

**POLITECHNIKA OPOLSKA**  
**WYDZIAŁ ELEKTROTECHNIKI, AUTOMATYKI I INFORMATYKI**

**MGR INŻ. SŁAWOMIR STEMPEWSKI**

**ZASTOSOWANIE SZTUCZNYCH SIECI  
NEURONOWYCH DO DIAGNOSTYKI ZWIĄZKÓW  
CHEMICZNYCH**



**ROZPRAWA DOKTORSKA**

PROMOTOR:  
**DR HAB. INŻ. K. MACEK-KAMIŃSKA - PROF. PO**

Autor jest stypendystą projektu *Stypendia doktoranckie - inwestycja w kadrę naukową województwa opolskiego* współfinansowanego przez Unię Europejską w ramach Europejskiego Funduszu Społecznego



**Opole 2014**

*Składam serdeczne podziękowania dla Pana doktora Marka Sudoła oraz dla Pana magistra Marka Grzymka za umożliwienie przeprowadzenia badań chemicznych oraz cenne wskazówki i okazaną pomoc.*

*Dziękuję Rodzicom za wsparcie i zachętę.*

*Szczególne podziękowania składam Aleksandrze za cierpliwość, wyrozumiałość i wsparcie w chwilach zwątpienia.*

<b>1. Wprowadzenie.....</b>	<b>5</b>
<b>2. Cel, teza i założenia pracy .....</b>	<b>7</b>
2.1 Teza pracy.....	7
2.1 Cel i zakres pracy .....	7
<b>3. Przegląd stanu wiedzy w obszarach związanych z problematyką rozprawy .....</b>	<b>10</b>
3.1 Sieci neuronowe – wybrane zagadnienia .....	10
3.2 Spektroskopia podczerwona .....	13
<b>4. Model neuronowy procesu interpretacji widm IR .....</b>	<b>18</b>
4.1 Identyfikowany obiekt.....	20
4.2 Planowanie eksperymentu .....	22
4.2.1 <i>Planowanie eksperymentu dla tworzenia modeli neuronowych</i> .....	23
4.2.2 <i>Analiza wpływu parametrów wejściowych na parametry wyjściowe</i> .....	25
4.3 Wybór wektorów parametrów wejściowych i wyjściowych sieci neuronowej ....	26
4.4 Badania symulacyjne.....	27
4.4.1 <i>Dobór struktury sieci neuronowej</i> .....	27
4.4.2 <i>Sztuczna sieć neuronowa z jednokierunkowym przepływem sygnałów</i> .....	28
4.4.3 <i>Wybór funkcji przejścia neuronów w warstwach ukrytych</i> .....	32
4.4.4 <i>Dobór metody uczenia sztucznych sieci neuronowych</i> .....	33
4.4.5 <i>Badanie powtarzalności poziomu błędów uzyskiwanych w procesie uczenia</i>	35
<b>5. Program do interpretacji widm w podczerwieni.....</b>	<b>38</b>
5.1 Interfejs użytkownika .....	39
5.1.1 <i>Funkcje panelu głównego</i> .....	43
5.1.2 <i>Funkcje panelu normalizacji sygnału</i> .....	44
5.2 Zasady działania programu.....	45
5.3 Uczenie sztucznej sieci neuronowej.....	50

5.3.1	<i>Dane uczące</i> .....	51
5.3.2	<i>Modyfikacja algorytmu uczenia</i> .....	52
<b>6.</b>	<b>Badania eksperymentalne</b> .....	<b>54</b>
6.1	Analiza układów jednoskładnikowych .....	54
6.2	Analiza układów dwuskładnikowych .....	63
6.3	Analiza układów trzyskładnikowych.....	69
	Podsumowanie przeprowadzonych eksperymentów .....	77
<b>7.</b>	<b>Wnioski i kierunki dalszych badań</b> .....	<b>79</b>
	<b>Literatura</b> .....	<b>82</b>

# 1. Wprowadzenie

Podczerwień, która jest coraz ważniejszym narzędziem analizy związków chemicznych, jest częścią widma promieniowania elektromagnetycznego mieszczącą się pomiędzy zakresem promieniowania widzialnego, a promieniowaniem mikrofalowym. Istnieje wiele metod interpretacji widm w podczerwieni, lecz w dalszym ciągu stosowanie ich niesie ze sobą duże ryzyko popełnienia błędu[10, 14, 58, 70].

W dotychczas stosowanym oprogramowaniu diagnostycznym całe widma związków chemicznych lub zakresy wybrane przez użytkownika są porównywane z widmami znajdującymi się w bibliotece opracowanej przez użytkownika lub zakupionej u producenta oprogramowania. Jest to metoda interpretacyjna tzw. „odcisku palca”. Wadą i zarówno zaletą tej metody identyfikacyjnej jest brak konieczności, jak i brak możliwości nauki prawidłowego rozpoznawania widm związków chemicznych. Jeśli algorytm programu przeszukującego bibliotekę nie radzi sobie z prawidłowym rozpoznawaniem widma pewnego związku i błędnie je interpretuje to użytkownik nie ma możliwości korekcji działania programu. W takim przypadku niezależnie od sposobu przygotowania widma program zawsze popełnia ten sam błąd. Natomiast jeśli widmo identyfikowanego związku nie znajduje się w bazie danych to jako wynik podawane jest widmo najbardziej do niego podobne, co nie znaczy, że związek znaleziony w bibliotece ma strukturę podobną do związku znajdującego się w badanej próbce. Z powyższych powodów zasadne jest wykorzystanie zalet sztucznej inteligencji oraz spektroskopii podczerwieni (*Fourier Transform Infrared Spectroscopy* – FTIR), poprzez zmodyfikowanie metody interpretacyjnej widm i połączeniu jej ze sztucznymi sieciami neuronowymi (SSN). Umożliwi to identyfikację substancji i pozwoli rozwiązywać problemy, z którymi dotychczas stosowane oprogramowanie diagnostyczne nie dawało sobie rady.

Dzięki takiej konfiguracji można uzyskać efektywne narzędzie diagnostyczne wspomagające podjęcie właściwej decyzji co do identyfikacji struktury chemicznej. Problematyka ta zawiera się w programie strategicznym Komitetu Automatyki i Robotyki Polskiej Akademii Nauk [23]. Wśród wymienionych zadań swoje miejsce znalazło planowanie, zachowania elementarne i wspomaganie decyzji, a wymienione w tym punkcie zadania to m.in.:

- Algorytmy planowania i wykorzystujące dane z czujników – szybkie planowanie repetycyjne.
- Plany współbieżne.
- Definicja zachowań elementarnych.
- Harmonogramowanie.
- Wykorzystanie istniejących zasobów wiedzy do podejmowania decyzji.

W pracy poruszono zagadnienia związane z wykorzystaniem SSN do diagnostyki związków chemicznych i ich mieszanin, a więc wykorzystano istniejący zasób wiedzy i opracowano narzędzie wspomagające podejmowanie decyzji[24].

W niniejszej pracy zostanie podjęta próba zastosowania SSN do opracowania modelu numerycznego procesu o nieliniowej charakterystyce, jedynie na podstawie danych pomiarowych zebranych z jego wejść i wyjść. Bywa, że jest to jedyna użyteczna metoda dla celów opracowania praktycznego modelu zjawiska. Analogie wykorzystywane przez metody identyfikacji związków chemicznych zostały wykorzystane do zamodelowania przy pomocy SSN procesu interpretacji widm wybranych substancji chemicznych, które charakteryzują się występowaniem dużych nieliniowości. Sztuczna inteligencja jest coraz powszechniej stosowana do modelowania i opisu zjawisk chemicznych [2, 13, 19, 39, 40, 41, 42, 43, 53, 67], stąd wniosek, że zastosowanie SSN daje dobre rezultaty, a modele uzyskane tą drogą są z powodzeniem wykorzystywane w praktyce.

## **2. Cel, teza i założenia pracy**

### **2.1 Teza pracy**

W pracy zostanie udowodniona następująca teza:

**„Zastosowanie sztucznych sieci neuronowych i metody diagnostyki na podstawie tzw. „odcisku palca”, umożliwi opracowanie modelu neuronowego, który pozwala na efektywną identyfikację związków chemicznych wykorzystując ich widma absorpcyjne w podczerwieni.”**

### **2.1 Cel i zakres pracy**

**Celem pracy jest opracowanie modelu neuronowego umożliwiającego diagnostykę związków chemicznych, na podstawie ich widm w podczerwieni, przy użyciu SSN.**

Identyfikacja obiektu przy użyciu SSN polega na opracowaniu modelu numerycznego na podstawie danych pomiarowych wejść i wyjść obiektu. Takie modelowanie wymaga zebrania danych uczących dla sieci. Do tej pory badacze wykorzystywali SSN do rozpoznawania chemicznych grup funkcyjnych i podawali na wejściu sieci duże zakresy widm w podczerwieni, przez co program nie wiele różnił się od standardowego podejścia do procesu identyfikacji związków chemicznych. Autor niniejszej pracy wraz z zespołem badawczym z Wydziału Chemii Uniwersytetu Opolskiego zmodyfikował metodę identyfikacyjną pozwalającą zmniejszyć wielkość wektora uczącego, a jednocześnie zachować wysoki procent efektywności diagnostyki. Udało się w ten sposób zaprogramować narzędzie do wspomagania podjęcia decyzji, wykorzystujące o wiele mniejszą ilość wartości charakterystycznych obiektu zachowując przy tym właściwości SSN takich jak uogólnianie zdobytej wiedzy oraz odporność na zakłócenia i uszkodzenia.

W celu wykazania słuszności postawionej tezy zaproponowano następujące prace przygotowawcze oraz ściśle badawcze:

- Przegląd literatury.
- Badanie istniejących metod identyfikacji związków chemicznych oraz propozycja modyfikacji i analizy nowej metody identyfikacyjnej.
- Opracowanie oprogramowania komputerowego do wstępnej analizy i diagnostyki związków chemicznych oraz do przebadania otrzymanych wyników. Następnie modyfikacja algorytmu uczenia SSN, aby poprawić efektywność rozpoznawania oraz, żeby uniknąć problemu z nadmiernym dopasowaniem SSN.
- Analiza wyników w oparciu o dane uzyskane z przebiegu identyfikacji substancji jednoskładnikowych, dwuskładnikowych oraz trzyskładnikowych.
- Ocena efektywności zaproponowanego rozwiązania.

Poniżej znajduje się opis poszczególnych rozdziałów rozprawy.

W rozdziale trzecim został przedstawiony przegląd stanu wiedzy na temat wybranych zagadnień i ich zastosowań sztucznych sieci neuronowych. Opisano ich zalety i możliwości, dzięki którym znajdują coraz szersze zastosowanie we współczesnym świecie. Rozdział poświęcony jest również spektrofotometrii absorpcyjnej w podczerwieni, aparaturze do rejestracji widm podczerwonych, dotychczasowe metody identyfikacyjne związków chemicznych, przykładowe widma zapisane w układzie absorpcji i w układzie transmisji oraz zależności zachodzące pomiędzy nimi.

Rozdział czwarty zawiera opis modelu neuronowego procesu interpretacji widm w podczerwieni, w jaki sposób identyfikowany jest obiekt, planowanie eksperymentu oraz analizę wpływu parametrów, dobór optymalnych wektorów parametrów wejściowych i wyjściowych sieci neuronowej oraz badania symulacyjne – dobór struktury sieci, dobór funkcji przejścia neuronów w warstwach ukrytych, dobór metody uczenia oraz badanie powtarzalności poziomu błędu w procesie uczenia.

W rozdziale piątym przedstawiono autorski program do diagnostyki związków chemicznych, jego interfejs, opis działania funkcji panelu głównego i panelu normalizacji sygnału, zasady działania programu, w jaki sposób uczona jest sztuczna sieć neuronowa, w



jaki sposób przygotowywane są dane uczące oraz opisano modyfikację algorytmu uczącego.

Rozdział szósty poświęcony jest badaniom eksperymentalnym, przeprowadzono analizę identyfikacyjną układów jedno, dwu i trzyskładnikowych. Dla analizy jednoskładnikowej opracowano bazę pięćdziesięciu widm w podczerwieni. Następnie wykorzystano ją do nauczania sztucznej sieci neuronowej prawidłowych odpowiedzi na zadany sygnał wejściowy. Analiza układów dwuskładnikowych skupiła się na dwóch substancjach - kreatynie oraz amfetaminie. Do nauki wykorzystano w/w substancje oraz ich mieszaniny, co dało łącznie szesnaście próbek. Pomysł na analizę dwuskładnikową narodził się podczas wizyty autora w Laboratorium Kryminalistycznym Policji w Opolu, gdzie zaobserwowano zapotrzebowanie na badanie tego typu układów. Głównym powodem wyboru akurat tych dwóch związków chemicznych była ich zbliżona budowa, powodująca, że pasma absorpcji widm nakładają się na siebie, utrudniając przez to ich identyfikację. Analiza układów trzyskładnikowych została przeprowadzona na bazie liczącej dziesięć jednoskładnikowych związków chemicznych. Jej celem było sprawdzenie skuteczności działania procesu interpretacji dla widm mieszaniny trzech substancji chemicznych.

W rozdziale siódmym znajduje się podsumowanie niniejszej rozprawy doktorskiej i kierunki dalszych badań.

### **3. Przegląd stanu wiedzy w obszarach związanych z problematyką rozprawy**

#### **3.1 Sieci neuronowe – wybrane zagadnienia**

Sztuczne sieci neuronowe znane są już człowiekowi mniej więcej od połowy XX wieku. Są systemem, który wykonuje określone obliczenia na zasadzie równoczesnej pracy wielu połączonych ze sobą elementów. Jest zbudowana z wielu neuronów, lecz bardzo uproszczonych w stosunku do oryginału, oraz połączonych znacznie prościej ze sobą. Podobna budowa została zaobserwowana w biologicznym systemie nerwowym, który po dzień dzisiejszy pozostaje niedoścignionym wzorcem[33, 77].

Stale zwiększająca się w ostatnich latach popularność sztucznych sieci neuronowych, coraz szersze ich zastosowanie w wielu dziedzinach nauki oraz przemysłu, jak finanse, medycyna, technika, geologia, chemia czy fizyka ma swoje uzasadnienie. Są one wykorzystywane zazwyczaj wtedy, gdy pojawiają się problemy związane z analizą i przetwarzaniem danych, z ich predykcją, klasyfikacją lub też sterowaniem. Swoją sukces sieci neuronowe zawdzięczają dwóm czynnikom[12]:

- mocy – jest bardzo zaawansowaną techniką modelowania, która jest zdolna do odwzorowania nawet najbardziej złożonych funkcji. Mają również charakter nieliniowy, co dodatkowo wzbogaca możliwości ich zastosowania.
- prostocie – w praktyce same konstruują potrzebne użytkownikowi modele, gdyż uczą się automatycznie na podanych przez niego przykładach.

Zastosowanie sztucznych sieci neuronowych do rozwiązania problemów m.in. z analizą i przetwarzania danych jest związane z ich właściwościami, które można podzielić według różnych kryteriów [26]. Jedną z cech sieci jest ich zdolność do adaptacji i samoorganizacji, która jest wykorzystywana w wielu zastosowaniach. Kolejną cechą jest zmniejszona wrażliwość na uszkodzenia elementów, natomiast najistotniejszą zaletą jest ich zdolność do pracy równoległej, co umożliwia znaczne przyspieszenie obliczeń większości zadań, do których są stosowane. Kolejny atut sztucznych sieci neuronowych to wygoda ich programowania poprzez uczenie, które odbywa się poprzez stawianie sieci przykładowych

zadań i automatycznie, zgodnie z obraną strategią uczenia, modyfikuje się połączenia elementów sieci i ich współczynniki wagowe. Działając w ten sposób sieć uczy się sama, co nieraz prowadzi do znalezienia rozwiązania w bardzo krótkim czasie, a niejednokrotnie wymaga tysięcy iteracji, lecz zawsze przebiega w sposób samoczynny, dzięki czemu nie absorbuje czasu człowieka szukającego określonych rozwiązań.

Sztuczne sieci neuronowe są doskonałym narzędziem do rozwiązywania zadań, w których na podstawie szeregu czasowego rozważanych wielkości, pochodzących z przeszłości, należy przewidzieć przyszłe wartości interesującej wielkości fizycznej, biologicznej lub ekonomicznej [66, 34]. W wielu pracach można znaleźć różne zastosowania SSN, jak np.: do prognozowania, analizy i interpretacji badań medycznych, biologicznych, psychiatrycznych, sterowania robotami i wiele innych [26].

