-105.
15. Чиженкова Р.А. Библиометрический анализ инициативных научных проектов по биологии и медицинской науке, поддержанных Российским Фондом Фундаментальных Исследований за 20 лет // Успехи современного естествознания. - 2014. - №9(часть 2) - С. 155-158.
16. Чиженкова Р.А. Российский фонд фундаментальных исследований. Библиометрический анализ поддержки научных проектов. - Germany: Palmarium Academic Publishing, 2015. - 88 с.
17. Чиженкова Р.А. Российский фонд фундаментальных исследований. Библиометрический анализ поддержки инициативных научных проектов. - М.: Изд. Дом Акад. Естествознания, 2016. - 82 с.

ОБ ОДНОМ АЛГОРИТМЕ ПОИСКА ОБЩИХ ПОДПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ С НЕТОЧНЫМ СОВПАДЕНИЕМ (ВКЛЮЧАЯ ВСТАВКИ И ВЫПАДЕНИЯ) НА ОСНОВЕ СВЁРТОЧНЫХ ФУНКЦИЙ И БЫСТРОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ФУРЬЕ

В.В. Шайдуров¹, А.А. Молявко², А.А. Поплаухин³, А.И. Аксенова³, М.Г. Садовский^{1,3}

¹Институт вычислительного моделирования СО РАН,

²Сибирский федеральный университет, ИМФИ,

³Сибирский федеральный университет, ИФБиБТ,

shaidurov04@mail.ru, okvaylom@gmail.com, andrey.poplaukhin@yandex.ru

aksien96@mail.ru, msad@icm.krasn.ru

Введение

Поиск повторов (и шире — общих подпоследовательностей) в символьных последовательностях является классической задачей математики и информатики. Эта проблема включает в себя два аспекта: поиск повторов по образцу с точным совпадением искоемых подпоследовательностей и поиск по образцу незначительными различиями. В первом направлении получены значительные результаты, а объём публикаций, в том числе, в области биоинформатики, очень велик [1].

Второй аспект связан с поиском подпоследовательностей, которые могут иметь малые несовпадения. Очевидно, что вторая задача гораздо сложнее как технически, так и идейно, поскольку требует точного описания того, что такое допустимые несовпадения. Одна из главных трудностей состоит в вопросе о том, какие именно различия в двух сравниваемых последовательностях следует считать малыми. В 1965 году В.Левенштейн предложил для этого использовать так называемое редакционное расстояние [2], которое позже легло в основу основного к настоящему моменту метода поиска с неточными совпадениями — выравнивания [3]. Основная идея выравнивания — поиск так называемых «зародышей» (т.е. сравнительно коротких точно совпадающих подпоследовательностей) с дальнейшим их расширением, теперь уже допускающим некоторые неточности. Этот метод имеет очень большое число реализаций и версий.

Тем не менее, следует подчеркнуть, что ни одна из используемых в настоящее время версий метода выравнивания не свободна от двух принципиальных недостатков: произвола в выборе штрафных функций для определения редакционного расстояния и расходимости самого метода. Если первая проблема преодолевается различными способами и здесь наработан известный опыт, который позволяет хотя бы частично «стандартизовать» системы штрафных функций, то проблема расходимости решается единственным способом: приходится искусственно сильно увеличивать значения штрафных функций, назначаемые на концах сравниваемых последовательностей. В частности, это ведёт к тому, что выравнивание не может работать с последовательностями длиной в сотни тысяч символов и более. Предлагаемый в данной работе подход как раз направлен на работу со всем геномом, а не его отдельными малыми (по сравнению со всем геномом) частями.

Настоящая работа посвящена первоначальному изложению нового метода поиска общих подпоследовательностей с неточным совпадением. Метод основывается на вычислении свёртки коэффициентов двух многочленов, которые конструируются из сравниваемых символьных последовательностей. Идея использования свёртки с быстрым дискретным преобразованием Фурье (БПФ) в задаче сравнения символьных последовательностей высказывалась в разное время различными исследователями [4, 5, 6, 7]. В целях уменьшения числа арифметических операций (вдвое) обычно

используются обернутые свертки и соответствующее БПФ. На наш взгляд, потенциал обычной (не обернутой) свертки значительно выше по двум причинам. Во-первых, вычисления нацелены на работу с бинарными последовательностями. Этот факт до сих пор не особенно принимался во внимание. Между тем, работа с двоичными цифрами ожидаемо может оказаться гораздо экономичнее, как это произошло с умножением целых чисел [8] при использовании обычной свертки. Во-вторых, далее мы увидим, что БПФ реагирует на совпадения в последовательностях, но не дает указания на расположение таких участков. На наш взгляд, обычная свертка и промежуточные результаты БПФ могут дать такую информацию.

Несмотря на долгую историю, проблема поиска (и сравнения) общих подпоследовательностей в символьных последовательностях далека от разрешения и является весьма острой для современной биоинформатики. Транспонируемые элементы представляют собой последовательности ДНК, которые могут изменять свое положение как в пределах одного генома, так и с одного генома на другой [9]. В течение долгого времени транспонируемые элементы считались просто еще одним видом «мусорной ДНК» и гипотеза об их регуляторных функциях оставалась без внимания. Повторы ДНК, которые представляют основную часть большинства геномов, вызывают его нестабильность, часто приводящую к перестройкам хромосом и заболеваниям [10].

В настоящей работе иллюстрируется быстрый и эффективный метод сравнения и поиска общих подпоследовательностей в нуклеотидных и аминокислотных последовательностях с учетом малых несовпадений у общих подпоследовательностей, таких как вставки и выпадения, а также крупные блоковые перестановки и инверсии.

