

Sławomir STEMPLEWSKI, Krystyna MACEK-KAMIŃSKAPOLITECHNIKA OPOLSKA, INSTYTUT UKŁADÓW ELEKTROMECHANICZNYCH I ELEKTRONIKI PRZEMYSŁOWEJ,
ul. Prószkowska 76, 45-758 Opole**Wykorzystanie sztucznej sieci neuronowej do diagnostyki związków chemicznych przy pomocy ich widm w podczerwieni****Mgr inż. Sławomir STEMPLEWSKI**

Studia ukończył w lipcu 2008 roku uzyskawszy tytuł magistra inżyniera, na kierunku informatyka Politechniki Opolskiej. Obecnie doktorant III roku stacjonarnych studiów doktoranckich prowadzonych na Wydziale Elektrotechniki, Automatyki i Informatyki Politechniki Opolskiej w dyscyplinie automatyka i robotyka. W swojej pracy zajmuje się zastosowaniem sztucznych sieci neuronowych.

e-mail: stempell@gmail.com**Dr hab. inż. Krystyna MACEK-KAMIŃSKA**

W 1983 obroniła doktorat w Instytucie Układów Elektromaszynowych Politechniki Wrocławskiej. Habilitację uzyskała w 1994r. w AGH Kraków. Specjalizuje się w stosowaniu techniki programowania obiektowego w modelowaniu i estymacji parametrów układów elektromechanicznych oraz w zagadnieniach automatyzacji napędu elektrycznego.

e-mail: k.macek-kaminska@po.opole.pl**Streszczenie**

W artykule przedstawiono możliwości zastosowania sztucznej sieci neuronowej w identyfikacji związków chemicznych metodą tzw. „odcisku palca” oraz opisano budowę opracowanego specjalnie do tego celu narzędzia z wykorzystaniem SSN, jak też sprecyzowano wymogi, jakie muszą być spełnione do jej poprawnego funkcjonowania.

Słowa kluczowe: sztuczne sieci neuronowe, identyfikacja, spektroskopia, widma, podczerwień.

Application of artificial neural networks in diagnostics of chemical compounds from their infrared spectra**Abstract**

This paper presents a combination of the “finger-print” identification method and artificial neural networks (ANN) for effective diagnostics of chemical compounds from their infrared spectra. Identification of chemical compounds on the basis of their IR spectra is a serious problem in absorption spectrophotometry, used in practical chemical analysis. Using ANN to diagnose chemical compounds opens up new abilities for effective identification, not only in terms of speeding the process up but also in view of modeling complex nonlinear signals. A programming tool is developed in Microsoft Visual C# and tested on the basis of one hundred chemical compounds used to teach the ANN. The self-learning ability of ANN is used to construct a relationship between input and output parameters. Using ANN is also possible both to ignore redundant data and those whose impact on the phenomenon is negligible, so it is focused on the input data having a major impact on the modeled process. ANN is used to diagnose one hundred chemical compounds and further studies will be focused on possible expanding the database to include some other compounds.

Keywords: artificial neural networks, identification, spectroscopy, spectrum, infrared.

1. Wstęp

Poważnym zagadnieniem spektroskopii absorpcyjnej w podczerwieni jest identyfikacja związków chemicznych na podstawie ich widm. Użycie w tym celu SSN otwiera nowe możliwości dla skutecznej identyfikacji nie tylko ją przyspieszając, ale również dając zdolność do adaptacji, czyli dopasowania wartości parametrów do zmian charakterystyk obiektu oraz do generalizacji, czyli generowania właściwych odpowiedzi na dane niewykorzystywane w procesie uczenia [2]. W cytowanej pracy przygotowano narzędzie w programie Microsoft Visual C# oraz przetestowano jego działanie, opracowano bazę stu związków chemicznych, a następnie nauczono SSN rozpoznawania ich, wykorzystując przy tym metodę identyfikacyjną tzw. „odcisku palca” według położenia (liczby falowej) wybranych pasm absorpcji o największej wartości w widmie. W dużej mierze wykorzystana została umiejętność SSN do „uczenia się samemu” zależności pomiędzy parametrami wejściowymi i wyjściowymi. Wykorzystana również została umiejętność SSN do

ignorowania danych nadmiarowych, oraz tych, których wpływ na dane zjawisko jest niezauważalny, dzięki czemu koncentruje się na danych wejściowych mających duży wpływ dla modelowanego procesu. Są to decydujące cechy SSN, dzięki którym znalazły one zastosowanie w wielu gałęziach nauki i techniki [1-4].