Poniżej podano listę zastosowań sztucznych sieci neuronowych w praktyce [63]:

- NASA wykorzystuje SSN do sterowania ramieniem robota, którego zadaniem jest chwytanie przedmiotów znajdujących się w dowolnym położeniu, a pewność chwytu jest uzależniona od stopnia zgodności orientacji przestrzennej osi przedmiotu i elementów chwytaka.
- Podobnie SSN została zastosowana przez uczonych z New York University Medical Center. Zastosowano ją jako alternatywę dla złożonych tensorowych obliczeń dotyczących parametrów ruchu ramienia robota w celu znacznego przyśpieszenia działania systemu sterowania, który dzięki zastosowaniu sieci może działać w czasie rzeczywistym.
- Firma General Dynamics opracowała dla potrzeb US Navy oparty na SSN system klasyfikujący rozpoznający sygnały sonarowe – pozwala on identyfikować szумы charakterystyczne dla napędów różnych typów statków i okrętów.
- Naukowcy z Univeristy of Pennsylvania we współpracy z firmą TRW zbudowali SSN, która potrafi rozpoznawać samoloty z taką dokładnością, że podstawą do bezbłędnej identyfikacji może być detal wielkości 18 cali zaobserwowany z odległości 50 mil.

- Szpital Anderson Memorial Hospital w Południowej Karolinie wykorzystał SSN do optymalizacji procesu leczenia, zyskując miliony dolarów oszczędności i ratując życie kilkudziesięciu ludzi.
- Firma General Devices Space Systems Division zajmująca się produkcją raket, użyła SSN do sterowania pracą 150 zaworów doprowadzających paliwo i tlen do silników rakiety Atlas.
- Firma Eaton Corporation zastosowała SSN do układu sterowania pozwalającego na wspomaganie kierowcy dużej ciężarówki przy wykonywaniu niektórych szczególnie trudnych manewrów.
- US Air Force (amerykańskie siły powietrzne) stosują SSN do rozwoju symulatorów lotów.
- Koncern Ford Motor Company wykorzystał SSN w nowym systemie diagnostycznym swoich silników.
- Linia TWA stosuje SSN do poszukiwania bomb w swoim terminalu na lotnisku JFK w Nowym Jorku.

### 3.2 Spektroskopia podczerwona

Podczerwień jest to część widma promieniowania elektromagnetycznego mieszcząca się pomiędzy zakresem promieniowania widzialnego, a promieniowaniem mikrofalowym. W chemii analitycznej największe znaczenie ma zakres podczerwieni właściwej (zwanej też podczerwienią średnią), mieszczącej się między liczbami falowymi 4000 a 400  $\text{cm}^{-1}$ , lecz ostatnimi czasy odnotowano wzrost zainteresowania bliską (14290 – 4000  $\text{cm}^{-1}$ ) oraz daleką podczerwienią (400 – 100  $\text{cm}^{-1}$ ) [58]. Całe widmo promieniowania elektromagnetycznego jest podzielone na szereg zakresów, a granice między nimi są wyznaczone przez granice odpowiednich doświadczalnych metod wytwarzania oraz wykrywania promieniowania (Tabela 3.1). Należy zaznaczyć, że dane zawarte w tabeli nie są zbyt ściśle i powinno się je traktować jako granice orientacyjne, gdyż terminologia ta jest używana w różny sposób w różnych zastosowaniach [14].

Widma absorpcyjne można rejestrować w układzie jednostek absorbancji (A) lub transmitancji (T) jako rzędnych, w zależności od długości fali  $\lambda$  lub jej odwrotności  $1/\lambda$ , tj. liczb falowych – jako odciętych. Transmitancja jest stosunkiem energii przepuszczonej przez próbkę do energii padającej na próbkę, natomiast absorbancja jest logarytmem dziesiętnym odwrotności transmitancji [58]:

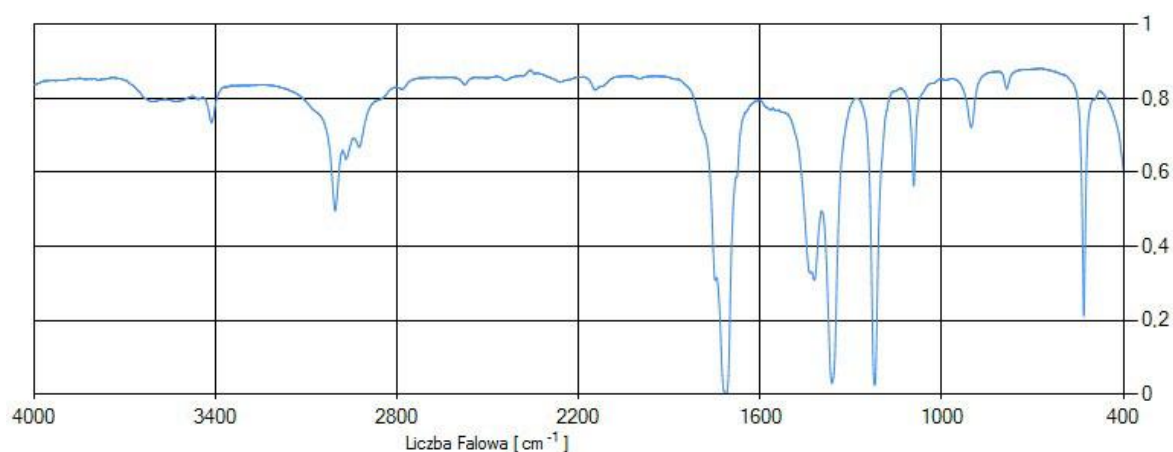
$$A = \log \frac{1}{T} \quad (3.1)$$

Zazwyczaj intensywność pasm jest określany w sposób półilościowy: s – silne (ang. *strong*), m – średnie (ang. *medium*) oraz w – słabe (ang. *weak*).

**Tabela 3.1.** Zakresy widma elektromagnetycznego [14]

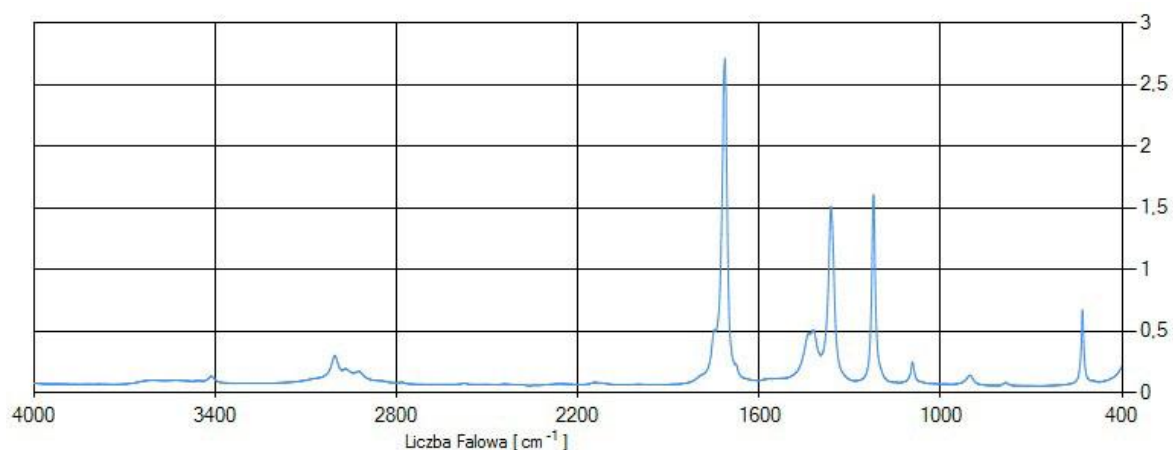
Nazwa	Zakres w jednostkach długości fal		Zakres w jednostkach częstości, Hz	Zakres w liczbach faliowych, $\text{cm}^{-1}$
	zwykle stosowane jednostki	metry		
Fale radiowe	1 – 1000 m	$1 - 10^3$	$10^8 - 10^5$	
Mikrofale	0,1 – 100 cm	$1 \cdot 10^{-3} - 1$	$10^{11} - 10^8$	$10 - 10^2$
Daleka podczerwień	30 – 1000 $\mu\text{m}$	$3 \cdot 10^{-5} - 1 \cdot 10^{-3}$	$6 \cdot 10^{12} - 10^{11}$	400 - 100
Średnia podczerwień (właściwa)	5 – 30 $\mu\text{m}$	$2,5 \cdot 10^{-6} - 5 \cdot 10^{-5}$	$1,2 \cdot 10^{14} - 6 \cdot 10^{12}$	4000 – 400
Bliska podczerwień	0,7 – 5 $\mu\text{m}$	$7,5 \cdot 10^{-7} - 2,5 \cdot 10^{-6}$	$4 \cdot 10^{14} - 1,2 \cdot 10^{14}$	14290 - 4000
Światło widzialne	400 – 750 nm	$4 \cdot 10^{-7} - 7,5 \cdot 10^{-7}$	$7,5 \cdot 10^{14} - 4 \cdot 10^{14}$	25000 - 14290
Bliski nadfiolet	200 – 400 nm	$2 \cdot 10^{-7} - 4 \cdot 10^{-7}$	$10^{15} - 7,5 \cdot 10^{14}$	
Daleki nadfiolet	10 – 200 nm	$10^{-8} - 2 \cdot 10^{-7}$	$10^{16} - 10^{15}$	
Promieniowanie rentgenowskie	10nm – 5 pm	$10^{-12} - 10^{-8}$	$10^{20} - 10^{16}$	

Na rysunku 3.2. przedstawiono przykładowe widmo absorpcyjne acetonu [ $\text{CH}_3\text{-C(O)-CH}_3$ ] zarejestrowane w układzie transmitancji.



**Rys.3.2.** *Widmo absorpcyjne acetonu zarejestrowane w układzie transmitancji*

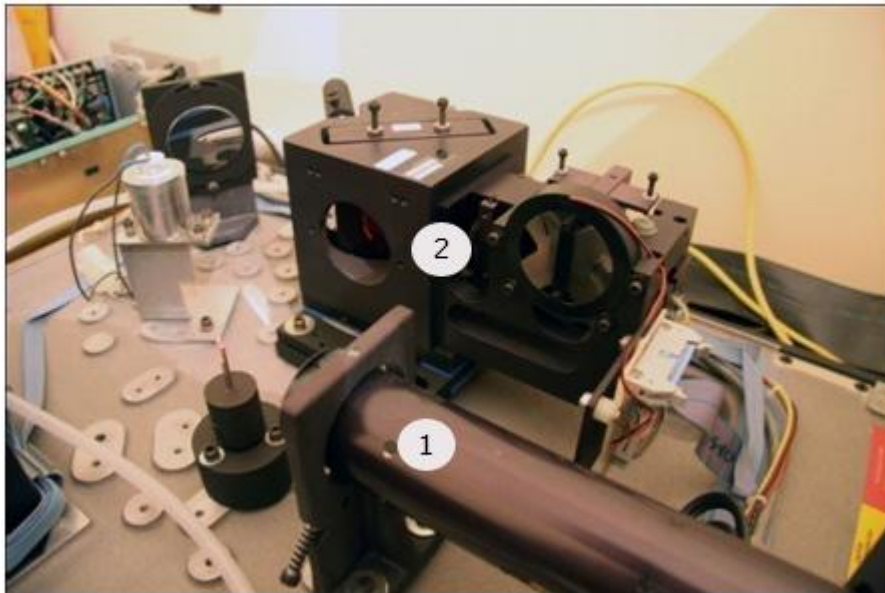
Na rysunku 3.3. przedstawiono to samo widmo absorpcyjne acetonu, lecz zarejestrowane w układzie absorbancji.



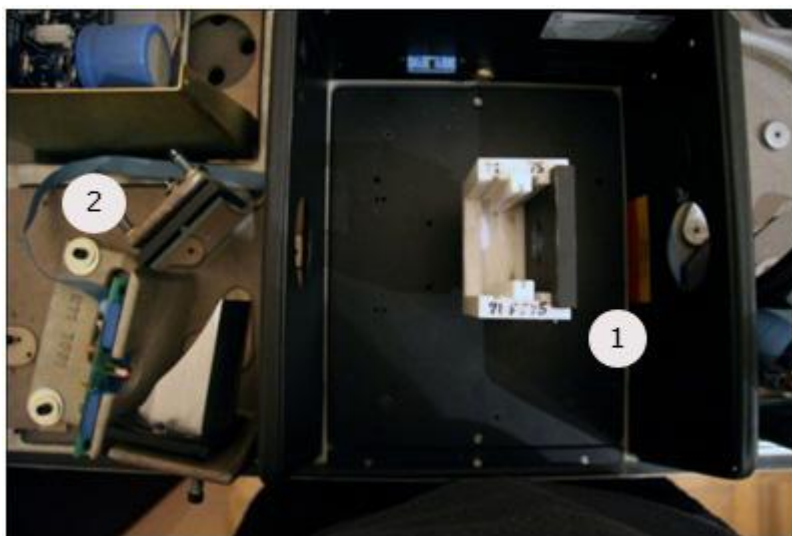
**Rys. 3.3.** *Widmo absorpcyjne Acetonu zarejestrowane w układzie absorbancji*

Przez ostatnie lata nastąpił rozwój spektrometrii w podczerwieni z transformacją Fouriera (FT IR), która posiada wiele istotnych zalet, gdyż cały zakres promieniowania przechodzi przez próbkę jednocześnie, co skraca czas analizy w porównaniu ze spektrometrami dyspersyjnymi [21, 74]. Jest to możliwe ponieważ nie stosuje się monochromatora. Osiąga się również bardzo wysoką zdolność rozdzielczą. Dane poddawane są konwersji z wersji analogowej na wersję cyfrową, dzięki czemu są łatwe do przetwarzania. Aby po-

zbyć się przypadkowych zakłóceń można zsumować wyniki wielu skanów, dzięki czemu uzyskane zostanie bardzo dobrej jakości widmo z małej ilości próbki.



**Rys. 3.4.** Na pierwszym planie widoczny jest laser (1) oraz interferometr (2) w przykładowym spektrometrze FT IR



**Rys. 3.5.** Miejsce na próbkę (1) oraz detektor energii promieniowania IR (2) w przykładowym spektrometrze FT IR

Istnieje wiele metod interpretacji widm w podczerwieni, jednak aby móc z nich skorzystać muszą być spełnione określone warunki preparacji próbek i ich skanowania:

- widmo musi posiadać odpowiednią rozdzielczość i intensywność pasm absorpcji,



- widmo powinno być otrzymane ze związku, który posiada odpowiednią czystość,
- spektrometr powinien być odpowiednio skalibrowany,
- musi być znany proces przygotowania próbki, jeśli użyto rozpuszczalnika to powinno się podać jego rodzaj, stężenie próbki i grubość kuwety.

Znane są dwie podstawowe metody diagnostyki związków na podstawie ich widm w podczerwieni [58, 73]. Pierwsza dotyczy określenia chemicznych grup funkcyjnych (zespołów atomów) na podstawie położenia (liczby falowej) maksimum pasm absorpcji charakterystycznych dla tych grup funkcyjnych występujących w widmach. Druga metoda tzw. „odcisku palca”, polega na porównaniu widma badanej substancji z widmami katalogowymi substancji wzorcowych, aż do uzyskania maksymalnej zgodności obu widm. Jeśli dwa widma zawierają pasma absorpcji w tych samych położeniach oraz mają stałe stosunki wysokości poszczególnych pasm to można powiedzieć, że oba widma należą do tej samej substancji chemicznej.

## 4. Model neuronowy procesu interpretacji widm IR

Złożoność rozpatrywanego procesu nie pozwoliła na wystarczająco dokładne opisanie go za pomocą modeli matematycznych, które uwzględniałyby zachodzące w nim zjawiska fizyczne i chemiczne, dlatego zdecydowano się zastosować alternatywną metodę modelowania z wykorzystaniem sztucznych sieci neuronowych. W literaturze można znaleźć próby rozwiązania problemu identyfikacji tego procesu [67], jednakże skupiono się w nich na rozpoznawaniu fragmentów struktur, a nie całych substancji. Autor niniejszej pracy zaproponował również pionierską metodę rozpoznawania związków chemicznych wykorzystującą zależności występujące w widmach IR. Przeprowadzone badania pozwoliły określić parametry wejściowe badanego procesu oraz odpowiedzi sieci neuronowych.