Описание метода сравнения на основе свёрточных функций

Опишем суть метода. Пусть имеется символьная последовательность из алфавита $\aleph$ мощности $K = |\aleph|$ длины $N \approx 10^{10}$ символов и образец (также символьная последовательность) из того же алфавита длины $L \leq N$. Требуется найти все включения образца в рассматриваемую последовательность, при том условии, что каждое такое включение содержит не более δ ошибок (несовпадений).

На первом шаге исходная символьная последовательность из алфавита мощности $K = |\aleph|$ преобразуется в набор из K последовательностей каждая. В результате исходная последовательность заменяется на K бинарных (т.е. из алфавита $\mathfrak{Z} = \{0,1\}$) последовательностей. Это преобразование является ключевым для работы предлагаемого метода и обеспечивает алгоритмическое распараллеливание в K раз. Аналогично, образец, для которого требуется найти все его (быть может, неточные) включения в анализируемую последовательность, также преобразуется в набор из K последовательностей алфавита $\mathfrak{Z} = \{0,1\}$.

Опишем это преобразование на примере нуклеотидных последовательностей, имеющих алфавит $\aleph = \{A, C, G, T\}$ мощности 4. Исходная символьная последовательность преобразуется в четыре числовые из алфавита $\mathfrak{Z}$ по следующему правилу. В первой последовательности заменим все символы А на 1, а все остальные — на 0. Аналогично, во второй, третьей и четвёртой последовательностях заменим на 1 символы С, G и Т, соответственно, а остальные — на 0. Аналогично преобразуем образец в четыре бинарных образца.

Остановимся на определении дискретной функции совпадений по каждому символу в отдельности. Пусть это будет последовательности $u_0, u_1, \dots, u_{N-1}, u_N$ и $n_0, n_1, \dots, n_{L-1}, n_L$, соответствующие символу А. На следующем шаге инвертируем одну из последовательностей — пусть это будет тот образец, для которого ведётся поиск. Это

означает, что все $K \{0,1\}$ последовательностей для образца вида $n_0, n_1, \dots, n_{L-1}, n_L$ преобразуется в обратную последовательность $z_1, z_2, \dots, z_{L-1}, z_L = n_L, n_{L-1}, \dots, n_1, n_0$.

Будем рассматривать получившиеся бинарные последовательности как коэффициенты полиномов (степени $N-1$ и $L-1$). Легко проверить, что коэффициенты $w_0, w_1, \dots, w_{N+L-3}, w_{N+L-2}$ их произведения равны скалярным произведениям

$$\begin{aligned} w_j &= \sum_{s=0, \dots, j} u_s z_{j-s} = \sum_{s=0, \dots, j} u_s n_{L-1-j+s}, \text{ если } j \leq L-1 \text{ и} \\ w_j &= \sum_{s=0, \dots, j} u_{s+j-L+1} z_{j-s} = \sum_{s=0, \dots, j} u_{s+j-L+1} n_{L-1-j+s}, \text{ если } j > L-1 \end{aligned} \quad (1)$$

Тогда наличие одинаковых подпоследовательностей из символа A при некотором j_0 будет характеризоваться уверенным скачком значения (1) на фоне возможных случайных совпадений при других $j \neq j_0$. Для быстрого перемножения двух многочленов будем использовать БПФ [8]. Поскольку оно даёт наибольший выигрыш для числа элементов со степенями двойки, то обе бинарные последовательности дополняются нулями в позициях до ближайшей степени двойки, большей $N+L-2$.

Подчеркнём, что уровень несовпадений (доля ошибок, включая малые вставки/выпадения) характеризуется значениями вычисленных коэффициентов. Кроме того, ограничение малости длины образца является несущественным для описанного метода: этим алгоритмом можно сравнивать две последовательности любой длины; здесь основным ограничением становятся вычислительные возможности – например, ограничения по объёму оперативной памяти, необходимой для проведения вычислений с длинными последовательностями.

Таблица 1

Характеристики затрат времени на счёт свёртки, N — длина последовательности, t — время счёта одной свёртки (сек), $\langle f \rangle$ — среднее значения одного элемента свёртки, σ — стандартное отклонение $\langle f \rangle$.

N	t	$\langle f \rangle$	σ	N	t	$\langle f \rangle$	σ
50000	1,228000	0,222667	0,042890	550000	21,898000	0,221788	0,042696
100000	2,543000	0,221756	0,042727	600000	21,950000	0,222274	0,042776
150000	5,111000	0,221544	0,042648	650000	21,951000	0,222206	0,042765
200000	5,134000	0,222424	0,042827	700000	21,965000	0,222198	0,042772
250000	5,115000	0,222368	0,042824	750000	22,064000	0,222229	0,042773
300000	10,521000	0,221876	0,042685	800000	22,047000	0,221978	0,042713
350000	10,547000	0,222095	0,042724	850000	22,044000	0,222098	0,042732
400000	10,601000	0,221887	0,042689	900000	22,500000	0,222300	0,042770
450000	10,628000	0,222316	0,042759	950000	22,258000	0,222236	0,042770
500000	10,582000	0,221998	0,042714	1000000	22,184000	0,222024	0,042734

Предварительные результаты

Проверку работоспособности метода проводили на наборе суррогатных нуклеотидных последовательностей: использовались последовательности из четырёхбуквенного алфавита $\aleph = \{A, C, G, T\}$, однако сама последовательность порождалась с помощью реализации случайного процесса Бернулли, т.е. она была случайной и нескоррелированной. Хорошо известно, что такие последовательности заметно отличаются от реальных генетических, однако для проверки работоспособности метода это различие не является существенным. Для того, чтобы избежать эффектов вырождения, частоты всех четырёх символов назначались разными (в частности,

$p_A = 0,1$, $p_C = 0,2$, $p_G = 0,3$ и $p_T = 0,4$.