W niniejszym artykule przedstawiono możliwości wykorzystania SSN do diagnostyki stu związków chemicznych, a dalsze badania pozwolą potwierdzić skuteczność tej metody identyfikacyjnej.

2. Podstawowe metody identyfikacji związków chemicznych

Znane są dwie podstawowe metody identyfikacji związków chemicznych na podstawie ich widm w podczerwieni [5, 7]. Pierwsza polega na identyfikacji chemicznych grup funkcyjnych (zespołu atomów tworzących grupę) występujących w badanym związku i określeniu ich sekwencji w cząsteczkach (molekułach) związku. Identyfikacji chemicznych grup funkcyjnych dokonuje się na podstawie tablic korelacyjnych, wiążących liczbę falową maksimum poszczególnych pasm absorpcji z rodzajem grupy funkcyjnej, a ich sekwencją w molekułach na podstawie katalogu widm dla danej grupy związków chemicznych. Drugim, obecnie najczęściej stosowanym w praktyce sposobem identyfikacji widmowej związków chemicznych, jest metoda tzw. „odcisku palca” – wykorzystana w połączeniu z SSN przez autorów niniejszego artykułu.

W tradycyjnym sposobie identyfikacji metodą odcisku palca porównuje się obraz widma badanej substancji, zarejestrowanego w pełnym zakresie podczerwieni właściwej, tj. od 400 cm^{-1} do 4000 cm^{-1} , z obrazem kolejnych widm katalogowych (wzorcowych), poprzez ich nakładanie się na siebie. Proces nakładania na widmo substancji badanej kolejnych widm katalogowych prowadzi się, aż do uzyskania maksymalnej zgodności obrazu obu widm, a identyczność określana jest najczęściej w procentach pokrywania się obu obrazów (próbka – wzorzec). Inny sposób identyfikacji związków chemicznych metodą „odcisku palca” zaprezentowano w niniejszej pracy. Polega on nie na porównywaniu obrazów widmowych próbki i wzorca w pełnym zakresie podczerwieni właściwej, ale wybranych danych widmowych obu obiektów w wybranych przedziałach liczb falowych podczerwieni.

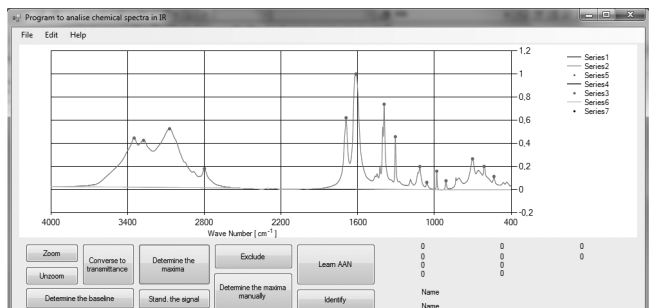
Badanie owej zgodności sprowadza się do dwóch czynności: porównania położenia wybranych najsilniejszych pasm absorpcji próbki i wzorca oraz porównania wzajemnego stosunku wysokości tych pasm do siebie. Widmo każdego związku chemicznego posiada swój niepowtarzalny zestaw pasm absorpcji oraz niezmienny stosunek wysokości poszczególnych pasm do siebie, dzięki czemu możliwa jest ich dokładna identyfikacja.

Podstawą w opracowywanej metodzie wyszukiwania widm jest twierdzenie mówiące, że jeśli dwa widma zawierają pasma absorpcji w tych samych położeniach (liczbach falowych) oraz mają stałe stosunki wysokości poszczególnych pasm to można powiedzieć, że należą do tej samej substancji chemicznej.