Sztuczne sieci neuronowe posiadają cechy, które mogą stanowić przydatne narzędzie do analizy, modelowania i prognozowania zjawisk. Celowość ich zastosowania wynika ze sposobu budowy i funkcjonowania modeli neuronowych [12]:

- Nieliniowy charakter zjawisk, co stanowi podstawową przesłankę do tego, aby do modelowania tych zależności stosować narzędzia przystosowane do opisu zależności nieliniowych. Jednokierunkowe sieci neuronowe są jednym z narzędzi spełniających ten warunek. W porównaniu z innymi technikami budowy nieliniowych modeli, zależności sieci neuronowych wyróżniają się tym, że ich użycie nie wymaga odwoływania się do żadnych trudno sprawdzalnych założeń i hipotez, warunkujących użycie alternatywnych technik. Na opisanych w literaturze przykładach wykazano, że sztuczne sieci neuronowe posiadają zdolność do aproksymacji dowolnych zależności nieliniowych, jak również charakteryzują się zdolnościami do generalizacji wyników uczenia z danych treningowych na dane, które są sieci pokazywane po raz pierwszy dopiero na etapie jej roboczej eksploatacji.
- Proces budowy modelu polega na eksploracji dostępnych zbiorów danych i prowadzi do automatycznego oszacowania na tej podstawie modelu opisującego stwierdzone zależności i współzależności. Stosowanie ich nie wymaga w związku z tym znajomości postaci funkcji opisującej istniejącą prawidłowość,

czego w efekcie modele neuronowe mogą znaleźć zastosowanie wszędzie, gdzie nie jest znane dokładne prawo opisujące kształtowanie się badanych zależności. Nie wyklucza się oczywiście stosowanie sztucznych sieci neuronowych również w przypadkach, gdy znana jest postać formuł matematycznych opisujących badany aspekt rzeczywistości, lecz wówczas nakłady związane z oszacowaniem modelu sieciowego mogą być wyższe niż nakłady niezbędne do obliczenia parametrów danych w postaci równania matematycznego.

- Modele neuronowe mają charakter adaptacyjny, więc mogą służyć do opisu zależności i systemów zmieniających się w czasie. W chwili pojawienia się nowych danych może zostać przeprowadzony proces douczenia sieci, co umożliwia uwzględnienie w modelu informacji zawartych w aktualnych obserwacjach. Proces ten nie jest równoznaczny z ponowną estymacją modelu, lecz może być traktowany jako niewielka korekta, która ma na celu uwzględnienie zmian w modelu neuronowym powstałych w rzeczywistym systemie.
- Sztuczna sieć neuronowa może być traktowana nie tylko jako mechanizm opisujący przebieg zjawiska i generujący przyszłe jego wartości, lecz daje ona również możliwości przeprowadzania wszechstronnej analizy badanego fragmentu rzeczywistości. Istniejące metody analizy pozwalają przy wykorzystaniu modelu neuronowego dokładnie analizować zjawiska we wszelkich wybranych przez badacza układach.
- Złożoność systemów jest cechą, która nie może zostać pominięta w analizie, ponieważ wnioski, jakie dawało się ustalić na podstawie zależności uproszczonych zostały już sformułowane i wykorzystane. W związku z czym dalszy postęp może być osiągnięty głównie dzięki przeanalizowaniu określonych systemów i procesów, z uwzględnieniem wcześniej pomijanych czynników, które tak naprawdę decydują o złożoności odpowiednich modeli. Uwzględnienie subtelnych współzależności, drobnych nieliniowych, pomijanych uprzednio interakcji, powoduje znaczne skomplikowanie tworzonych modeli i teorii, lecz wraz ze wzrostem złożoności dowolnego modelu bardzo szybko rośnie zapotrzebowanie na moc obliczeniową do jego oszacowania. W przypadku stosowania sieci neuronowych kwestia zwiększającego się zapotrzebowania na moc

obliczeniową związaną z rozbudową modelu nie jest tak krytyczna. Rosnąca złożoność modelu może być rozwiązana dwoma sposobami:

- W sposób ilościowy, wyrażający się wykorzystaniem sieci wykonywanych metodami sprzętowymi lub zwiększaniem mocy obliczeniowej komputerów wykorzystywanych do budowy symulacyjnych modeli sieci.
- W sposób jakościowy, który polega na zmianie algorytmów neuronowego przetwarzania informacji – algorytmy sekwencyjne opisujące działanie sieci mogą być zastąpione poprzez łatwe do sporządzenia procedury równoległe, które określają jak w sposób rozproszony realizować modelowanie sieci i jak współbieżnie modyfikować wagi neuronów w trakcie uczenia. Zastosowanie zrównoleglenia procesu uczenia sieci powoduje bardzo duże oszczędności czasowe.

#### **4.1 Identyfikowany obiekt**

Identyfikacja to droga pozwalająca zbudować model układu w wyniku eksperymentów na tym układzie. Przy identyfikacji złożonych procesów technologicznych mamy do czynienia z problemem wielowymiarowości oraz z dużym stopniem nieokreśloności, związanych z istnieniem nieznanymi zakłóceń oraz nieznaną dokładnym opisem matematycznym, co powoduje konieczność stosowania probabilistycznych metod identyfikacji. Dotyczy to przede wszystkim liniowych obiektów statycznych i dynamicznych, a problemy nieliniowe, z uwagi na ich ogromną różnorodność i złożoność, rozwiązywane są różnymi metodami i technikami przybliżonymi. Pomimo opracowania bardzo wielu efektywnych algorytmów dla układów liniowych i częściowo nieliniowych ze znaną strukturą, brakuje ogólnej i efektywnej metodologii identyfikacji systemów nieliniowych z nieznaną strukturą. Dlatego sztuczne sieci neuronowe z ich atrakcyjnymi charakterystykami stwarzają możliwość opracowania ogólnej metodologii identyfikacji obiektów dynamicznych. Atrakcyjność stosowania sieci w zagadnieniach modelowania i identyfikacji obiektów wynika z ich możliwości aproksymacji dowolnych nieliniowości oraz dostrajania przyjętej struktury na podstawie danych eksperymentalnych lub innych obrazów uczących. Powodu-

je to, że są one bardzo chętnie stosowane do modelowania skomplikowanych zjawisk, których natury nie jesteśmy w stanie zbadać. Jest natomiast dokładna wiedza na temat ich wielkości wejściowych i wyjściowych.

Jedną z najczęściej stosowanych metod uczenia SSN jest metoda propagacji wstecznej błędu. Największym niedogodnością jest to, że wymaga ona „nauczyciela”, którego zadaniem jest podawanie dla każdego wektora wejściowego wzorcowego wektora oczekiwanej odpowiedzi [26]. Ciąg uczący należy skonstruować na podstawie doświadczeń przeprowadzonych zgodnie z ustalonym planem eksperymentu. Dane uzyskane podczas eksperymentu najczęściej wymagają odpowiedniej obróbki – wszystkie składowe wektora wejściowego i wyjściowego muszą mieć postać liczbową, natomiast niektóre informacje definiujące stan obiektu mogą mieć inny charakter, np. opisowy lub typu logicznego. Konieczna jest konwersja tych parametrów na postać liczbową. W przypadku informacji logicznych można zapisać je w postaci: tak – 1, nie – 0. Proces uczenia może przebiegać nieprawidłowo przy dużym rozrzucie wartości parametrów wejściowych i wyjściowych, jednakże zastosowanie normalizacji danych pozwoli uniknąć tego problemu.

W literaturze spotyka się różne podejścia pozwalające dobrać elementy podczas konstruowania modelu neuronowego dla określonego rodzaju obiektu. Z reguły odbywa się to na drodze empirycznej. Należy dobrać rodzaj wykorzystanej sieci neuronowej, ustalić jej optymalne struktury, wybrać najszybszą lub najdokładniejszą metodę uczenia. Istnieją pewne pomocne wskazówki, które i tak nie uchronią przed przeprowadzeniem wielu badań symulacyjnych.

Jednym ze sposobów na przeprowadzenie weryfikacji modelu jest podział jeszcze przed procesem uczenia ciągu uczącego na dwie części. Część jest wykorzystana w procesie uczenia, natomiast druga jest użyta do weryfikacji modelu. Z uwagi na fakt modyfikacji procesu uczenia, zmieniono również przygotowanie danych testowych. Zostały one wygenerowane automatycznie na podstawie rzeczywistych widm w podczerwieni znajdujących się w bazie danych. Dokładność otrzymanego modelu jest możliwa do obliczenia na podstawie odchylenia średniego (4.1) oraz odchylenia standardowego (4.2), a ich wartość jest ustalana na podstawie różnicy pomiędzy danymi uzyskanymi na wyjściach sieci neuronowej, a wartościami oczekiwanymi dla każdego elementu zbioru testującego.

$$d = \frac{\sum_{i=1}^n |x_i - \bar{x}|}{n}, \quad (4.1)$$

$$\sigma = \sqrt{\frac{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i\right)^2}{n(n-1)}}, \quad (4.2)$$

Procesem, który poddany został identyfikacji, jest proces interpretacji widm w podczerwieni za pomocą spektroskopii. Opis budowy aparatu oraz sposób otrzymywania widm został omówiony w rozdziale 3.2. Natura procesu interpretacji widm w podczerwieni nie jest dokładnie ustalona. Dla obiektu identyfikacji ustala się składowe wektorów wejściowych i wyjściowych. Z uwagi na fakt, że autor niniejszej pracy zdecydował się na modelowanie przy zastosowaniu sztucznych sieci neuronowych, następuje ono na podstawie zbioru danych doświadczalnych, które zostały uzyskane na podstawie planu eksperymentu.

## **4.2 Planowanie eksperymentu**

Techniki planowania eksperymentu swój rozwój zawdzięczają praktycznemu znaczeniu w tworzeniu modeli matematycznych obiektów, lecz tylko niekiedy możliwe jest sformułowanie ich na drodze analitycznej i najczęściej są one tworzone na podstawie wyników eksperymentów. W badaniach technologicznych dąży się do uzyskania ilościowego opisu zależności przyczynowo-skutkowych rozpatrywanych urządzeń i zachodzących w nich zjawisk (procesów)[28, 52, 75].

Model matematyczny, który obrazuje zależności między czynnikami mającymi wpływ na badany obiekt, można uzyskać na trzy różne sposoby:

1. Metodą analityczną (proste obiekty badań, podstawowe zjawiska).
2. Metodą eksperymentu biernego – na podstawie obserwacji zebranych w czasie działania tego obiektu. Do tych obserwacji po ich dokonaniu nie można powrócić.

Eksperyment ten jest stosowany w przypadkach, gdy:

- nie można zakłócać normalnego działania obiektu badań,
- wyniki eksperymentu mogą mieć charakter jakościowy,

- gdy wystarczy prosta postać modelu matematycznego,
- nie ma możliwości przeprowadzenia eksperymentu czynnego.

Ekspertyment bierny znajduje szerokie zastosowanie m.in. w medycynie, biologii.

3. Metodą eksperymentu czynnego (planowanego), który polega na realizacji badań przy założonej zmienności czynników wejściowych, według przyjętego programu badań, który może być statyczny lub dynamiczny. W programach statycznych wszystkie wartości czynników wejściowych są określane przed rozpoczęciem badań, podczas gdy w programach dynamicznych z góry określane są jedynie wartości wejściowe (w punkcie startu), a w dalszym stadium badań wartości czynników wejściowych uzależnione są od wyników doświadczeń poprzedzających.

#### **4.2.1 Planowanie eksperymentu dla tworzenia modeli neuronowych**

Planowanie eksperymentu dla tworzenia modeli neuronowych to określenie zestawu wielkości wejściowych, które będą stosowane w czasie eksperymentu. Zestaw ten wraz z wynikami pomiarów będzie stanowił ciąg uczący oraz testujący, niezbędny dla opracowania modelu neuronowego oraz określenia w jakim stopniu przybliży on badane zjawisko. W niniejszej pracy podstawą planowania eksperymentu będzie metoda analizy regresyjnej wraz z modyfikacjami gwarantującymi przydatność otrzymanych w wyniku eksperymentu danych do modelowania neuronowego. Z uwagi na wielkość i ilość wektorów otrzymanych w wyniku eksperymentów nie zostały one przedstawione w postaci tabelarycznej.

Badanym obiektem jest proces interpretacji widm w podczerwieni. Widmo otrzymuje się poprzez przepuszczenie przez próbkę badanej substancji promieniowania elektromagnetyczne z zakresu IR, które jest selektywnie pochłaniane, zwiększając amplitudę drgań oscylacyjnych w cząsteczkach (czy też kryształach) tej substancji. Promieniowanie ma częstotliwość zbliżoną do częstotliwości drgań oscylacyjnych atomów w cząsteczkach. Zakres poszczególnych parametrów wejściowych jest zatem stały. Dokonywanie standaryzacji wartości wyjściowych obiektu jest celowe, ponieważ wartości te mogą różnić się dla tych samych substancji zależnie od jej stężenia ośrodka w którym się znajdują lub grubości warstwy substancji absorbującej (ilości molekuł absorbujących promieniowanie). Pomimo

złożoności identyfikowanego obiektu (wiele wejść, wiele wyjść), są one traktowane jako obiekty posiadające jedno wejście i jedno wyjście. Dla potrzeb pracy wartość poszczególnych parametrów wyjściowych jest zależna od konkretnej długości promieniowania z zakresu IR i jego wpływu na drgania fragmentów struktury chemicznej. Jest więc możliwa sytuacja, gdy jeden zakres promieniowania będzie istotnie wpływał na wyjście obiektu, a drugi nie.

Pomiary są wykonywane przy zmianie długości fali promieniowania od minimalnej wartości zakresu IR do maksymalnej wartości z zakresu tzw. średniej podczerwieni. We współczesnych aparatach stosuje się szybszą metodę polegającą na prześwietleniu próbki zinterferowaną wiązką promieniowania z całego zakresu IR (o widmie ciągłym). W czasie przechodzenia tej wiązki przez próbkę następuje selektywna absorpcja promieniowania IR, tj. fale o określonych częstotliwościach w zależności od atomów i wiązań między nimi występującymi, jest absorbowana, a otrzymany interferogram jest zdeformowany pasmami absorpcji. Widmo absorpcyjne otrzymuje się z interferogramu stosując transformację Fouriera [73].

Według opisanych zasad zostały ustalone wektory doświadczeń wykorzystane do wykonania eksperymentów, które są źródłem danych dla modeli neuronowych.



#### 4.2.2 Analiza wpływu parametrów wejściowych na parametry wyjściowe

Na podstawie wiedzy o identyfikowanym obiekcie, która zdobywana była podczas badań doświadczalnych, dobierane były parametry wejściowe modelu tworzonego za pomocą sztucznych sieci neuronowych. Ocenia się wówczas, które parametry procesowe mają wpływ na przebieg badanego zjawiska, a które mogą zostać pominięte przy konstruowaniu modelu. Liczba wybranych parametrów ma wpływ na wymiar wektora wejściowego modelu neuronowego, a co za tym idzie również na liczbę neuronów i połączeń między nimi. Wraz ze wzrostem liczby połączeń rośnie minimalna liczba składowych ciągu uczącego. Ograniczenie liczby parametrów wejściowych jest szczególnie ważne, gdy pomiary będące źródłem danych uczących są czasochłonne lub kosztowne, dlatego możliwość eliminacji składowych, które nie mają znaczącego wpływu na przebieg modelowania jest istotny. Wiedza na temat wpływu parametrów na przebieg badanego procesu jest bardzo przydatną informacją, szczególnie z punktu widzenia badania konkretnego zjawiska, natomiast w zastosowaniach praktycznych podejście do modelowanego procesu, jako do modelu o którym nie posiadane są żadne informacje, jest wystarczające, gdyż pozwala ono przewidzieć wartości parametrów wyjściowych modelu dla wybranych parametrów procesowych z dostateczną dokładnością.

W pracy zaproponowano metodę oceny wpływu parametrów wejściowych na parametry wyjściowe modelu opierając się na założeniu, że nie znana jest struktura modelu neuronowego. Jest to rozwiązanie szeroko stosowane w literaturze [20, 35], które polega na przeprowadzeniu serii doświadczeń na uzyskanym modelu, lecz bez analizy jego struktury. Aby uzyskać informację o znaczeniu poszczególnych składowych wektora wejściowego dokonywana jest eliminacja kolejnych składowych, sprawdzając przy tym w jakim stopniu wpływają one na wartość sygnałów wyjściowych. Znane jest również podejście, które stosuje się w przypadku, gdy analiza wydaje się czasochłonna, a interpretacja subiektywna i niejednoznaczna. W metodzie tej ocena stopnia wpływu poszczególnych parametrów procesowych na kolejne składowe wektora wyjściowego modelu następuje na podstawie zależności o charakterze wielomianowym.

### **4.3 Wybór wektorów parametrów wejściowych i wyjściowych sieci neuronowej**

Poniżej opisano składowe wektorów wejściowych oraz wektorów wyjściowych modelu neuronowego obiektu rozpatrywanego w pracy. Na składowe wektora wejściowego składają się wartości położenia i absorbancji poszczególnych pików (punktów maksymalnych) na widmie. Dzieje się tak, ponieważ metoda identyfikacyjna substancji chemicznych opiera się na założeniu, że jeśli dwa widma zawierają pasma absorpcji w tych samych położeniach oraz mają stałe stosunki wysokości poszczególnych pasm, to można powiedzieć, że oba widma należą do tej samej substancji chemicznej.