Рис. 1. Пример работы программы по поиску совпадений.

Начнём изложение предварительных результатов с оценки затрат на работу программы. Все расчёты производились на персональном компьютере под ОС Windows 10, один процессор с двумя ядрами, тактовая частота 2,71 GHz, объём оперативной памяти 8 Gb.

В Таблице 1 представлены характеристики программы, рассчитывающей значения свёртки. Сравнивались две последовательности одинаковой длины (N). Хорошо видно, что для последовательностей длиной до 10^6 время счёта растёт весьма медленно и более того — немонотонно.

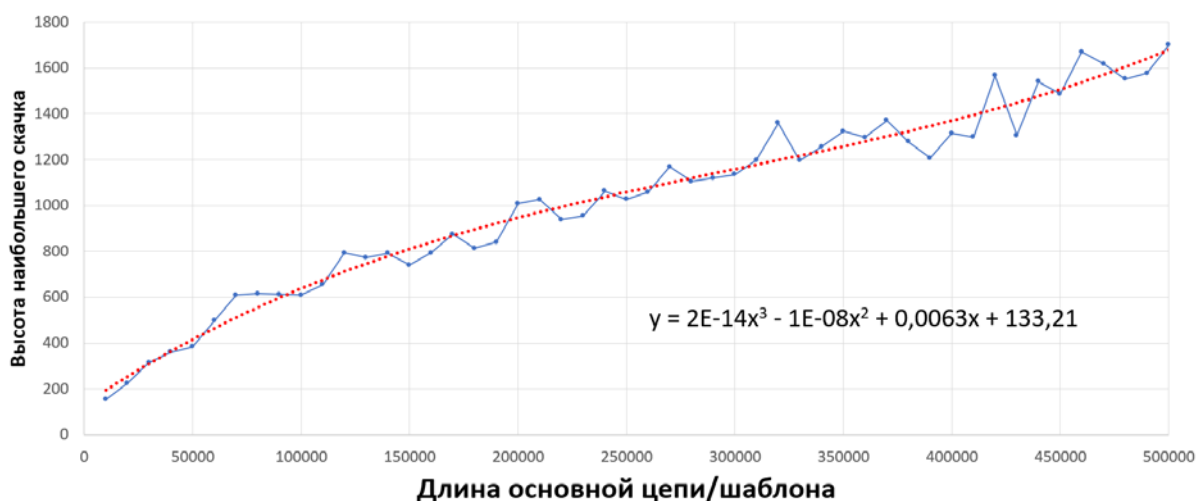


Рис. 2. Зависимость выделяемого сигнала от длины шаблона.

На Рисунке 1 показан пример работы программы по поиску совпадений с помощью свёртки. В этом примере сравнивались две случайные последовательности, в одну из которых были искусственно внедрены два фрагмента из другой. Длина последовательностей составляла $2 \cdot 10^5$, длина вставляемых фрагментов — $2 \cdot 10^4$. Два пика на «горке» соответствуют обнаруженным вхождениям этих фрагментов. Здесь

следует обратить внимание на соотношение «сигнала» — резкого повышения значения свёрточной функции — и «шума». Под шумом следует понимать множественный слабый сигнал, порождаемый совпадающими фрагментами малой и очень малой длины (от единиц до $1,5 \cdot 10^2$). Такой шум приводит к тому, что совпадения малой длины становятся «не видны» на фоне шума, хотя они могут быть.

Для примера, показанного на Рисунке 1, был проведён следующий вычислительный эксперимент: длину вставок последовательно уменьшали $\approx \sqrt{2}$ раз и определяли величину «сигнала». На длине вставки в 1500 символов программа (специально предназначенная для выделения сигнала, об этом ниже) распознала только одну вставку; на длине вставки в 1200 символов сигнал был полностью потерян.

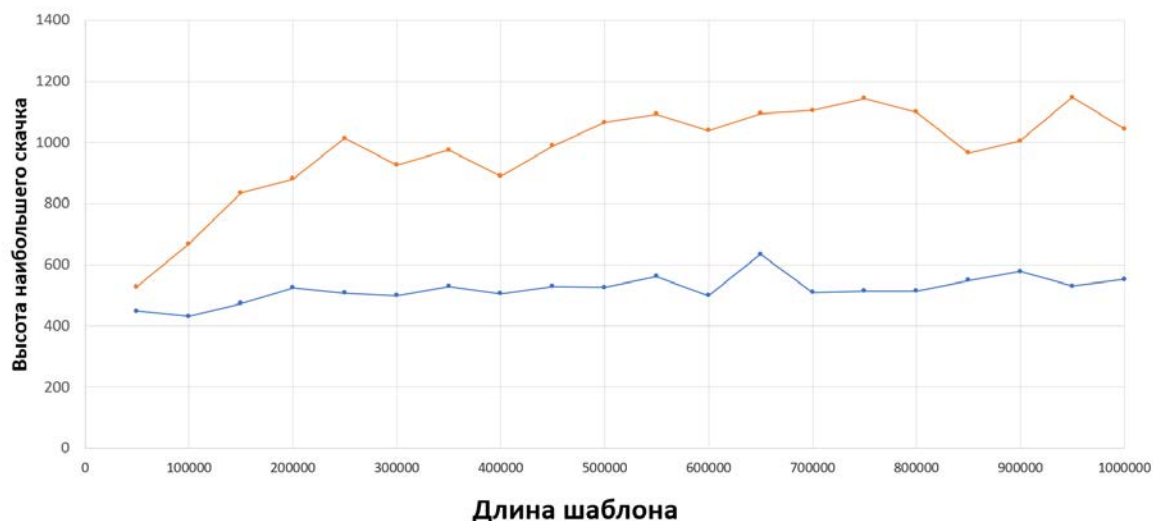


Рис. 3. Зависимость выделяемого сигнала от длины последовательности; синяя линия — длина шаблона 50000, красная — 200000.