3. Spektralna diagnostyka substancji przez pomocy sztucznej sieci neuronowej

Rozpoczynając analizę widma należy w pierwszym kroku wyznaczyć tzw. linię bazową. Żeby ją określić należy sprawdzić czy widmo jest zapisane w skali absorpcji czy w transmisji, ponieważ jest ona wyznaczana jedynie dla widm zapisanych w absorpcji. Linia bazowa jest wyznaczana jako ciąg odcinków prostych, stycznych do minimów absorpcji w podzakresach badanego widma. Procesy te są zautomatyzowane, wystarczy, że użytkownik wybierze jedną z opcji programu. Kolejnym etapem jest wyznaczenie położenia maksimów poszczególnych pasm absorpcji, które służą w celach identyfikacyjnych, a następnie należy określić stosunek wysokości poszczególnych pasm.

Do tego celu opracowano specjalny algorytm wyszukujący punkty o maksymalnych wartościach poszczególnych pasm. W razie błędu algorytmu, czyli pominięciu lub zaznaczeniu nieodpowiednich punktów, istnieje możliwość korekcji ręcznej. Jest to przydatne narzędzie, gdyż pozwala na wyeliminowanie zakłóceń powstałych w trakcie procesu powstawania widma.



Rys. 1. Widmo zarejestrowane w absorpcji, po wstępnej analizie
Fig. 1. The Creatine spectrum recorded in the absorption, after a preliminary analysis

Na rysunku 1 pokazano obraz widma kreatyny po odpowiedniej obróbce i procesie identyfikacji. Widoczne są zaznaczone punkty o maksymalnych wartościach poszczególnych pasm, linia bazowa, od której są liczone wartości tych punktów oraz w prawym dolnym rogu odpowiedzi sztucznych sieci neuronowych na zadane wejścia. Widoczne są również przyciski uruchamiające wyżej opisane funkcje programu, takie jak: zamiana widma na absorpcyjne lub transmisyjne, wyznaczenie linii bazowej, wykluczenie zakresu liczb faliowych z poszukiwań lub wyznaczenie maksimów ręcznie, standaryzacja sygnału oraz przyciski uruchamiające uczenie SSN oraz rozpoznawanie związku przez SSN.

Proces diagnostyki (identyfikacji substancji chemicznej) przebiega przy pomocy sztucznej sieci neuronowej. Użyta w programie sieć składa się z dwudziestu wejść, które są jednocześnie dwudziestoma wartościami maksymalnymi w poszczególnych pasmach (o ile tyle występuje w widmie związku, jeśli nie, w brakujących miejscach ustawiana jest -1), z jednej warstwy ukrytej, w której używano zmiennej ilości neuronów, oraz z warstwy wyjściowej liczącej dziesięć neuronów. Uczenie odbywa się poprzez propagację wsteczną błędów. Proces uczenia sieci trwał około 25 godzin. Po tym czasie sieć na podstawie wykonanego w podczerwieni widma, bez trudu rozpoznawała każdy zadany związek chemiczny, który znajdował się w bazie.

Najbardziej znanym i skutecznym algorytmem uczenia wielowarstwowej sztucznej sieci neuronowej jest metoda wstecznej propagacji błędów [6]. Jeśli SSN została wyuczona na wąskim zakresie danych wejściowych to istnieje niebezpieczeństwo, że może nie mieć zdolności do generowania prawidłowych odpowiedzi. Natomiast jeśli została wyuczona na zbyt dużym zakresie danych wejściowych to może utracić zdolność do koncentracji na rzeczywistych zależnościach przez co dokładność modelu może ulec pogorszeniu.

Stosując odpowiednią liczbę neuronów w warstwach ukrytych można uzyskać poprawę zdolności i dokładności przewidywania sieci neuronowej, jak również przez dobór właściwej funkcji aktywacji. Podczas modelowania funkcję aktywacji z reguły wybiera twórca sieci, a wagi dopasowywane są w fazie nauki

sieci. Jednym z kryteriów odpowiedzialnych za zakończenie fazy uczenia jest wartość błędu średniokwadratowego na wyjściu sieci.

Po zakończeniu fazy uczenia sieć poddawana jest testom przy użyciu zestawu próbek, które tak jak podczas procesu uczenia, są podawane na wejścia w sposób losowy, niwelując w ten sposób ryzyko uczenia SSN „na pamięć”. Faza ta pozwala na dokonanie oceny stopnia „nauczenia” analizowanych zależności przez sieć.