Pierwszą składową wektora jest wartość maksymalna występująca w obrębie całego widma i przyjmująca wartość 1 (z uwagi na zastosowaną standaryzację). Kolejne 19 wejść to wartości pozostałych maksimum absorbancji. Przyjmuje się, że w przeciętnym widmie podczerwonym związku chemicznego można zlokalizować około 20 punktów charakterystycznych. Wyznaczenie większej ilości jest bezcelowe, ponieważ prowadzi jedynie do zwiększenia objętości sieci neuronowej, nie wnosząc przy tym żadnych korzyści. Oprócz wartości punktów maksymalnych na wejście sztucznej sieci neuronowej jest również podawane ich położenie. Jest to realizowane analogicznie, jak w przypadkach punktów maksymalnych – wejście 21 przyjmuje wartość długości fali, na której występuje najwyższy charakterystyczny pik. Kolejne 19 punktów to długości fali, gdzie również znajdują się punkty maksimum na krzywej (tzw. piki).

$w_1$  – wartość najwyższego punktu charakterystycznego występującego w widmie,

$w_2 - w_{20}$  – wartości kolejnych punktów charakterystycznych występujących w widmie,

$w_{21}$  – długość fali, na której występuje najwyższy punkt charakterystyczny w widmie,

$w_{22} - w_{40}$  – długość fali, na których występują kolejne punkty charakterystyczne w widmie,

gdzie  $w$  – wejście sieci neuronowej.

Parametry wyjściowe modelu sztucznej sieci neuronowej są uzależnione od wielkości bazy danych opracowanej z otrzymanych widm podczerwonych podczas eksperymentów. Każde wyjście odpowiada danej substancji znajdującej się w bazie danych. Istnieje również możliwość wskazywania związków chemicznych na wyjściach sieci neuronowej

w sposób bitowy. Jednak zastosowanie tego rozwiązanie niesie ze sobą jedną podstawową wadę – brak możliwości wskazania obecności związku w mieszaninie kilku substancji. Dlatego zastosowanie metody „jedna substancja – jedno wyjście” wydaje się najbardziej odpowiednie.

## **4.4 Badania symulacyjne**

W niniejszym rozdziale przedstawiono wyniki badań symulacyjnych, które były podstawą przy opracowaniu modeli neuronowych badanego obiektu. Badania obejmowały dobór struktury sztucznej sieci neuronowej, funkcji przejścia neuronów w warstwach ukrytych, metody uczenia oraz określenie powtarzalności poziomu błędów uzyskiwanych w procesie uczenia. Uczenie oraz testowania nauczonej sztucznej sieci neuronowej zostało przeprowadzone przy użyciu autorskiego programu napisanego w języku C# oraz za pomocą programu Matlab 7.5.

### **4.4.1 Dobór struktury sieci neuronowej**

Wybranie struktury, dobrze dopasowanej do specyfiki rozwiązywanego problemu, może w istotny sposób skracać czas uczenia i polepszać jego końcowe wyniki [63]. Można dokonać podziału struktur stosowanych sieci neuronowych na dwie klasy:

- Sieci *feedforward* (sieci z jednokierunkowym przepływem sygnału) – to struktury, w których istnieje ściśle określony kierunek przepływu sygnałów - od pewnego ustalonego wejścia, na którym podaje się sygnały będące danymi wejściowymi, precyzującymi zadania, które mają być rozwiązywane - do wyjścia, na którym sieć podaje ustalone rozwiązanie. Są to sieci najczęściej stosowane i najbardziej użyteczne.
- Sieci rekurencyjne (ze sprzężeniem zwrotnym) – to struktury cechujące się tym, że neurony tworzą sprzężenia zwrotne, liczne i skomplikowane zamknięte pętle, w których impulsy mogą długo krążyć i zmieniać się, zanim sieć osiągnie pewien stan ustalony (o ile go w ogóle osiągnie).

Budowa sieci ze sprzężeniem zwrotnym jest bez wątpienia bardziej skomplikowana i trudniej nad nią zapanować. Dzieje się tak z uwagi na dużą liczbę równoległych, dynamicznych procesów.

#### 4.4.2 Sztuczna sieć neuronowa z jednokierunkowym przepływem sygnałów

**Tabela 4.1.** Liczba epok procesu uczenia oraz wartości błędów MD i RMSD dla bazy liczącej 10 związków chemicznych dla sieci o 40 wejściach i 10 wyjściach.

Konfiguracja sieci neuronowej		Liczba epok	Wartość błędu	
Liczba neuronów w warstwie			RMSD	MD
pierwszej ukrytej	drugiej ukrytej			
8	0	189	0.1795	0.1023
9	0	33	0.0673	0.0419
10	0	28	0.0525	0.0320
12	0	14	0.1201	0.0660
15	0	20	0.0653	0.0384
20	0	23	0.0461	0.0268
<b>25</b>	<b>0</b>	<b>27</b>	<b>0.0387</b>	<b>0.0217</b>
30	0	19	0.0973	0.0617
35	0	148	0.1695	0.1073
40	0	51	0.1481	0.0852
12	10	56	0.1096	0.0618
12	12	20	0.0581	0.0348
12	15	17	0.0667	0.0336
12	20	17	0.0507	0.0280
12	25	12	0.0476	0.0273
12	30	18	0.0753	0.0369
12	35	17	0.0445	0.0276
12	40	24	0.0440	0.0282
15	10	20	0.1226	0.0658
15	12	14	0.0786	0.0450
15	15	12	0.0731	0.0362
15	20	16	0.1093	0.0630
15	25	14	0.0607	0.0314
15	30	19	0.0750	0.0391
15	35	20	0.0640	0.0337
15	40	19	0.0651	0.0326

W tabelach 4.1, 4.2 i 4.3 przedstawiono wartości błędów odchylenia średniego - MD (4.1) oraz odchylenia standardowego - RMSD (4.2) dotyczących odpowiedzi sztucznej sieci neuronowej na zbiór danych testowych i danych uczących dla wybranych konfiguracji sieci, która została nauczona zbiorem danych uczących. Kolejny krok to porówna-

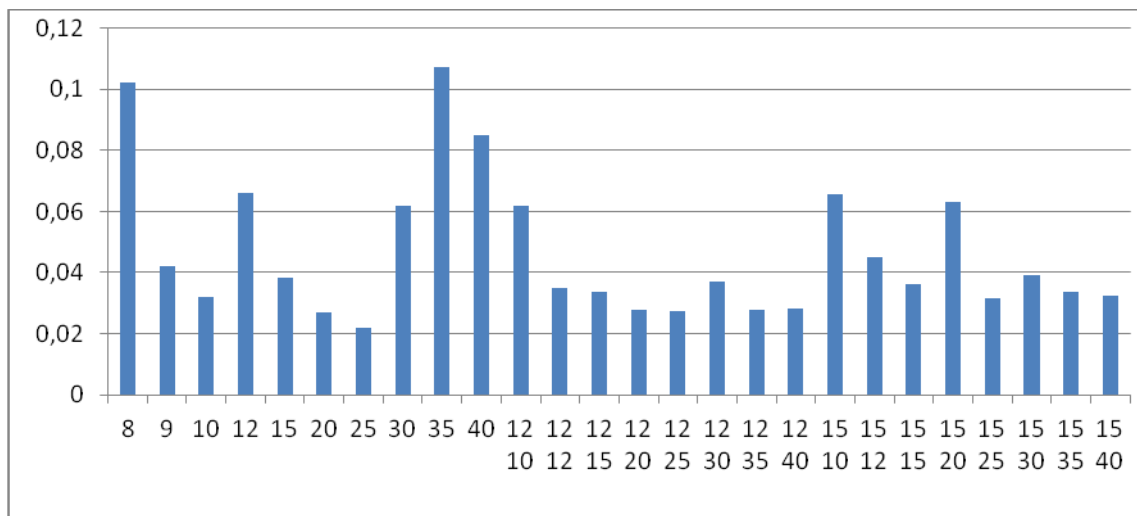
nie odpowiedzi sieci na wektory zbioru testowego z wartościami oczekiwanymi - na tej podstawie obliczone zostały błędy MD oraz RMSD.

**Tabela 4.2.** Liczba epok procesu uczenia oraz wartości błędów MD i RMSD dla bazy liczącej 5 związków chemicznych dla sieci o 40 wejściach i 5 wyjściach.

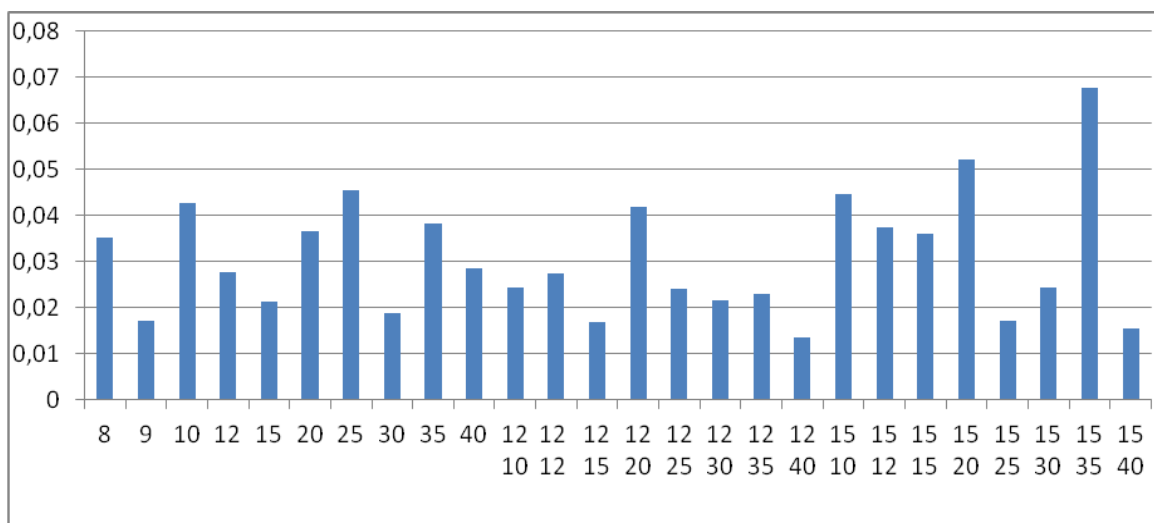
Konfiguracja sieci neuronowej		Liczba epok	Wartość błędu	
Liczba neuronów w warstwie			RMSD	MD
pierwszej ukrytej	drugiej ukrytej			
8	0	38	0.0532	0.0353
9	0	19	0.0295	0.0173
10	0	36	0.0862	0.0426
12	0	18	0.0507	0.0277
15	0	14	0.0374	0.0213
20	0	9	0.0669	0.0365
25	0	13	0.0868	0.0455
30	0	12	0.0328	0.0189
35	0	10	0.0638	0.0382
40	0	8	0.0537	0.0286
12	10	7	0.0551	0.0244
12	12	10	0.0468	0.0274
12	15	12	0.0248	0.0170
12	20	7	0.0657	0.0419
12	25	6	0.0368	0.0242
12	30	10	0.0346	0.0216
12	35	5	0.0394	0.0231
<b>12</b>	<b>40</b>	<b>5</b>	<b>0.0225</b>	<b>0.0137</b>
15	10	15	0.0825	0.0447
15	12	6	0.0656	0.0374
15	15	12	0.0591	0.0360
15	20	8	0.0870	0.0520
15	25	17	0.0307	0.0172
15	30	10	0.0484	0.0243
15	35	19	0.1314	0.0675
15	40	6	0.0308	0.0156

**Tabela 4.3.** Liczba epok procesu uczenia oraz wartości błędów MD i RMSD dla bazy liczącej 15 związków chemicznych dla sieci o 40 wejściach i 15 wyjściach.

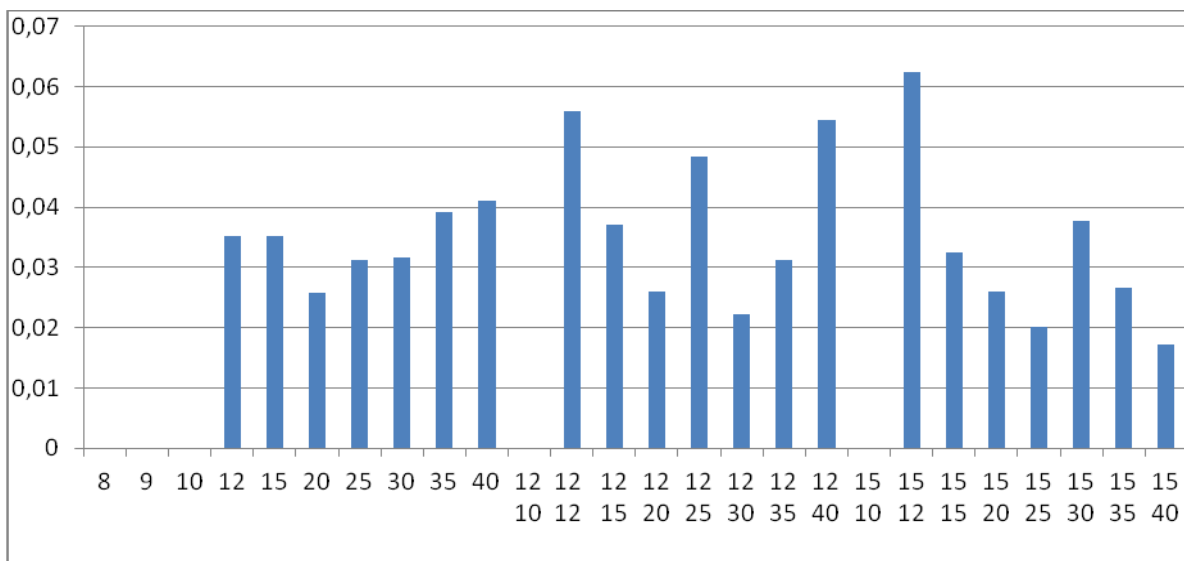
Konfiguracja sieci neuronowej		Liczba epok	Wartość błędu	
Liczba neuronów w warstwie			RMSD	MD
pierwszej ukrytej	drugiej ukrytej			
8	0	-	-	-
9	0	-	-	-
10	0	-	-	-
12	0	21	0.0774	0.0351
15	0	23	0.0604	0.0352
20	0	14	0.0501	0.0258
25	0	27	0.0606	0.0312
30	0	25	0.0580	0.0317
35	0	25	0.0721	0.0391
40	0	29	0.0687	0.0411
12	10	-	-	-
12	12	23	0.1027	0.0559
12	15	27	0.0624	0.0370
12	20	12	0.0505	0.0259
12	25	14	0.0808	0.0484
12	30	25	0.0428	0.0223
12	35	12	0.0548	0.0312
12	40	15	0.0974	0.0545
15	10	-	-	-
15	12	28	0.1059	0.0625
15	15	27	0.0664	0.0325
15	20	20	0.0468	0.0260
15	25	13	0.0412	0.0201
15	30	19	0.0694	0.0378
15	35	12	0.0441	0.0266
<b>15</b>	<b>40</b>	<b>13</b>	<b>0.0271</b>	<b>0.0173</b>



**Rys. 4.1.** przedstawia wartość błęd *RMSE* w zależności od konfiguracji warstw ukrytych sieci neuronowej dla 40 wejść i 10 wyjść.



**Rys. 4.2.** przedstawia wartość błęd *MD* w zależności od konfiguracji warstw ukrytych sieci neuronowej dla 40 wejść i 5 wyjść.



Rys. 4.3. przedstawia wartość błędu MD w zależności od konfiguracji warstw ukrytej sieci neuronowej dla 40 wejść i 15 wyjść.

#### 4.4.3 Wybór funkcji przejścia neuronów w warstwach ukrytych

W tabelach 4.4 i 4.5 przedstawiono wartości błędów odchylenia średniego - MD (4.1) oraz odchylenia standardowego - RMSD (4.2) dla różnych funkcji przejścia neuronów w warstwie ukrytej sztucznej sieci neuronowej.

Tabela 4.4. Wartości błędów MD i RMSD dotyczących odpowiedzi sieci na zbiór danych testowych i danych uczących dla wybranych funkcji przejścia neuronów w warstwach ukrytych.

Funkcja przejścia	Wartość błędu	
	RMSD	MD
Sigmoidalna	0.0884	0.0284
Tangesoidalna	0.0409	0.0245



**Tabela 4.5.** Wartości błędów MD i RMSD dotyczących odpowiedzi sieci na zbiór testowy dla wybranych funkcji przejścia neuronów w warstwach ukrytych.