Данный пример показывает, что в сколько-нибудь значимых практических применениях потребуется разработка средств для выделения слабого сигнала из шума, порождаемого малыми случайными совпадениями. Для ответа на вопрос о зависимости величины сигнала от длины искомого фрагмента мы поставили два вычислительных эксперимента. В первом длину искомого участка последовательно увеличивали линейно и определяли величину сигнала; Рисунок 2 иллюстрирует этот результат.

На этом рисунке синяя ломанная показывает величину сигнала, вычисляемого для шаблонов возрастающей длины, а построенная сверху зелёная является мажорантой; эта последняя использовалась для определения сигнала из шума. Рисунок 3 показывает результат другого вычислительного эксперимента; в нём длина шаблона была фиксирована (и довольно большой: 50000 символов), а переменной величиной была длина последовательности, с которой производилось сравнение. Как видно из Рисунка 3, никакой зависимости от длины последовательности не наблюдается. Иными словами, первоначальная гипотеза о том, что ведущим параметром, определяющим возможность выделения сигнала из шума, является отношение длины искомого шаблона ко всей длине последовательности, не подтвердилась.

Важным преимуществом представленного здесь метода является его высокая чувствительность и простота применения для поиска таких малых ошибок, которые доставляют наибольшие трудности для всех остальных методов поиска с ошибками — поиск с (малыми) выпадениями и вставками. Рисунок 4 иллюстрирует работу метода свёрток: в данном вычислительном эксперименте были искусственно созданы вставка

(она же и удаление) длиной в 4 символа. Хорошо видно, что метод точно идентифицирует эту ошибку.

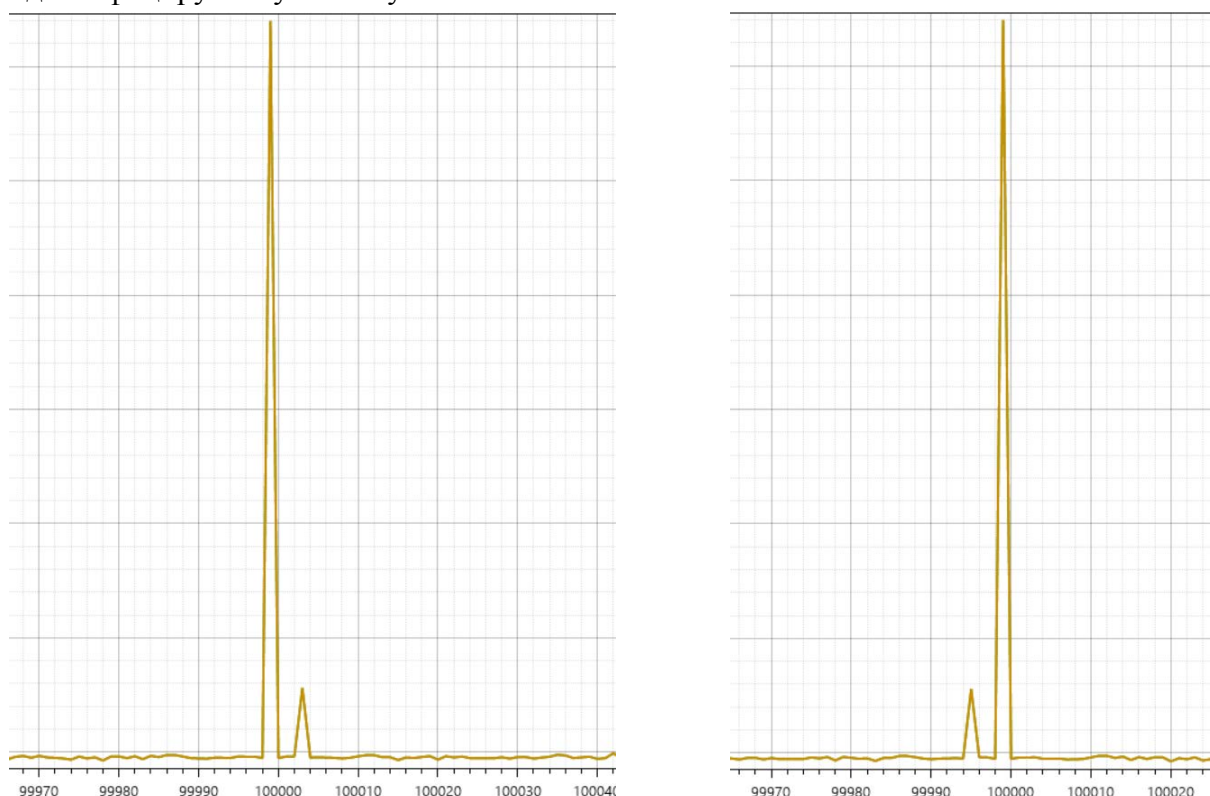


Рис. 4. Идентификация выпадения (слева) либо вставки (справа) длиной в 4 символа.