Tak przygotowana SSN jest gotowa do wykorzystania dla celów uzyskania gotowej odpowiedzi jako reakcji na podany sygnał wejściowy. Wykorzystanie zbudowanej w ten sposób SSN pozwala uzyskać dobre wyniki w diagnostyce związków chemicznych przy jednocześnie krótkim czasie obliczeń i niskich wymaganiach sprzętowych.

4. Wnioski i kierunek dalszych badań

Dzięki zastosowaniu metody tzw. „odcisku palca” przy identyfikacji związków chemicznych na podstawie ich widm w podczerwieni, a ściślej parametrów widmowych takich jak położenia maksimów poszczególnych pasm i stosunek ich absorpcji oraz wykorzystaniu sztucznej sieci neuronowej udało się zidentyfikować sto losowo wybranych związków chemicznych. Metoda identyfikacji oparta na SSN wykorzystuje jedną ze swoich podstawowych zalet, czyli uogólnianie zdobytej wiedzy, która polega na wskazywaniu najbardziej podobnego związku chemicznego do szukanego znajdującego się w bazie danych programu. W metodzie „odcisku palca” porównuje się całe zakresy ze sobą i sprawdza w jakim stopniu pokrywają się one, natomiast SSN porównuje położenie i wysokość 20 najwyższych punktów maksymalnych oraz jest bardziej wyczułona na małe zmiany, dzięki czemu lepiej identyfikuje mieszaniny związków, co doskonale widać na przykładzie mieszanin związków. SSN sama „uczy się” znajdowania zależności pomiędzy związkami i ich rozpoznawania, a uszkodzenie nie ma wpływu na jej poprawne działanie. SSN znalazła zastosowanie w wielu dziedzinach nauki, tym razem w dziedzinie chemii analitycznej.

Oprogramowanie przygotowane do tego celu może być użytecznym narzędziem przy szybkim rozpoznawaniu związków chemicznych np. w laboratoriach kryminalistycznych, dzięki wykorzystaniu zalety SSN do uogólniania zdobytej wiedzy, czyli wskazywania podobnych związków chemicznych do tych znajdujących się w bazie danych programu. Program wskazuje drogę dalszych badań, poprzez zakwalifikowanie badanej substancji do danej grupy związków chemicznych. Dalsze badania skupią się na węższym zastosowaniu programu i sprawdzeniu jak SSN poradzi sobie z trudniejszymi, bardziej złożonymi zagadnieniami, zwłaszcza w analizie układów dwu i więcej składnikowych.

Praca współfinansowana ze środków Europejskiego Funduszu Społecznego



KAPITAŁ LUDZKI
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI



UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI
FUNDUSZ SPOŁECZNY



5. Literatura

- [1] Chudzik S., Gryś S., Minkina W.: Wykorzystanie sztucznych sieci neuronowych w zagadnieniu odwrotnym dyfuzji ciepła, PAK 2009 nr 02, 83-88.
- [2] Rojek R., Bartecki K., Korniak J.: Metody sztucznej inteligencji w zastosowaniach automatyki, PAK 2006 nr 10, s. 29-34.
- [3] Bartecki K., Czorny M.: Implementacja sztucznej sieci neuronowej w architekturze równoległej z wykorzystaniem protokołu MPI, PAK 2011 nr 06, s. 638-640.
- [4] Giergiel M., Małka P.: Sztuczne sieci neuronowe w sterowaniu mini robota kołowego, PAK 2004 nr 05, s.20-24.
- [5] Kęcki Z.: Podstawy spektroskopii molekularnej, Wydawnictwo PWN Warszawa 1998.
- [6] Tadeusiewicz R.: Odkrywanie właściwości sieci neuronowych przy użyciu programów w języku C#, Polska Akademia Umiejętności, Kraków 2007.
- [7] Silverstein R., Webster F., Kiemle D.: Spektroskopowe metody identyfikacji związków organicznych, Wydawnictwo Naukowe PWN Warszawa 2007.

otrzymano / received: 06.02.2012

przyjęto do druku / accepted: 03.12.2012

artykuł recenzowany / revised paper