Funkcja przejścia	Wartość błędu	
	RMSD	MD
Sigmoidalna	0.0860	0.0282
tangesoidalna	0.0366	0.0215

#### 4.4.4 Dobór metody uczenia sztucznych sieci neuronowych

**Tabela 4.6.** Liczba epok procesu uczenia i wartości błędów MD i RMSD dotyczących odpowiedzi sieci na zbiór danych uczących i danych testowych dla wybranych algorytmów.

Nazwa algorytmu uczącego	Liczba epok	Wartość błędu	
		RMSD	MD
Algorytm wstecznej propagacji błędu w postaci klasycznej	83582	0.0518	0.0273
Algorytm wstecznej propagacji błędu z zastosowaniem współczynnika momentum	90701	0.0545	0.0289
Algorytm wstecznej propagacji błędu z adaptacyjnym współczynnikiem uczenia	2381	0.0530	0.0270
Algorytm wstecznej propagacji błędu z zastosowaniem współczynnika momentum i adaptacyjnym współczynnikiem uczenia	805	0.0502	0.0232
Algorytm Levenberga-Marquardta	10	0.0306	0.0170
Algorytm gradientowy Broydena – Fletchera – Goldfarba – Shano (quasi-Newtonowski)	109	0.0451	0.0244
Algorytm skalowanego gradientu sprzężonego	155	0.0572	0.0309
Algorytm gradientu sprzężonego Powella Beale’go	89	0.0530	0.0262
Algorytm gradientu sprzężonego Fletchera Powella	1218	0.0390	0.0186
Algorytm gradientu sprzężonego Polaka Ribiere	121	0.0588	0.0308
Algorytm propagacji wstecznej błędu RPROP	113	0.0498	0.0228

**Tabela 4.7.** Liczba epok procesu uczenia i wartości błędów MD i RMSD dotyczących odpowiedzi sieci na zbiór danych testowych dla wybranych algorytmów wykorzystanych w procesie uczenia sieci.

Nazwa algorytmu uczącego	Liczba epok	Wartość błędu	
		RMSD	MD
Algorytm wstecznej propagacji błędu w postaci klasycznej	83582	0.0490	0.0244
Algorytm wstecznej propagacji błędu z zastosowaniem współczynnika momentum	90701	0.0473	0.0221
Algorytm wstecznej propagacji błędu z adaptacyjnym współczynnikiem uczenia	2381	0.0467	0.0220
Algorytm wstecznej propagacji błędu z zastosowaniem współczynnika momentum i adaptacyjnym współczynnikiem uczenia	805	0.0442	0.0162
Algorytm Levenberga-Marquardta	182	0.0283	0.0172
Algorytm gradientowy Broydena – Fletchera – Goldfarba – Shano (quasi-Newtonowski)	109	0.0418	0.0215
Algorytm skalowanego gradientu sprzężonego	155	0.0480	0.0225
Algorytm gradientu sprzężonego Powella Beale’go	89	0.0472	0.0215
Algorytm gradientu sprzężonego Fletchera Powella	1218	0.0359	0.0168
Algorytm gradientu sprzężonego Polaka Ribiere	121	0.0502	0.0245
Algorytm propagacji wstecznej błędu RPROP	113	0.0461	0.0189

W tabelach 4.6 i 4.7 przedstawiono wartości błędów odchylenia średniego - MD (4.1) oraz odchylenia standardowego - RMSD (4.2) dotyczących odpowiedzi sieci na zbiór danych uczących i danych testowych oraz zbiór testowy dla sieci nauczonych za pomocą różnych algorytmów uczących. Podano także liczbę epok, po których sieć została uznana za nauczoną.

#### 4.4.5 Badanie powtarzalności poziomu błędów uzyskiwanych w procesie uczenia

W tabelach 4.8 i 4.9 przedstawiono wartości błędów odchylenia średniego - MD (4.1) oraz odchylenia standardowego - RMSD (4.2) dotyczących odpowiedzi sieci na zbiór danych uczących i danych testowych oraz zbiór testowy dla sieci nauczonych za pomocą różnych algorytmów uczenia. Podano również liczbę epok, po których sieć została uznana za nauczoną. Dla każdego algorytmu uczącego proces uczenia i weryfikacji dokładności nauczonej sieci został przeprowadzony dziesięciokrotnie.

**Tabela 4.8.** Liczba epok procesu uczenia i wartości błędów MD i RMSD dotyczących odpowiedzi sieci na zbiór danych uczących i danych testowych dla wybranych algorytmów wykorzystanych w procesie uczenia sieci.

Nazwa algorytmu uczącego	Numer próby	Liczba epok	Wartość błędu	
			RMSD	MD
<b>Algorytm gradientu sprzężonego Powella Beale'go</b>	1	166	0.0479	0.0283
	2	166	0.0559	0.0293
	3	89	0.0530	0.0262
	4	111	0.0492	0.0235
	5	135	0.0582	0.0330
	6	140	0.0618	0.0340
	7	140	0.0467	0.0256
	8	145	0.0500	0.0253
	9	264	0.0614	0.0291
	10	232	0.0612	0.0276
<b>Algorytm skalowanego gradientu sprzężonego</b>	1	108	0.0521	0.0254
	2	135	0.0477	0.0242
	3	123	0.0454	0.0232
	4	145	0.0585	0.0304
	5	169	0.0491	0.0247
	6	153	0.0480	0.0243

	7	224	0.0511	0.0258
	8	186	0.0614	0.0302
	9	133	0.0537	0.0240
	10	237	0.0599	0.0296
<b>Algorytm propagacji wstecznej błędu RPROP</b>	1	112	0.0527	0.0240
	2	132	0.0509	0.0285
	3	96	0.0419	0.0215
	4	122	0.0442	0.0276
	5	177	0.0532	0.0284
	6	143	0.0456	0.0229
	7	171	0.0588	0.0254
	8	109	0.0491	0.0262
	9	110	0.0466	0.0227
	10	144	0.0530	0.0269

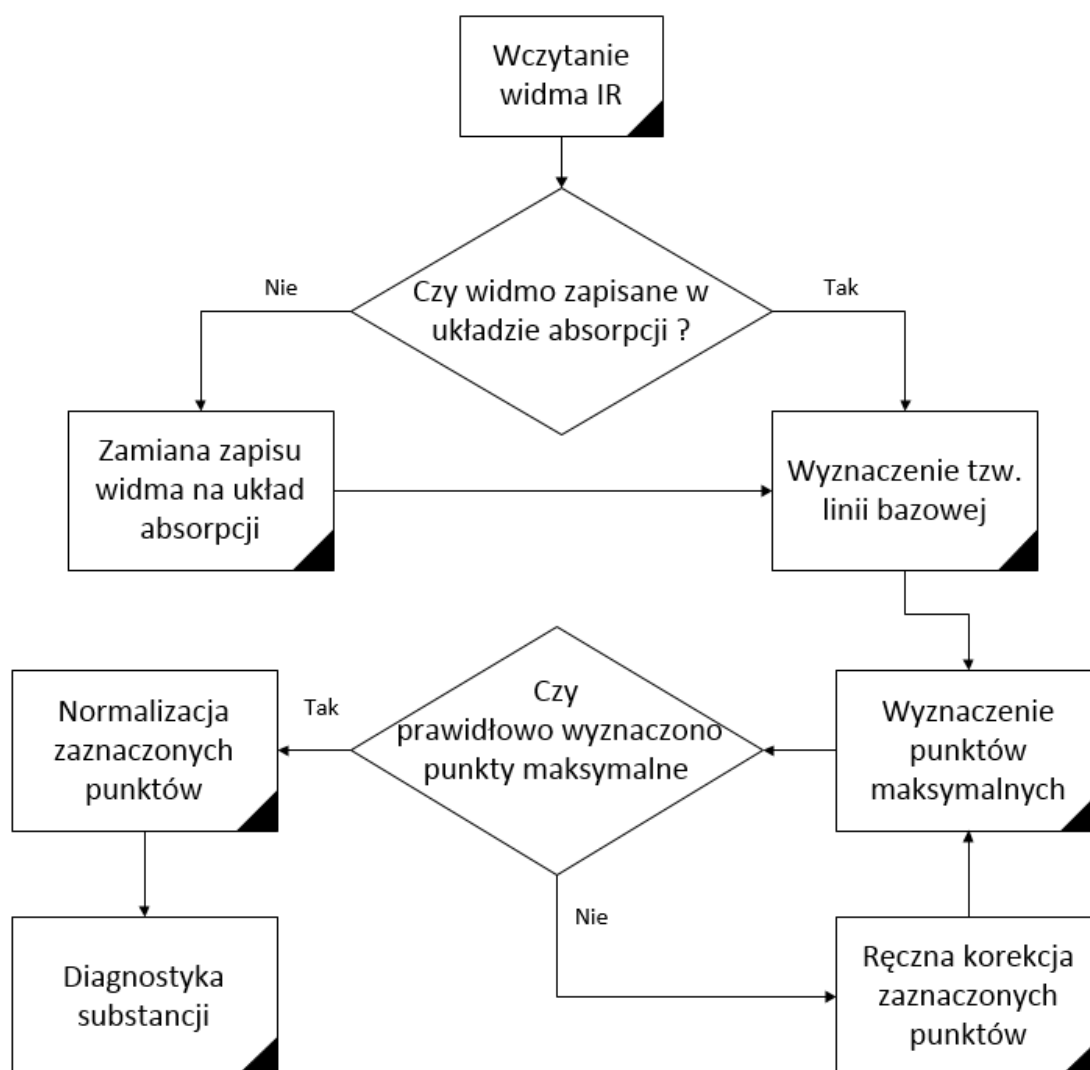
**Tabela 4.9.** Liczba epok procesu uczenia i wartości błędów MD i RMSD dotyczących odpowiedzi sieci na zbiór danych testowych dla wybranych algorytmów wykorzystanych w procesie uczenia sieci.

Nazwa algorytmu uczącego	Numer próby	Liczba epok	Wartość błędu	
			RMSD	MD
<b>Algorytm gradientu sprzężonego Powella Beale’go</b>	1	148	0.0380	0.0165
	2	182	0.0449	0.0223
	3	134	0.0471	0.0182
	4	196	0.0429	0.0214
	5	136	0.0470	0.0181
	6	155	0.0427	0.0184
	7	121	0.0412	0.0209
	8	93	0.0426	0.0179
	9	178	0.0477	0.0213
	10	166	0.0451	0.0181
<b>Algorytm skalowanego gradientu sprzężonego</b>	1	128	0.0362	0.0153
	2	159	0.0420	0.0162
	3	145	0.0393	0.0170

	4	143	0.0457	0.0257
	5	198	0.0461	0.0214
	6	165	0.0439	0.0190
	7	98	0.0468	0.0193
	8	114	0.0490	0.0235
	9	187	0.0417	0.0210
	10	142	0.0480	0.0231
<b>Algorytm propagacji wstecznej błędu RPROP</b>	1	114	0.0432	0.0212
	2	111	0.0474	0.0194
	3	92	0.0284	0.0123
	4	93	0.0424	0.0204
	5	115	0.0403	0.0235
	6	149	0.0425	0.0205
	7	133	0.0495	0.0216
	8	103	0.0346	0.0165
	9	131	0.0339	0.0192
	10	94	0.0372	0.0184

## 5. Program do interpretacji widm w podczerwieni

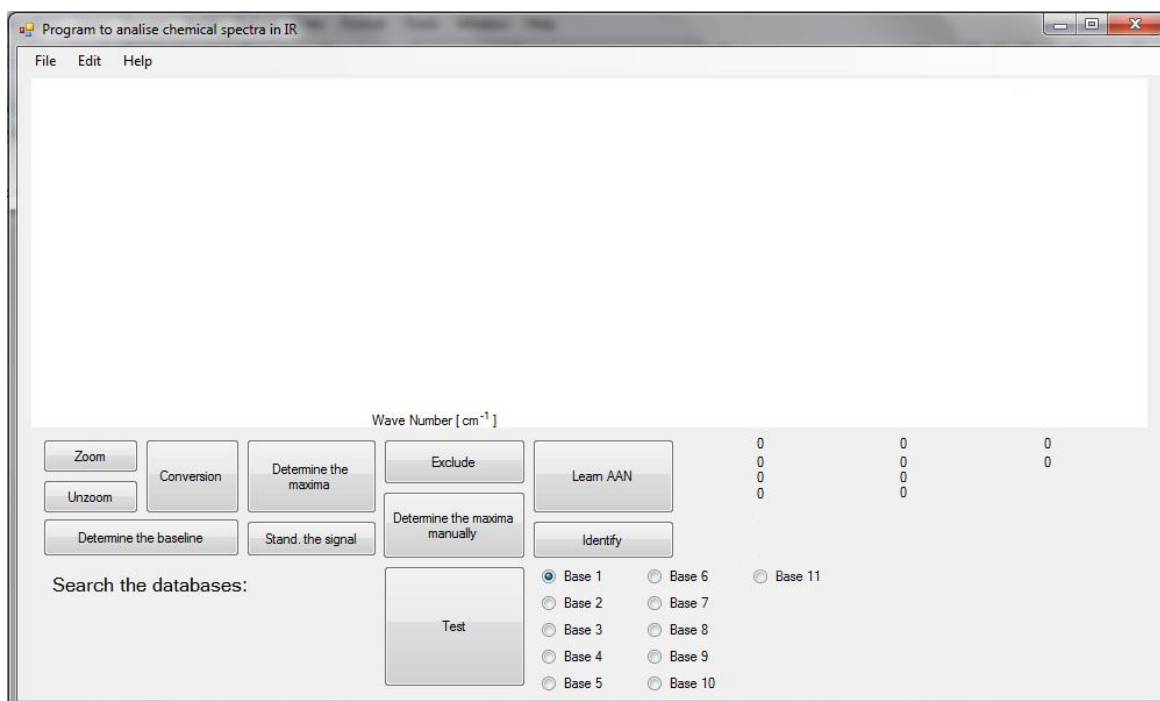
Program do interpretacji widm w podczerwieni został napisany w języku C# [50, 63], w którym została również zaprogramowana sztuczna sieć neuronowa. Wykorzystano darmowe środowisko programistyczne Microsoft Visual Studio 2008 Express Edition oraz MySQL, wolnodostępny system zarządzania relacyjnymi bazami danych, w którym przechowywano dane uczące sieci neuronowej. Rysunek 5.1. prezentuje schemat blokowy działania programu.



*Rys.5.1. Schemat działania programu*

## 5.1 Interfejs użytkownika

Podstawowym założeniem było opracowanie możliwie prostego interfejsu użytkownika. Wszystkie funkcje programu są widoczne, a w razie pominięcia któregoś kroku, program przypomni o jego wykonaniu. Program zbudowany jest z kilku paneli. Na rysunku 5.2. widoczny jest główny panel programu diagnostycznego. Po naciśnięciu przycisku zostanie wywołana funkcja lub użytkownik zostanie przeniesiony do kolejnego panelu w celu wykonaniu następnych operacji związanych z procesem identyfikacji.



*Rys.5.2. Panel główny programu diagnostycznego związku chemiczne*

Na rysunku 5.3. widoczny jest panel wyświetlający się po wybraniu funkcji normalizacji sygnału. W tym panelu użytkownik informowany jest o wartościach punktów maksymalnych przed i po procesie normalizacji (New Max – nowe punkty maksymalne w poszczególnych pasmach oraz Old max – punkty wyznaczone przez program przed procesem normalizacji). Po prawej stronie panelu widoczna jest informacja jakie substancje znajdują się w aktualnej bazie danych.