Заключение

Данная работа представляет идею нового метода поиска неточных совпадений в нуклеотидных последовательностях: метод основан на вычислении свёртки двух полиномов, полученных специальным преобразованием исходных сравниваемых последовательностей. Описание идеи, приведённое выше, является лишь базовым. Для успешного внедрения этого метода в практику работы потребуется решение следующих задач:

- получение теоретических оценок «шума», порождаемого совпадениями малых подпоследовательностей;
- проведение вычислительных экспериментов по определению зависимости «шума» от малых подпоследовательностей для различного типа сравниваемых последовательностей и различных параметров сравнения;
- построение на основе этих исследований процедуры контрастирования сигнала для выделения его из малого «шума», порождаемого малыми подпоследовательностями (простейший вариант контрастирования описан выше и основан на сравнении малого сигнала со стандартным отклонением, порождаемым всей свёрткой);
- изучение (в том числе методами имитационного моделирования) влияния взаимодействия различных наборов неточно совпадающих подпоследовательностей (включая вставки/удаления, инверсии и инверсии и комплементарной заменой нуклеотидов) на наблюдаемый сигнал.

Наконец, чрезвычайно важным является исследование вычислительной устойчивости предлагаемой процедуры для длинных и сверхдлинных последовательностей, для которых вычислительные ограничения (например, накопление ошибок округления при вычислении прямого и обратного БПФ) становятся существенными.

Список литературы

1. Gusfield, D., 1997. Algorithms on strings, trees, and sequences: computer science and computational biology. Cambridge university press
2. Левенштейн, В.И., Двоичные коды с исправлением выпадений, вставок и замещений символов. // Доклады Академии наук, 1965. Т. 163, № 4, С. 845 – 848.
3. Pearson, W.R., Lipman, D.J., 1988. Improved tools for biological sequence comparison. Proceedings of the National Academy of Sciences, 85(8), pp.2444 – 2448.
4. Freschi V, Bogliolo A. A faster algorithm for the computation of string convolutions using LZ78 parsing. Information Processing Letters. 2010, T.110, №14-15, С.609 – 613.
5. Freschi V, Bogliolo A. Longest common subsequence between run-length-encoded strings: a new algorithm with improved parallelism. Information Processing Letters. 2004, T.90, №4, С.167 – 173.
6. Bourque, Guillaume, et al. Ten things you should know about transposable elements // Genome biology 19.1 (2018): 199.
7. M. R Kubiak, I. Makalowska, Protein-Coding Genes' Retrocopies and Their Functions // Viruses. – 2017. – Т. 9. – №. 4. – С. 80.
8. Ахо, А., Хопкрофт, Дж., Ульман, Дж., Построение и анализ вычислительных алгоритмов – М.: Мир. – 1979.

СПИСОК ДОКЛАДОВ

М.М. Алкезуини, В.И. Горбаченко РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ АППРОКСИМАЦИИ НА СЕТЯХ РАДИАЛЬНЫХ БАЗИСНЫХ ФУНКЦИЙ, ОБУЧАЕМЫХ МЕТОДОМ ЛЕВЕНБЕРГА-МАРКВАРДА	3
С.И.Барцев РЕКУРСИВНЫЕ И МНОГОСЛОЙНЫЕ НЕЙРОННЫЕ СЕТИ, ИГРАЮЩИЕ В ЧЕТ-НЕЧЕТ: РЕФЛЕКСИЯ ПРОТИВ РЕГРЕССИИ	9
С.И. Барцев, П.М. Батурина ЭКСТРЕМАЛЬНАЯ И ДИВЕРГЕНТНАЯ КОМПОНЕНТЫ ЭВОЛЮЦИИ ФОРМИРУЮТ ЛАНДШАФТ ПРИСПОСОБЛЕННОСТИ ЭВРИСТИЧЕСКИХ НЕЙРОСЕТЕВЫХ ОБЪЕКТОВ	15
Г.Р. Баширов, Н.М. Богатов, А.Н. Богатова, С.А. Сухих ИЗМЕНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ТОЧЕК ПОСРЕДСТВОМ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ	21
В.С.Воронов, А.И.Рубан АДАПТИВНОЕ УПРАВЛЕНИЕ С ИДЕНТИФИКАЦИЕЙ ТЕМПЕРАТУРНЫМИ РЕЖИМАМИ ЖИДКИХ СРЕД	25
И.К. Горбань, В.С. Густов, М.Ю. Сенашова, М.Г. Садовский СТРУКТУРА ГЕНОМОВ ЦИАНОБАКТЕРИЙ ДЛЯ РАЗНОЙ ТОЛЩИНЫ СЛОВАРЕЙ	31
А.Ю. Дорогов РЕГУЛЯРНЫЕ ПЕРЕСТРАИВАЕМЫЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ С ТОПОЛОГИЕЙ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ГЛУБОКОГО ОБУЧЕНИЯ	37
Ю. В. Коловский КРИТЕРИИ И ЭФФЕКТИВНОСТЬ ПРИРОДОПОДОБИЯ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ НЕРАВНОВЕСНЫХ СИСТЕМ	45
Л.А.Компаниец, О.С.Володько АНАЛИЗ ДАННЫХ ИЗМЕРЕНИЙ ТЕМПЕРАТУРЫ В ОЗЕРЕ ШИРА В ЛЕТНИЙ ПЕРИОД МЕТОДОМ ГЛАВНЫХ И НЕЗАВИСИМЫХ КОМПОНЕНТ	49
Р.Е.Косарев, М.Ю.Сенашова, М.Г.Садовский ПРОСТРАНСТВЕННАЯ СТРУКТУРА МИТОХОНДРИАЛЬНЫХ ГЕНОМОВ РАСТЕНИЙ И ЖИВОТНЫХ	58

