

АНАЛИЗ ФОРМЫ КРИВЫХ ИНДУКЦИИ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ ХЛОРОФИЛЛА *a* С ПОМОЩЬЮ ИСКУССТВЕННОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ¹

Хрущев С.С., Плюснина Т.Ю., Антал Т.К.¹, Ризниченко Г.Ю.

Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, Биологический факультет, каф. биофизики, Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 12, styx@biophys.msu.ru

¹ Псковский государственный университет

Предложена нейросетевая модель для анализа формы индукционных кривых. На вход искусственной нейронной сети подавали индукционные кривые (128 нормализованных отсчетов интенсивности флуоресценции на лог-равномерной по времени шкале от 30 мкс до 2 с), зарегистрированные для отобранных из природных водоемов проб фитопланктона без токсического воздействия и по ходу продолжающегося воздействия токсикантов (CdSO_4 и $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$). Чтобы избежать «переобучения» модели, в процессе обучения к нормализованным данным добавлялся равномерно распределенный случайный шум со средним значением 0 и стандартным отклонением 0.1. Использована архитектура автокодировщика, входной и выходной блок которого представляют собой трехслойные полносвязные нейронные сети. Нейроны первого и второго слоя имеют экспоненциальную линейную функцию активации (ELU), нейроны третьего слоя – линейную функцию активации. Во входном блоке первый слой состоит из 64 нейронов, второй – из 32, третий (слой, формирующий закодированное представление входного сигнала) – из 3; в выходном – первый слой из 32 нейронов, второй – из 64, и выходной слой – из 128 нейронов. В процессе обучения модели перед подачей закодированного сигнала на выходной блок к коду добавляется равномерно распределенный случайный шум со средним значением 0 и стандартным отклонением 0.1. При обучении модели использовалась многоцелевая оптимизация. В дополнение к среднеквадратичному отклонению входного сигнала от выходного, были добавлены штрафные функции за отличие усредненного по выборке значения каждой компоненты кода от нуля и за отличие матрицы ковариации компонент кода от единичной. Также были добавлены штрафы за корреляцию отдельных компонент кода с величиной токсического воздействия на фитопланктон. В качестве штрафных функций использовался квадрат коэффициента корреляции Пирсона между дозой CdSO_4 и второй и третьей компонентами кода и между дозой $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ и первой и третьей компонентами кода. Таким образом, влияние токсикантов на форму индукционных кривых должно наиболее явно отражаться на величине первой (CdSO_4) и второй ($\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$) компонент кода, однако само существование взаимосвязи между формой кривых и действием токсиканта не навязывается в процессе обучения модели. Поэтому в целом процесс обучения можно охарактеризовать как спонтанный («обучение без учителя»). Модель реализована с помощью пакета Keras/TensorFlow. Для оптимизации параметров модели использовался стохастический метод адаптивной оценки моментов (Adam). Обучение проводилось в течение 20000 итераций (эпох). Каждый обучающий пакет включал в себя все данные выборки, так как для расчета используемых штрафных функций нужна информация обо всех анализируемых образцах. Показано, что связанные с действием токсикантов изменения формы индукционных кривых появляются уже через 2 часа инкубации, однако наблюдаемые изменения не являются специфическими для действия тяжелых металлов.

¹ Исследование выполнено в рамках научного проекта государственного задания МГУ №121032500060-0 при частичной поддержке гранта РФФИ № 20-64-46018 (Псковский государственный университет).