New Max	Old Max
1	2,652698
0,5837261	1,548449
0,547359	1,451978
0,2332636	0,6187778
0,1693595	0,4492596
0,08729737	0,2315736
0,07154877	0,1897973
0,03888361	0,1031465
0,03149752	0,0835534
0,02213695	0,05872265

ID	Name
1	Aceton
2	Agno3
3	Alibu3
4	Atmer
5	Azotanbu
6	Benzen
7	Borax
8	DMF

Insert spectrum into Database

Determine groups

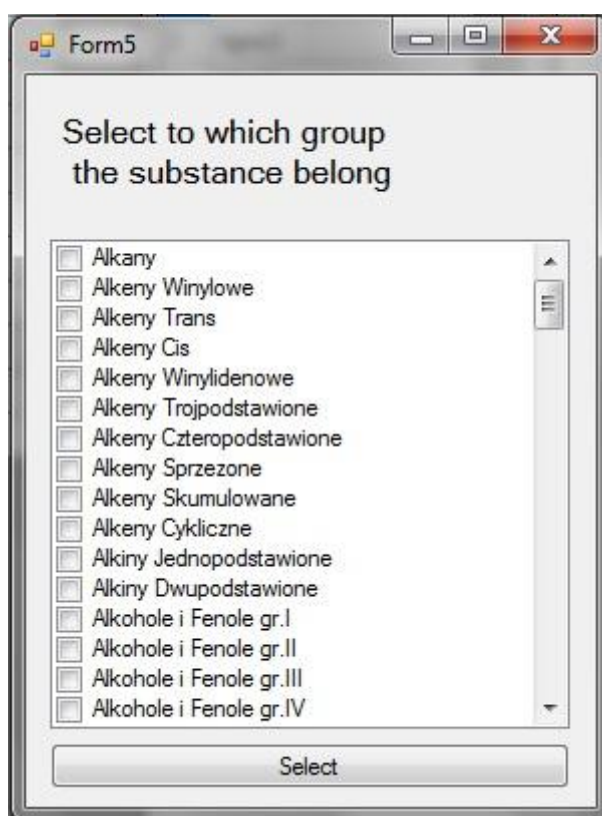
Select groups

Add alternative spectrum

*Rys.5.3. Panel normalizacji sygnału*



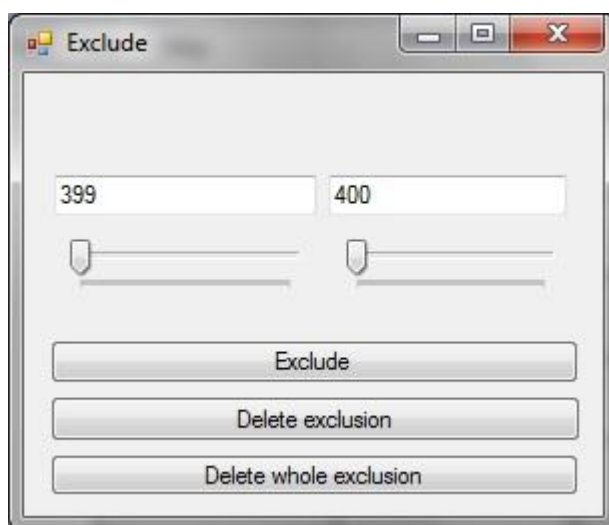
Na rysunku 5.4. widoczny jest panel, gdzie użytkownik wybiera grupy funkcyjne, do których należy związek chemiczny. Panel ten jest aktywowany w momencie dodawania nowego związku chemicznego do bazy danych. Informacja ta jest wykorzystywana przy późniejszej weryfikacji wyników otrzymanych w procesie identyfikacyjnym.



*Rys.5.4. Panel wyznaczania grup funkcyjnych*

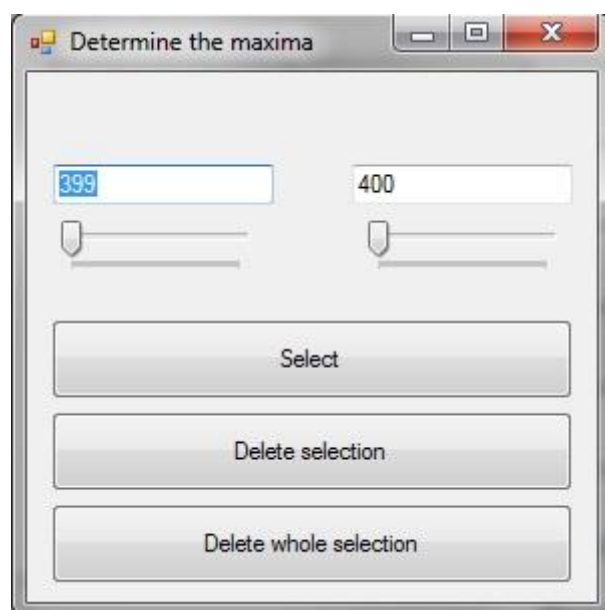
Algorytm wyznaczania punktów maksymalnych pomaga użytkownikowi w wyborze odpowiednich punktów. Jeśli użytkownik uzna, że punkty wybrane przez program są niewłaściwe lub, że są skutkiem szumów występujących w widmie, to może wykluczyć zakresy, które nie będą brane pod uwagę przy następnym wyszukiwaniu punktów maksymalnych.

Panel do wyznaczania zakresów jest widoczny na rysunku 5.5.



*Rys.5.5. Panel wykluczający zakresy widm*

Podobna sytuacja ma miejsce, gdy użytkownik uzna, że program nie wyznaczył punktów, które jego zdaniem powinny się znaleźć w zbiorze maksimów. Korzysta wówczas z panelu widocznego na rysunku 5.6. zaznaczając zakresy, gdzie jego zdaniem występują takie punkty.



*Rys.5.6. Panel zaznaczania zakresów, gdzie występują punkty maksymalne*

Program bierze wówczas pod uwagę sugestie użytkownika i wyznacza punkt o najwyższej wartości spośród punktów znajdujących się w danym zakresie danych.

### 5.1.1 Funkcje panelu głównego

*Zoom* – Funkcja powiększenia widoku.

*Unzoom* – Funkcja pomniejszenia widoku.

*Determine the baseline* – Wyznaczenie linii bazowej. Jest to linia wyznaczana automatycznie przez program. To od niej liczone są wartości poszczególnych maksimów występujących w pasmach absorpcyjnych, a nie od zera.

*Conversion* - Konwersja widma z widma zapisanego w układzie transmisji na widmo zapisane w układzie absorpcji i odwrotnie.

*Determine the maxima* – Wyznaczanie punktów maksymalnych występujących w pasmach absorpcyjnych. Wyznaczane poprzez napisany specjalnie do tego celu algorytm.

*Exclude* – Zaznaczenie fragmentów widma, które nie będą brane pod uwagę w trakcie wyznaczanie punktów maksymalnych poszczególnych pasm. Użytkownik może w ten sposób wykluczyć szumy, które mogą mieć zły wpływ na wynik działania programu.

*Determine the maxima manually* – Zaznaczanie fragmentów widma, gdzie według użytkownika program popełnił błąd i nie zaznaczył prawidłowych punktów.

*Stand. the signal* – Normalizacja sygnału wejściowego. Wyznaczone punkty są normalizowane, tak, że maksymalna wartość wynosi 1, a minimalna 0.

*Learn AAN* – Funkcja rozpoczynająca naukę sztucznej sieci neuronowej.

*Identify* – Funkcja rozpoczynająca proces identyfikacji przez sztuczne sieci neuronowe.

*Test* – Funkcja testująca skuteczność działania programu.

### 5.1.2 Funkcje panelu normalizacji sygnału

*Insert spectrum into database* – Funkcja dodająca nowe dane uczące do bazy danych. Są one wyznaczone z widma absorpcyjnego związku chemicznego. Przed wywołaniem tej funkcji należy w polu powyżej wpisać nazwę związku chemicznego oraz jego krótki opis i wywołać funkcję *Select groups*.

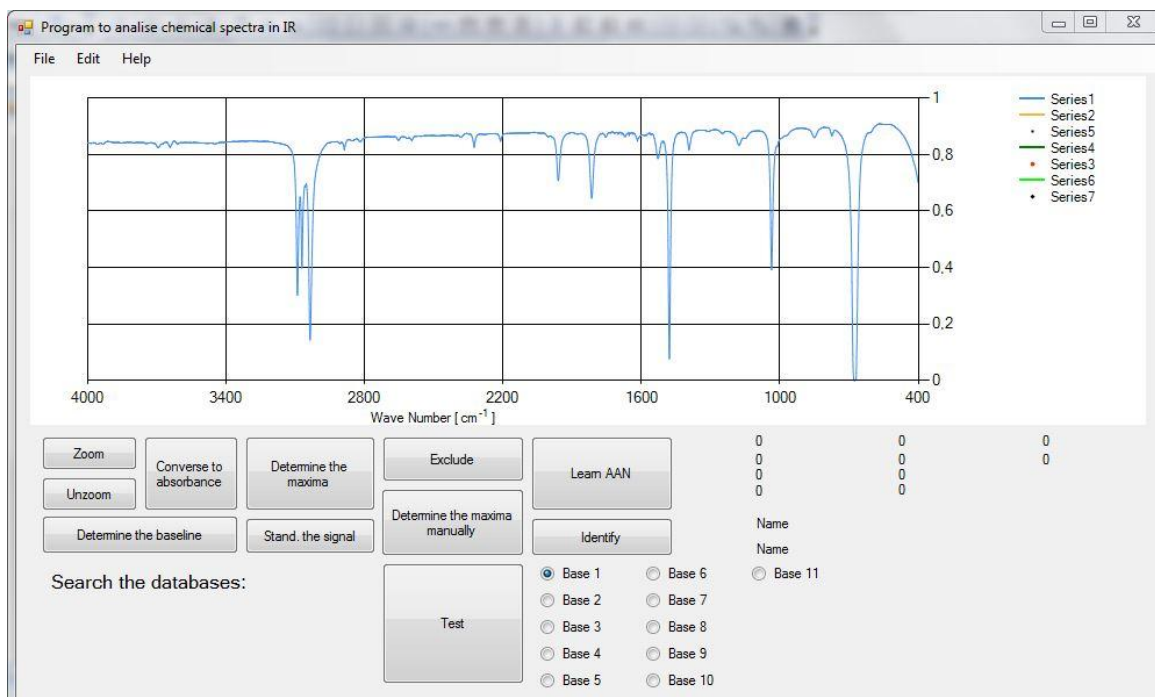
*Determine groups* – Funkcja wyznaczająca automatycznie do których chemicznych grup funkcyjnych może należeć związek. Informacja ta jest wykorzystywana przy weryfikacji procesu identyfikacji związków chemicznych.

*Select groups* – Funkcja zaznaczania chemicznych grup funkcyjnych do których należy badany związek chemiczny. Jej wywołanie jest konieczne przed dodaniem nowego widma do bazy danych.

*Add alternative spectrum* – Dodanie alternatywnego widma związku chemicznego do bazy danych.

## 5.2 Zasady działania programu

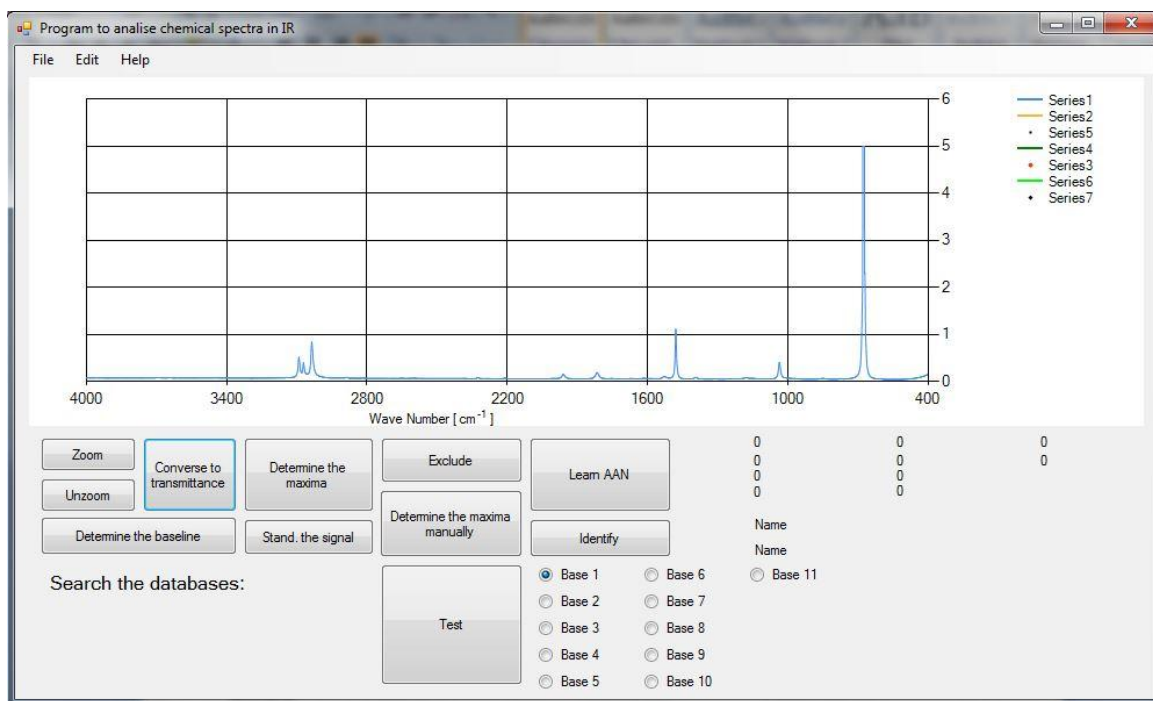
Program do interpretacji widm w podczerwieni został opracowany w celu potwierdzenia działania zmodyfikowanej metody identyfikacyjnej. Modyfikacja ta opiera się na założeniu, że jeśli dwa widma zawierają pasma absorpcji w tych samych położeniach oraz mają stałe stosunki wysokości poszczególnych pasm, to można powiedzieć, że oba widma należą do tej samej substancji chemicznej. Nim jednak użytkownik będzie mógł wykorzystać tę zależność musi najpierw przeanalizować widmo związku chemicznego. Widma użyte do badań były widmami absorpcyjnymi zapisanymi w układzie transmisji, natomiast przed analizą widma należy zamienić je na widmo zapisane w układzie absorbancji.



*Rys. 5.7. Panel główny programu wraz z widmem zapisanym w układzie transmitancji*

Program diagnostyczny automatycznie rozpoznaje w jakim układzie jest zapisane widmo. W razie pomyłki użytkownik może wskazać programowi błędny odczyt, który jest natychmiast naprawiany. Na rysunku 5.7. widoczny jest panel główny programu wraz z widmem zapisanym w układzie transmitancji.

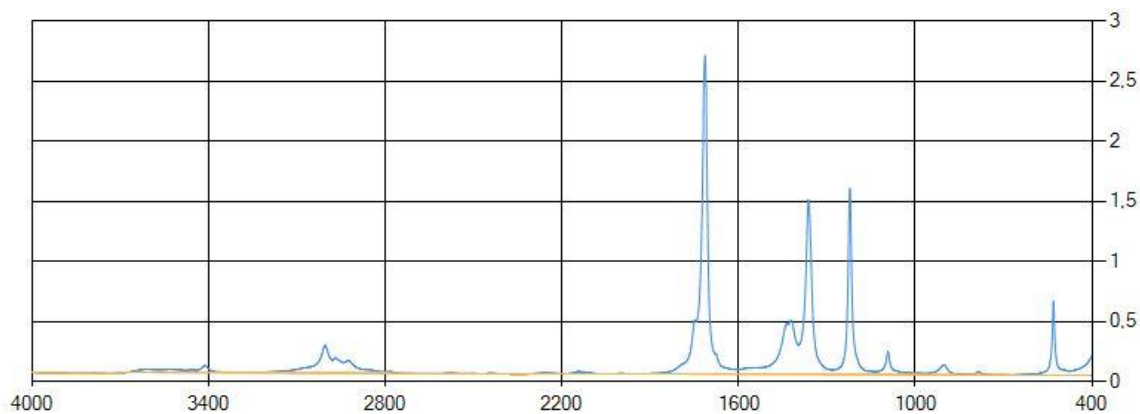
Na rysunku 5.8. pokazano to samo widmo, lecz po działaniu funkcji *Conversion*, czyli zapisane już w układzie absorbancji



Rys. 5.8. Panel główny programu wraz z widmem zapisanym w układzie absorbancji

Kiedy widmo jest już zapisane w układzie absorbancji możliwe jest wyznaczenie tzw. linii bazowej tj. linii łączącej minima absorbancji w całym zakresie widma. Jest ona wyznaczana według zasad przyjętych w chemii analitycznej, wg których wartość minimalna absorbancji na widmie jest najmniejszą wartością jaką osiąga linia bazowa. W prawą stronę od wartości minimalnej linia utrzymuje stałą wartość absorbancji, natomiast w lewą stronę dąży do połączenia z ostatnim punktem w widmie, z zastrzeżeniem, że linia w poszczególnych zakresach widma nie może osiągnąć absorbancji większej od samego widma. Linia bazowa jest istotna we wstępnej analizie widma, gdyż to właśnie od niej liczy się wartość punktów maksymalnych w poszczególnych pasmach (maksima absorbancji).