С.В. Листопад, С.Б. Румовская ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ГИБРИДНЫХ ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫХ МНОГОАГЕНТНЫХ СИСТЕМ ГЕТЕРОГЕННОГО МЫШЛЕНИЯ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ПРОБЛЕМЫ ВОССТАНОВЛЕНИЯ РЕГИОНАЛЬНОЙ РАСПРЕДЕЛИТЕЛЬНОЙ ЭЛЕКТРОСЕТИ	67
А.С. Михалев, А.И. Рубан БАЗОВЫЙ АЛГОРИТМ МЕТОДА ГЛОБАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ С СЕЛЕКТИВНЫМ УСРЕДНЕНИЕМ ИСКОМЫХ ДИСКРЕТНЫХ ПЕРЕМЕННЫХ	73
А.М.Ольшанский, А.В.Игнатенков, И.А.Довгерд, Г.А.Довгерд МНОГОСЛОЙНЫЕ ИНС С ПЕРЕМЕННОЙ ПРОВОДИМОСТЬЮ СИГНАЛА В ЗАДАЧАХ РАСПИСАНИЯ	79
А.Л. Осипов, В.П. Трушина КОМПЬЮТЕРНЫЙ АНАЛИЗ ХИМИЧЕСКИХ ДАННЫХ ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ ТОКСИКОЛОГИЧЕСКИХ СВОЙСТВ	83
Д.В. Похабов, Д.Д. Похабов, В.Г. Абрамов, М.Е. Туник, К.О. Туценко, А.А. Хорошавина, М.Г. Садовский О СОЧЕТАННОМ ПРИМЕНЕНИИ ОБОНЯТЕЛЬНЫХ И КИНЕСТЕТИЧЕСКИХ ТЕСТОВ ДЛЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ ДИАГНОСТИКИ БОЛЕЗНИ ПАРКИНСОНА И ЭССЕНЦИАЛЬНОГО ТРЕМОРА	87
Г.А. Самигулина, З.И. Самигулина РАЗРАБОТКА КОГНИТИВНЫХ АГЕНТОВ ДЛЯ S MART- СИСТЕМЫ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ И УПРАВЛЕНИЯ СЛОЖНЫМИ ОБЪЕКТАМИ	96
В.П.Сизиков, В.И. Разумов СЕТЕВАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ ПРОЕКЦИЙ МИРОВОЗЗРЕНИЯ	100
К.В.Симонов, Ю.А.Хамад, А.С.Кенц НЕЙРОСЕТЕВЫЕ АЛГОРИТМЫ КЛАССИФИКАЦИИ ПАТОЛОГИИ ЛЕГКИХ НА РЕНТГЕНОВСКИХ СНИМКАХ	104
В.Д. Федотовская, Т.О. Шпагина, А.И. Колесникова, М.Г. Садовский О СООТНОШЕНИИ ВЛИЯНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ И ТАКСОНОМИЧЕСКИХ РАЗЛИЧИЙ ДЛЯ ГЕНОВ СЕМЕЙСТВА <i>atp</i> МИТОХОНДРИЙ НЕКОТОРЫХ ГРИБОВ	110
А.А.Феллер, Е.А. Мартынова, Д.В. Черняев, Р.А. Зуков, Э.В. Семенов, Е.В. Слепов, М.Г. Садовский ВЗАИМОСВЯЗЬ МЕЖДУ ЗЛОКАЧЕСТВЕННОЙ И	

ДОБРОКАЧЕСТВЕННОЙ ПАТОЛОГИЕЙ И ПОКАЗАТЕЛЯМИ РАЗВЕРНУТОГО АНАЛИЗА КРОВИ	116
А.Г. Хантимиров, О.В. Непомнящий, Н.Ю. Сиротинина МЕТОД АППАРАТНОЙ РЕАЛИЗАЦИИ РЕКУРРЕНТНЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ	126
Р.А. Чиженкова БИБЛИОМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ИНИЦИАТИВНЫХ НАУЧНЫХ ПРОЕКТОВ ПО ОБЛАСТИ ЗНАНИЯ "ХИМИЯ И НАУКИ О МАТЕРИАЛАХ", ПОДДЕРЖАННЫХ РОССИЙСКИМ ФОНДОМ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ	132
В.В. Шайдуров, А.А. Молявко, А.А. Поплаухин, А.И. Аксенова, М.Г. Садовский ОБ ОДНОМ АЛГОРИТМЕ ПОИСКА ОБЩИХ ПОДПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ С НЕТОЧНЫМ СОВПАДЕНИЕМ (ВКЛЮЧАЯ ВСТАВКИ И ВЫПАДЕНИЯ) НА ОСНОВЕ СВЁРТОЧНЫХ ФУНКЦИЙ И БЫСТРОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ФУРЬЕ	138

СПИСОК АВТОРОВ

Ф.И.О.	Место работы	Стр.
Абрамов Владислав Геннадьевич	Федеральное государственное бюджетное учреждение «Федеральный Сибирский научно-клинический центр Федерального медико-биологического агентства» E-mail: excalibr@mail.ru	87
Аксенова Анастасия Ильинична	660041, Красноярск, Свободный пр., 79, Сибирский федеральный университет, ИФБиБТ E-mail: aksien96@mail.ru	138
Алкезуини Мухи Мартада	440026, г. Пенза, ул. Красная, д. 40. Пензенский государственный университет E-mail: mohieit@mail.ru	3
Барцев Сергей Игоревич	660036, Красноярск, ул. Академгородок, 50 строение 50, Институт биофизики СО РАН E-mail: bartsev@yandex.ru	9,15
Батурина Полина Михайловна	660041, Красноярск, СФУ, ИФБиБт, кафедра биофизики; E-mail: lina_bat@mail.ru	15
Баширов Георгий Романович	350040, г. Краснодар, ул. Ставропольская, 149, ФГБОУ ВПО «Кубанский государственный университет», E-mail: bogatov@phys.kubsu.ru	21
Богатов Николай Маркович	350040, г. Краснодар, ул. Ставропольская, 149, ФГБОУ ВПО «Кубанский государственный университет», E-mail: bogatov@phys.kubsu.ru	21
Богатова Анна Николаевна	350040, г. Краснодар, ул. Ставропольская, 149, ФГБОУ ВПО «Кубанский государственный университет», т. 8(861)2199501266, E-mail: bogatov@phys.kubsu.ru	21
Володько Ольга Станиславовна	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: olga.pitalskaya@gmail.com	49
Воронов Владимир Сергеевич	660074, Красноярск, ул. Академика Киренского, д.26, Институт космических и информационных технологий (ИКИТ СФУ) E-mail: voronov.volodya2013@yandex.ru	25
Горбань Инна Константиновна	660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79, Сибирский федеральный университет E-mail: inn.gorban@gmail.com	31
Горбаченко Владимир Иванович	440026, Пенза, ул. Красная, 40, Пензенский государственный университет E-mail: gorvi@mail.ru	3
Густов Владимир Сергеевич	660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79, Сибирский федеральный университет E-mail: v.gustows@mail.ru	31
Довгерд Глеб Александрович	109029, Москва, ул. Нижегородская, д. 27, стр. 1, Научно-исследовательский и проектно-конструкторский институт информатизации, автоматизации и связи на железнодоро-	79

	рожном транспорте E-mail: dovgerd@vniias.ru	
Довгерд Игнат Александрович	109029, Москва, ул. Нижегородская, д. 27, стр. 1, Научно-исследовательский и проектно-конструкторский институт информатизации, автоматизации и связи на железнодорожном транспорте E-mail: dovgerd@vniias.ru	79
Дорогов Александр Юрьевич	197376, Санкт-Петербург, ул. проф. Попова д. 5, Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет "ЛЭТИ" E-mail: vaksa2006@yandex.ru	37
Зуков Руслан Александрович	Красноярский государственный медицинский университет им. В.Ф.Войно-Ясенецкого Минздрава РФ, Федеральное государственное бюджетное учреждение «Федеральный Сибирский научно-клинический центр Федерального медико-биологического агентства» E-mail: zukov_rus@mail.ru	116
Игнатенков Александр Владимирович	109029, Москва, ул. Нижегородская, д. 27, стр. 1, Научно-исследовательский и проектно-конструкторский институт информатизации, автоматизации и связи на железнодорожном транспорте E-mail: a.ignatenkov@gmail.com	79
Кенц Анжелика Станиславовна	660037, Красноярск, ФСНКЦ ФМБА России E-mail: anzhelika.kents@gmail.com	104
Колесникова Анна Игорьевна	660041, Красноярск, Свободный пр., 79, Сибирский федеральный университет, ИФБиБТ E-mail: kolesnikova.denovo@gmail.com	110
Коловский Юрий Васильевич	660074, Красноярск, ул. Академика Киренского, д.28, Сибирский федеральный университет, Институт инженерной физики и радиоэлектроники, базовая кафедра «Инфокоммуникации», т. 89039223973 E-mail: kolovskiuv@yandex.ru	45
Компаниец Лидия Алексеевна	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: kla@icm.krasn.ru	49
Косарев Роман Евгеньевич	660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79, Сибирский федеральный университет E-mail: r-garder@mail.ru	58
Листопад Сергей Викторович	Калининград, ул.Гостиная, д.5, Калининградский филиал ФИЦ "Информатика и управление" РАН E-mail: ser-list-post@yandex.ru	67
Мартынова Елена Андреевна	Красноярский государственный медицинский университет им. В.Ф.Войно-Ясенецкого Минздрава РФ E-mail: Martynova_Alena@inbox.ru	116
Михалев Антон Сергеевич	660074, Красноярск, ул. Академика Киренского, д.26, Институт космических и информационных технологий (ИКИТ СФУ) E-mail: asmikhalev@yandex.ru	73