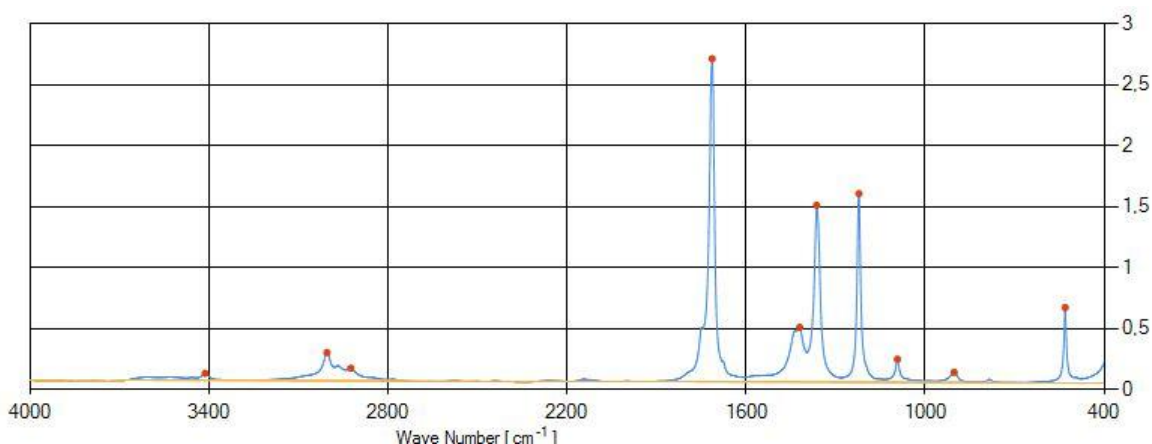
Na rysunku **5.9.** przedstawiono absorpcyjne widmo w podczerwieni z wyznaczoną linią bazową.



**Rys.5.9.** Absorpcyjne widmo w podczerwieni z wyznaczoną linią bazową

Kolejnym etapem wstępnej analizy widma jest wyznaczenie punktów maksymalnych. Wyznaczenie punktów odbywa się w sposób automatyczny, za pomocą specjalnie napisanego do tego celu algorytmu. Algorytm najpierw wyszukuje punkty przegięcia, po czym z wyznaczonych przedziałów wybiera punkty maksymalne, lecz o wartościach nie mniejszych niż 0.05 jednostek absorbancji, licząc od linii bazowej, ponieważ tylko wtedy wartość punktu maksymalnego będzie miała realny wpływ na wynik identyfikacji związku chemicznego. Następnie program zaznacza (jeśli jest ich tyle) dwadzieścia punktów o najwyższej wartości. Istnieją oczywiście widma posiadające więcej lub mniej punktów maksymalnych, lecz przyjmuje się, że dwadzieścia punktów wystarczy do określenia pochodzenia widma podczerwonego.

Efekt działania algorytmu jest widoczny na rysunku **5.10**.



**Rys.5.10.** Absorpcyjne widmo w podczerwieni po etapie wyznaczenia punktów maksymalnych

Istnieją punkty, które tak naprawdę nie powinny się znaleźć wśród punktów maksymalnych, gdyż nie dotyczą pasm absorpcji tylko tła, lub punkty, które powinny być wzięte pod uwagę w procesie wyznaczania punktów maksymalnych, lecz zostały pominięte. W tym celu można dokonać korekty ręcznej korzystając z funkcji *Exclude* lub *Determine the maxima manually*. Po uruchomieniu tych funkcji włączają się odpowiednio panele widoczne na rysunkach **5.5.** i **5.6.**, gdzie wskazujemy fragmenty widma, które będą lub nie będą brane pod uwagę przy następnym wyznaczeniu punktów maksymalnych.

Kiedy użytkownik uzna, że punkty wyznaczone przez program są prawidłowe, to może przejść do ostatniej części związanej z przygotowaniem punktów do procesu identyfikacji związku chemicznego. Korzysta wówczas z funkcji *Stand. the signal*, która przenosi użytkownika do panelu widocznego na rysunku **5.3**. Punkty maksymalne są normalizowane tak, że najwyższa wartość jest przyrównywana do 1, natomiast pozostałe wartości zmieniane są według zasady proporcji matematycznej.

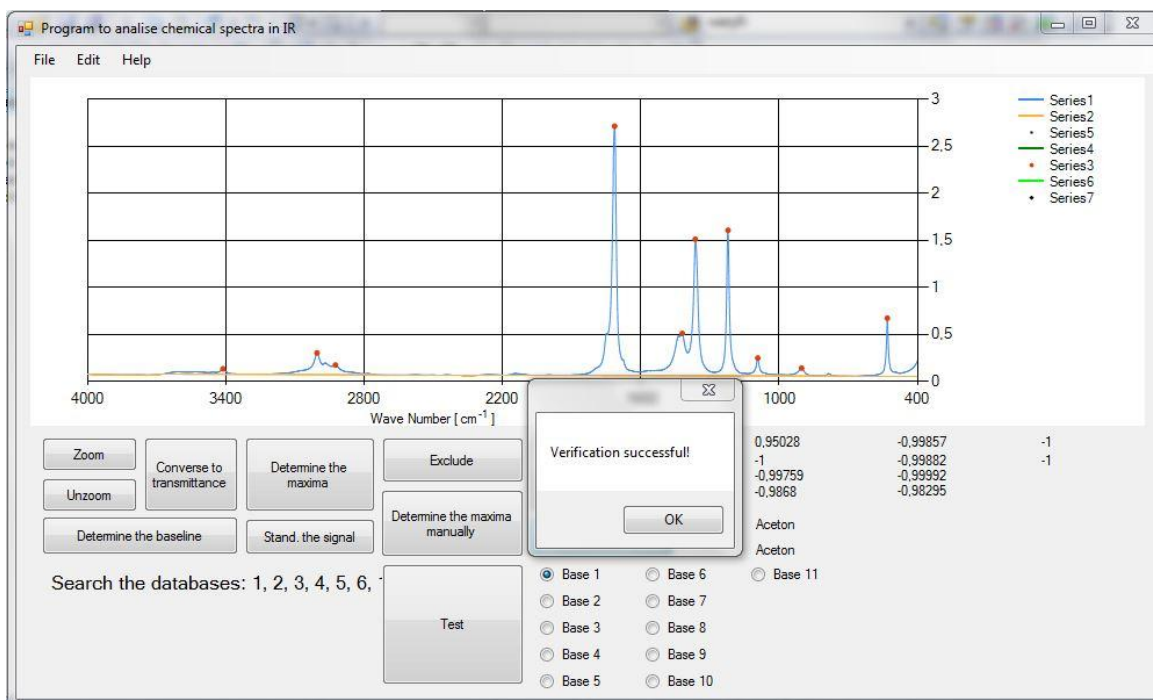
Aby umożliwić walidację procesu identyfikacyjnego należy, przed samym procesem, uruchomić funkcję *determine groups*, która automatycznie wyznaczy chemiczne grupy funkcyjne, które mogą należeć do badanej substancji. Dzięki tej opcji wyniki poddane zostaną walidacji, tzn. czy otrzymany wynik może być wytypowanym związkiem chemicznym, czyli czy należy do danej grupy (klasy) związków chemicznych. Kolejną zaletą



tej funkcji jest wskazanie, które bazy danych powinny być brane pod uwagę podczas wyszukiwania widma. Widmo podczerwone zostało podzielone na jedenaście części. Każdej części odpowiadają dwie bazy danych – jedna dotycząca wielkości punktów maksymalnych, druga położenia tych punktów. Jeśli dany związek chemiczny posiada chociaż jeden punkt maksymalny w danym przedziale widma, to będzie zaliczony do baz odpowiadających temu przedziałowi. W ten sposób program dodatkowo zabezpiecza się przed wskazaniem błędnej odpowiedzi. Użytkownik po wybraniu funkcji *determine groups* otrzymuje informację, w których bazach danych prawdopodobnie może występować widmo podczerwone danego związku chemicznego, co nie znaczy, że nie ma możliwości przeszukania pozostałych baz danych.

Proces identyfikacyjny uruchamiamy poprzez włączenie funkcji *identify*. Funkcja ta podaje wyznaczone punkty maksymalne na wejścia sztucznej sieci neuronowej. Na wyjściach sieci otrzymujemy wynik, który następnie jest weryfikowany przez program. Weryfikacja polega na sprawdzeniu do jakiej klasy związków chemicznych (na podstawie oznaczonych grup funkcyjnych) należy wskazany przez SSN związek chemiczny i porównanie jej z możliwymi innymi grupami funkcyjnymi wyznaczonymi przez program na etapie analizy widma podczerwonego.

Rezultat działania funkcji widoczny jest na rysunku 5.11. wraz z informacją o pozytywnym przejściu przez proces walidacji. Każde wyjście SSN odpowiada pojedynczej substancji zapisanej w bazie danych.



Rys.5.11. Panel główny programu po procesie identyfikacji

### 5.3 Uczenie sztucznej sieci neuronowej

Aby rozpocząć naukę SSN należy przygotować bazę danych widm podczerwonych. Baza danych składa się z trzech tabel – widma, przedziały oraz maksima. W tabeli widma przechowywane są podstawowe informacje na temat widm dodanych do bazy danych, w tabeli przedziały zawarta jest informacja, w jakich przedziałach występują punkty maksymalne w widmie substancji, natomiast w tabeli maksima przechowywane są wartości punktów maksymalnych każdego widma oraz ich położenie.

Aby dodać widmo do bazy danych należy wykonać wstępną analizę widma, a wyznaczone punkty dodać do bazy danych poprzez funkcję *insert spectrum into database*. Przed uruchomieniem tej funkcji należy wpisać nazwę i ewentualnie dodać krótki opis charakteryzujący związek chemiczny.

Funkcja *learn AAN* znajdująca się w panelu głównym programu uruchamia proces uczenia sztucznej sieci neuronowej. Uczenie odbywa się poprzez propagację wsteczną błędu. Funkcja aktywacji użyta w programie to tangens hiperboliczny:

$$f(x) = \frac{1}{1+e^{-\beta x}} - 1 \quad (5.1)$$

,który jest funkcją sigmoidalną bipolarną, czyli na wyjściu SSN otrzymamy wartości z zakresy od -1 do 1.

Długość trwania procesu uczenia SSN uzależniony jest od kilku czynników, takich jak ilość widm substancji znajdujących się w bazie danych czy różnic pomiędzy nimi, ponieważ im substancje są bardziej do siebie podobne, tym trudniej programowi znaleźć charakteryzujące je zależności (różnice), dzięki czemu będzie w stanie je odróżnić.

### 5.3.1 Dane uczące

Dane uczące to nic innego, jak dane na podstawie których SSN uczy się rozpoznawać substancje chemiczne. Program pobiera je z wcześniej przygotowanej bazy danych i podaje na wejście SSN, natomiast na wyjściu ustawia wartości oczekiwane. Jest to tzw. uczenie z nauczycielem, czyli na wyjściu sieci podajemy wartości, które chcemy, aby program otrzymywał w wyniku podania odpowiedniego sygnału na wejściu (w tym przypadku będą to punkty maksymalne widma podczerwonego oraz ich położenie). Po przygotowaniu danych uczących oraz wartości oczekiwanych należy wylosować wagi neuronów, a następnie program rozpoczyna uczenie SSN poprzez losowe podawanie na wejście wartości punktów maksymalnych danego związku chemicznego i ich położenie. W ten sposób nauczone zostaną dwie sieci neuronowe, jedna będzie odpowiadać jaki związek chemiczny został podany na wejściu sieci poprzez wartości punktów maksymalnych, a druga na podstawie ich położenia.

Otrzymane wartości na wyjściu sieci są odejmowane od wartości oczekiwanych. Na warstwach poprzedzającej warstwę wyjściową błąd jest liczony wg zasad, które zostały opisane we wcześniejszych rozdziałach niniejszej pracy.

Warto nadmienić, że błąd jest obliczany przy wykorzystaniu pochodnej funkcji aktywacji opisanej wzorem:

$$f'(x) = 1 - a^2 \quad (5.2)$$

, gdzie  $a$  to funkcja aktywacji (5.1).

### 5.3.2 Modyfikacja algorytmu uczenia

Korzystając ze standardowego algorytmu uczenia wstecznej propagacji błędów nie udało się w pełni uzyskać jednej z najcenniejszych własności sztucznych sieci neuronowych, czyli uogólniania zdobytej wiedzy. O ile skuteczność identyfikacji substancji chemicznych na podstawie położenia i wartości punktów maksymalnych w poszczególnych pasmach była wysoka, to w chwili podania na wejście lekko zmodyfikowanych danych uczących, sieć traciła zdolność wskazywania najbardziej podobnego związku chemicznego [59]. Działanie to wymusiło modyfikację algorytmu uczenia w taki sposób, aby uczyć sieć rozpoznawania związków podobnych do tych znajdujących się w bazie danych. Wypróbowano kilka modyfikacji, jednak najlepsze rezultaty uzyskano poprzez modyfikację algorytmu uczenia w ten sposób, że na wejście sieci podawane były na przemian dane uczące, oraz dane uczące zmodyfikowane o pewną zadaną wartość. Aby uniknąć uczenia „na pamięć” nie podawano na wejścia sieci danych w sposób iteracyjny, lecz w sposób losowy. Dzięki zastosowaniu tej prostej modyfikacji uzyskano lepsze wyniki odpowiedzi SSN na zadany sygnał, niż miało to miejsce przy standardowej metodzie uczenia sieci.

W celu sprawdzenia poprawności uczenia sztucznych sieci neuronowych została przygotowana funkcja *Test*, która podaje na wejście sieci zmodyfikowane dane uczące. Pozwala to sprawdzić poprawność odpowiedzi na zadany sygnał wejściowy nie tylko danych uczących, ale również danych różniących się o określoną wartość procentową.

Tabela 5.1. przedstawia odpowiedzi sieci dla danych testowych.

**Tabela 5.1.** Wartość wyjść sztucznej sieci neuronowej dla danych testowych zmodyfikowanych o określone części procentowe.

<b>Numer wyjścia</b>	<b>Wartość oczekiwana</b>	<b>Modyfikacja o 1%</b>	<b>Modyfikacja o 2 %</b>	<b>Modyfikacja o 5%</b>	<b>Modyfikacja o 10%</b>
<b>1</b>	-1	-0,99987	-0,99996	-0,99996	-0,99994
<b>2</b>	1	0,97879	0,97383	0,87985	0,11443
<b>3</b>	-1	-0,99998	-0,99998	-0,99986	-0,99972
<b>4</b>	-1	-0,9993	-0,99904	-0,8114	0,94359
<b>5</b>	-1	-0,99995	-0,99994	-0,99991	-0,99986

Z powyższej tabeli można wywnioskować, że dzięki modyfikacji algorytmu uczenia udało się otrzymać jedną z najważniejszych właściwości sztucznych sieci neuronowych – uogólnianie zdobytej wiedzy. Jest to cecha bardzo przydatna, zwłaszcza w opisywanym procesie interpretacji widm w podczerwieni, gdyż zwykle widma te nie są jednakowe i występują w nich drobne różnice, które mogą wpływać na wynik identyfikacyjny. W powyższym przykładzie można zaobserwować, że zmiany, które istotnie wpłynęły na wynik identyfikacyjny były na poziomie 10% co należy uznać za bardzo dobry rezultat.

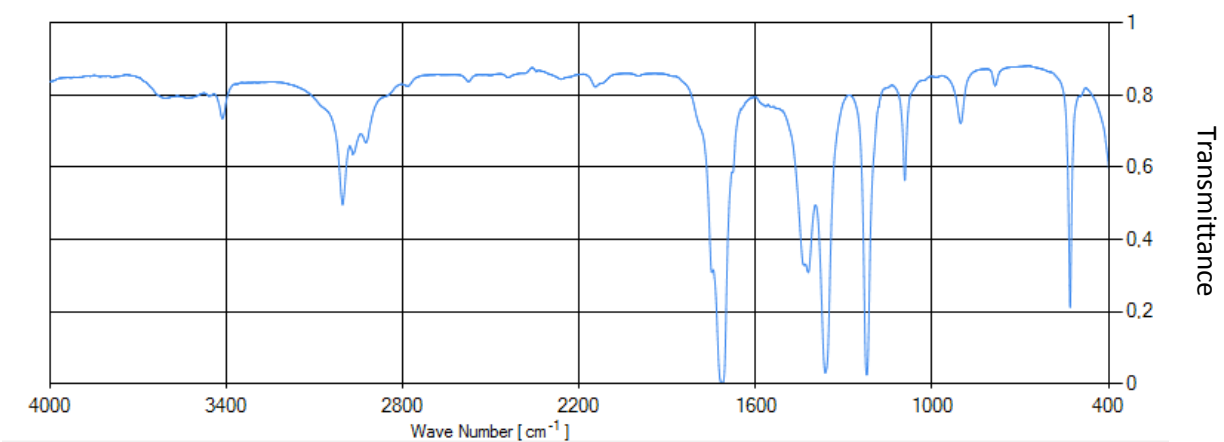
## 6. Badania eksperymentalne

Dla sprawdzenia słuszności założeń teoretycznych sprecyzowanych w celu pracy, identyfikację związków chemicznych przetestowano w dwojaki sposób. Najpierw przeprowadzono badania podstawowe, które miały na celu sprawdzenie poprawności działania zamodelowanego procesu interpretacji widm w podczerwieni. W tym celu przetestowano rozpoznawanie jednoskładnikowych związków chemicznych tj. monosubstancji chemicznych. Drugi etap badań miał na celu sprawdzenie, jak właściwości sztucznych sieci neuronowych sprawdzą się w przypadku rozpoznawania lub rozróżniania widm o bardzo podobnych strukturach oraz mieszanin kilku związków chemicznych.