Молявко Анна Андреевна	660041, Красноярск, Свободный пр., 79, Сибирский федеральный университет, ИМФИ E-mail: okvaylom@gmail.com	138
Непомнящий Олег Владимирович	660074, Красноярск, ул. Академика Киренского, д.26, Институт космических и информационных технологий (ИКИТ СФУ) E-mail: 2955005@gmail.com	126
Ольшанский Алексей Михайлович	109029, Москва, ул. Нижегородская, д. 27, стр. 1, Научно-исследовательский и проектно-конструкторский институт информатизации, автоматизации и связи на железнодорожном транспорте E-mail: lexolshans@gmail.com	79
Осипов Александр Леонидович	630099, Новосибирск, ул. Каменская, 56, Новосибирский государственный университет экономики и управления E-mail: alosip@mail.ru	83
Поплаухин Андрей Александрович	660041, Красноярск, Свободный пр., 79, Сибирский федеральный университет, ИФБиТ E-mail: poplaukhin@yandex.ru	138
Похабов Дмитрий Владимирович	Красноярский государственный медицинский университет им. проф. В.Ф. Войно-Ясенецкого Минздрава России, Федеральное государственное бюджетное учреждение «Федеральный Сибирский научно-клинический центр Федерального медико-биологического агентства» E-mail: neurodmit@mail.ru	87
Похабов Денис Дмитриевич	Красноярский государственный медицинский университет им. проф. В.Ф. Войно-Ясенецкого Минздрава России, Федеральное государственное бюджетное учреждение «Федеральный Сибирский научно-клинический центр Федерального медико-биологического агентства» E-mail: mr.lynnch@mail.ru	87
Разумов Владимир Ильич	Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Россия, 644077, Омск, проспект Мира 55-а E-mail: razumov@omsu.ru	100
Рубан Анатолий Иванович	660074, Красноярск, ул. Академика Киренского, д.26, Институт космических и информационных технологий (ИКИТ СФУ) E-mail: ai-rouban@mail.ru	25, 73
Румовская София Борисовна	Калининград, ул.Гостинная, д.5, Калининградский филиал ФИЦ "Информатика и управление" РАН E-mail: sophiyabr@gmail.com	67
Садовский Михаил Георгиевич	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: msad@icm.krasn.ru	31, 48, 87, 110, 116, 138
Самигулина Галина Ахметовна	050010, Республика Казахстан, г. Алматы, ул. Пушкина, 125, Институт информационных и вычислительных технологий E-mail: galinasamigulina@mail.ru	96
Самигулина Зарина	050010, Республика Казахстан, г. Алматы, ул. Пушкина,	96

Ильдусовна	125, Институт информационных и вычислительных технологий E-mail: zarinasamigulina@mail.ru	
Семенов Эдуард Васильевич	Федеральное государственное бюджетное учреждение «Федеральный Сибирский научно-клинический центр Федерального медико-биологического агентства» E-mail: semenov_krasgmu@mail.ru	116
Сенашова Мария Юрьевна	Институт вычислительного моделирования СО РАН, 660036, Красноярск, Академгородок E-mail: msen@icm.krasn.ru	31,48
Сизиков Виктор Петрович	Омский государственный университет путей сообщения, 644046, Россия, г. Омск, пр. Маркса, 35. E-mail: v_p_sizikov@mail.ru	100
Симонов Константин Васильевич	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН, т. 89135954902 E-mail: simonovkv@icm.krasn.ru	104
Сиротина Наталья Юрьевна	660074, Красноярск, ул. Академика Киренского, д.26, Институт космических и информационных технологий (ИКИТ СФУ) E-mail: aasir@mail.ru	126
Слепов Евгений Владимирович	Федеральное государственное бюджетное учреждение «Федеральный Сибирский научно-клинический центр Федерального медико-биологического агентства» E-mail: slepov99@mail.ru	116
Сухих Станислав Алексеевич	350040, г. Краснодар, ул. Ставропольская, 149, ФГБОУ ВПО «Кубанский государственный университет», E-mail: suhih_52@mail.ru	21
Трушина Вероника Павловна	630099, Новосибирск, ул. Каменская, 56, Новосибирский государственный университет экономики и управления E-mail: veronika07-92@mail.ru	83
Туник Мария Евгеньевна	Красноярский государственный медицинский университет им. проф. В.Ф. Войно-Ясенецкого Минздрава России E-mail: tsuprikova.mary.maria@yandex.ru	87
Туценко Ксения Олеговна	Красноярский государственный медицинский университет им. проф. В.Ф. Войно-Ясенецкого Минздрава России E-mail: kseniamkib@gmail.com	87
Федотовская Виктория Дмитриевна	660041, Красноярск, Свободный пр., 79, Сибирский федеральный университет, ИФБиТ E-mail: viktoriia.fedotovskaia@gmail.com	110
Феллер Алёна Александровна	Красноярский государственный медицинский университет им. В.Ф.Войно-Ясенецкого Минздрава РФ E-mail: felleraa96@mail.ru	116
Хамад Юсиф Ахмед	660074, Красноярск, ИКИТ СФУ E-mail: y.albayati8@gmail.com	104
Хантимиров Антон Геннадьевич	660074, Красноярск, ул. Академика Киренского, д.26, Институт космических и информационных технологий (ИКИТ СФУ) E-mail: anton-xant@mail.ru	126
Хорошавина Алина	Красноярский государственный медицинский универси-	87

Алексеевна	тет им. проф. В.Ф. Войно-Ясенецкого Минздрава России E-mail: horoshavina-lina-yan@ya.ru	
Черняев Денис Владимирович	Федеральное государственное бюджетное учреждение «Федеральный Сибирский научно-клинический центр Федерального медико-биологического агентства» E-mail: denisonco@mail.ru	116
Чиженкова Рогнеда Александровна	142290, г. Пущино Московской области, Институт биофизики клетки РАН E-mail: chizhenkova@mail.ru	132
Шайдуров Владимир Викторович	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН, т. 89135954902 E-mail: shaidurov04@mail.ru	138
Шпагина Татьяна Олеговна	660041, Красноярск, Свободный пр., 79, Сибирский федеральный университет, ИФБиТ E-mail: shpagusa@mail.ru	110

Научное издание

Нейроинформатика, её приложения и анализ данных

Материалы XXVII Всероссийского семинара 27 сентября – 29 сентября 2019 года

Редактор М.Ю. Сенашова
Компьютерная верстка: М.Ю. Сенашова

Подписано в печать «15» августа 2019 г. Формат 60 × 90/8. (А4)
Бумага офсетная. Печать плоская.
Усл. печ. л. 11,0. Уч.-изд. л. 11,3.
Тираж 500 экз. Заказ 15

Отпечатано в типографии ИВМ СО РАН
660036, Красноярск, Академгородок