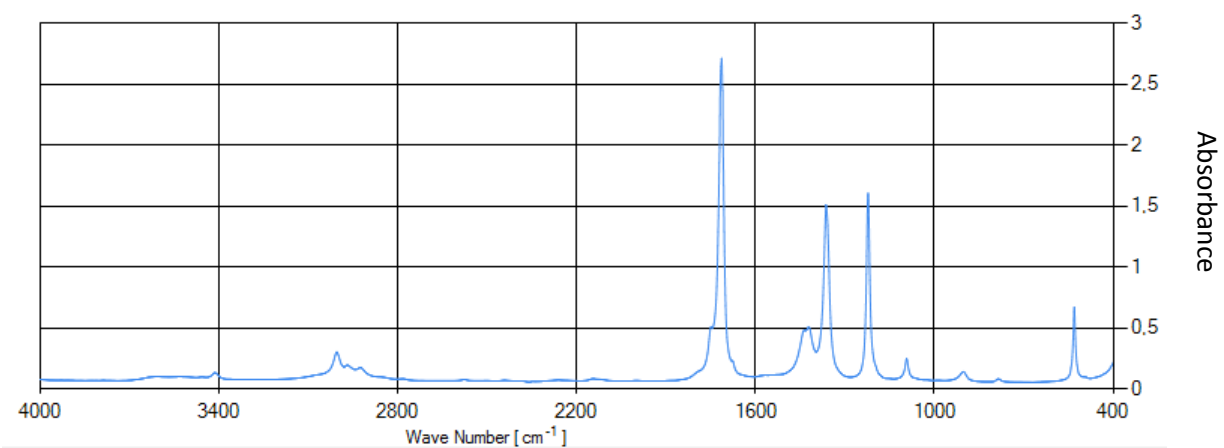
Wszystkie widma zostały wykonane na Wydziale Chemii Uniwersytetu Opolskiego przez wykwalifikowanego laboranta, co gwarantuje dobrą jakość ich wykonania oraz brak wpływu na otrzymane modele neuronowe oraz wyniki badań symulacyjnych. Widma wykonywane były według instrukcji załączonej do spektrometru [68] oraz według opisu załączonego do oprogramowania [68]. Preparacja próbek była wykonywana według standardowych procedur zamieszczonych w instrukcji stanowiskowej [3]. Widma trudno dostępnych substancji (np. Amfetamina) pobrano z wersji demonstracyjnej biblioteki widm dołączonej do oprogramowania.

### 6.1 Analiza układów jednoskładnikowych

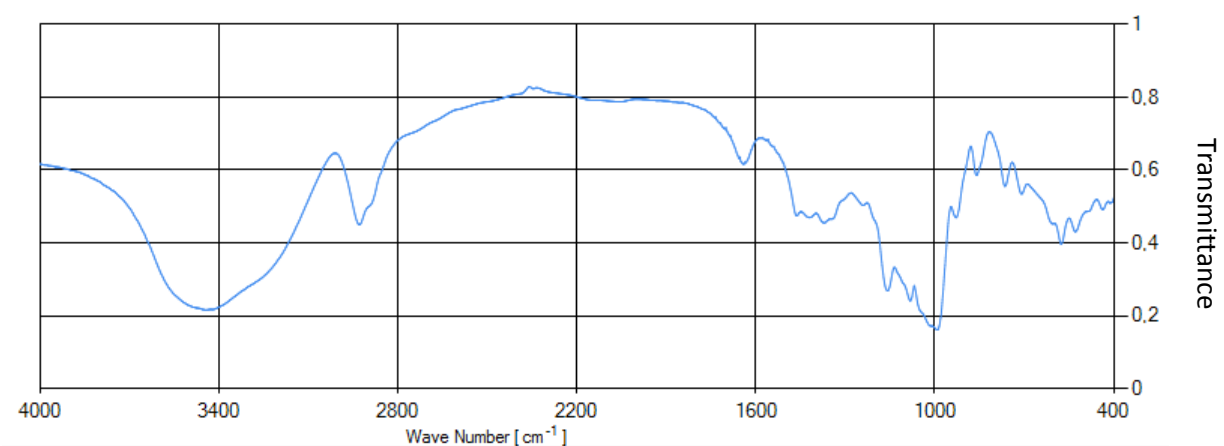
Do przeprowadzenia badania została opracowana baza danych zawierająca 50 widm różnych klas związków chemicznych. Widma zostały przygotowane do procesu uczenia sztucznych sieci neuronowych poprzez specjalnie napisany do tego celu program. Następnie sieć została nauczona rozpoznawać dane uczące poprzez propagację wsteczną błędu, jako algorytm uczący. Na rysunkach **6.1.a**, **6.2.a**, **6.3.a**, **6.4.a** i **6.5.a** pokazano przykładowe widma związków chemicznych (zapisanych w transmitancji), które zostały użyte podczas procesu uczenia, natomiast na rysunkach **6.1.b**, **6.2.b**, **6.3.b**, **6.4.b** oraz **6.5.b** widoczne są widma tych samych substancji po przekształceniu transmitancji na absorbancje.



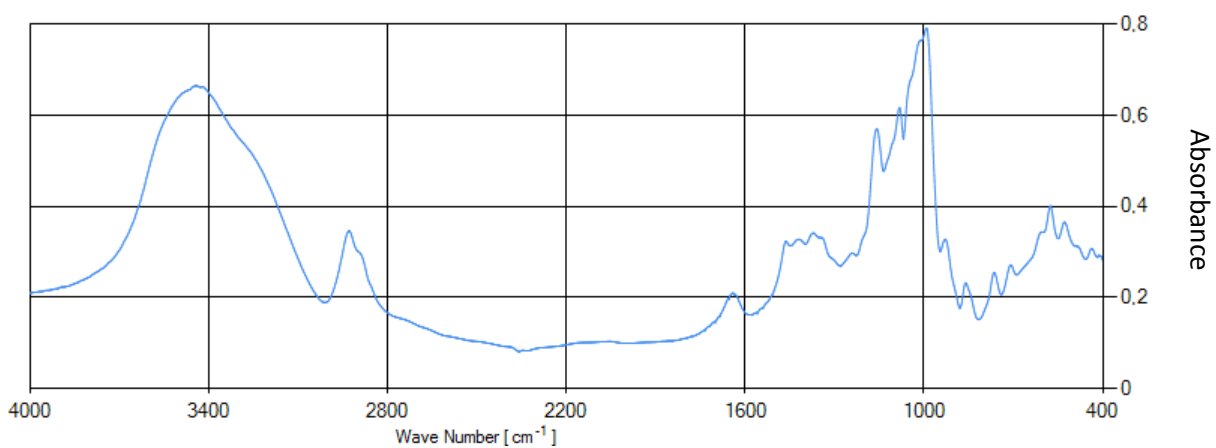
**Rys.6.1.a** Widmo transmisyjne Acetonu



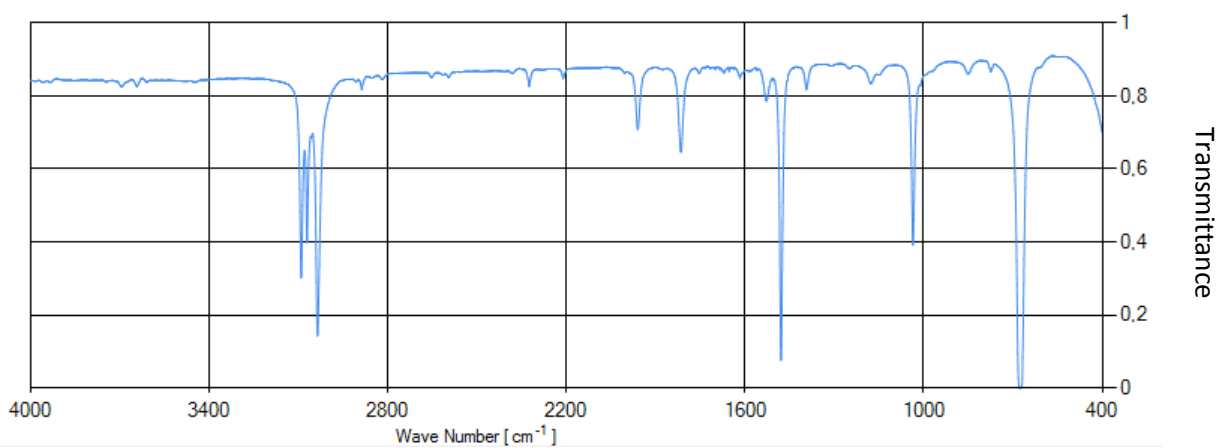
**Rys.6.1.b** Widmo absorpcyjne Acetonu



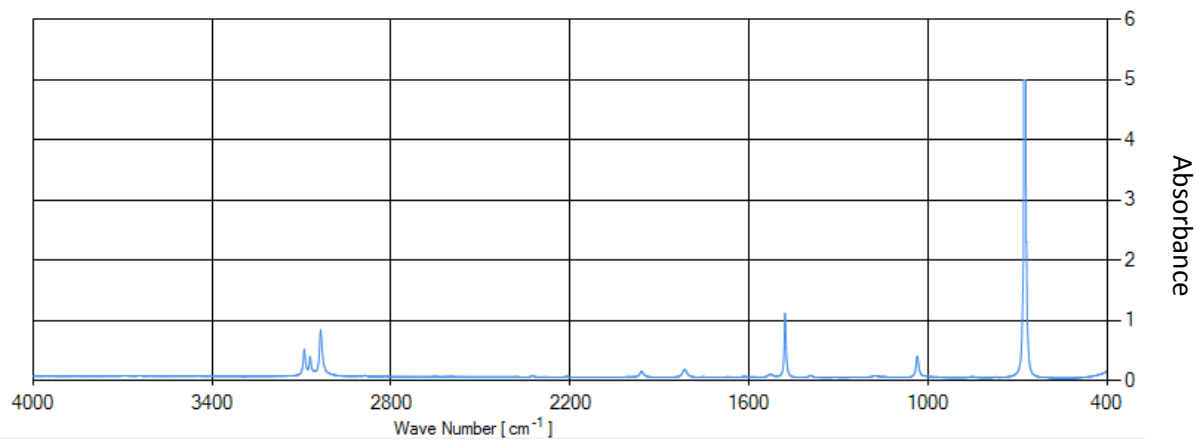
**Rys.6.2.a** Widmo transmisyjne Atmeru (izo-Dekanol-1)



**Rys.6.2.b** Widmo absorpcyjne Atmeru

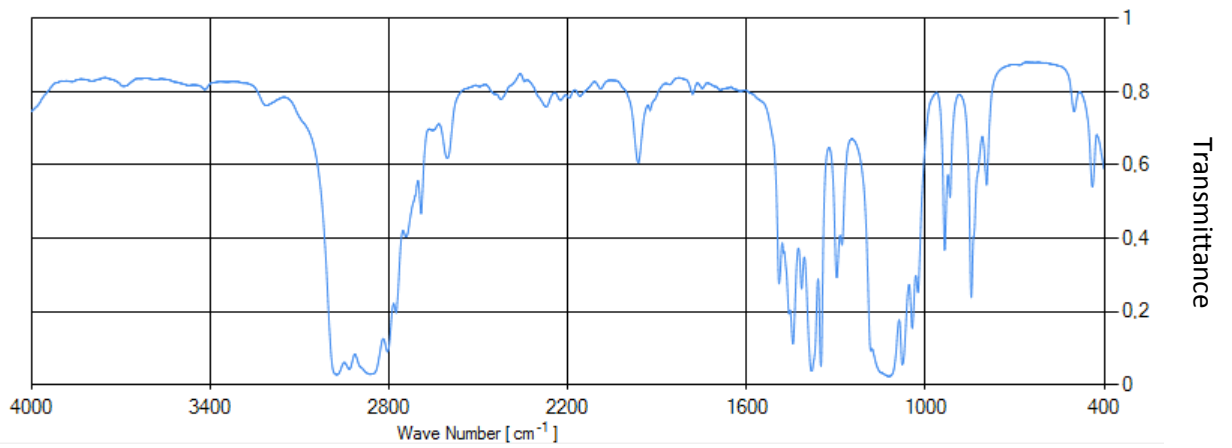


**Rys.6.3.a** Widmo transmisyjne Benzenu

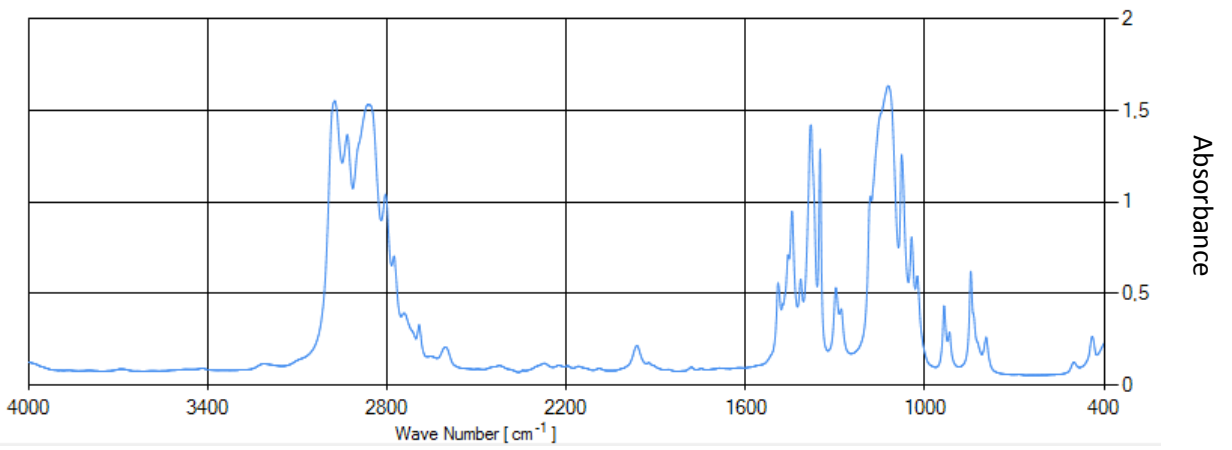


**Rys.6.3.b** Widmo absorpcyjne Benzenu

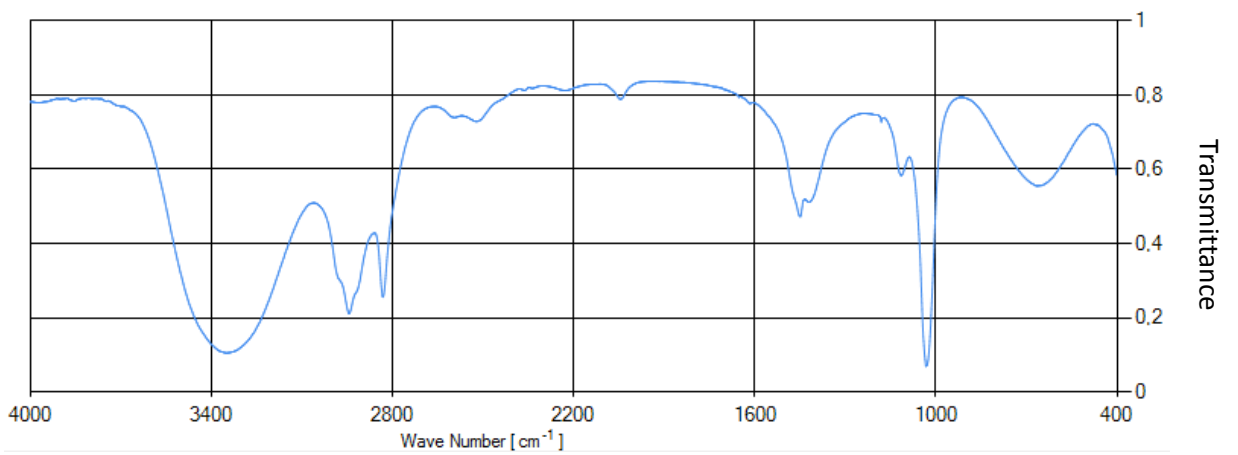




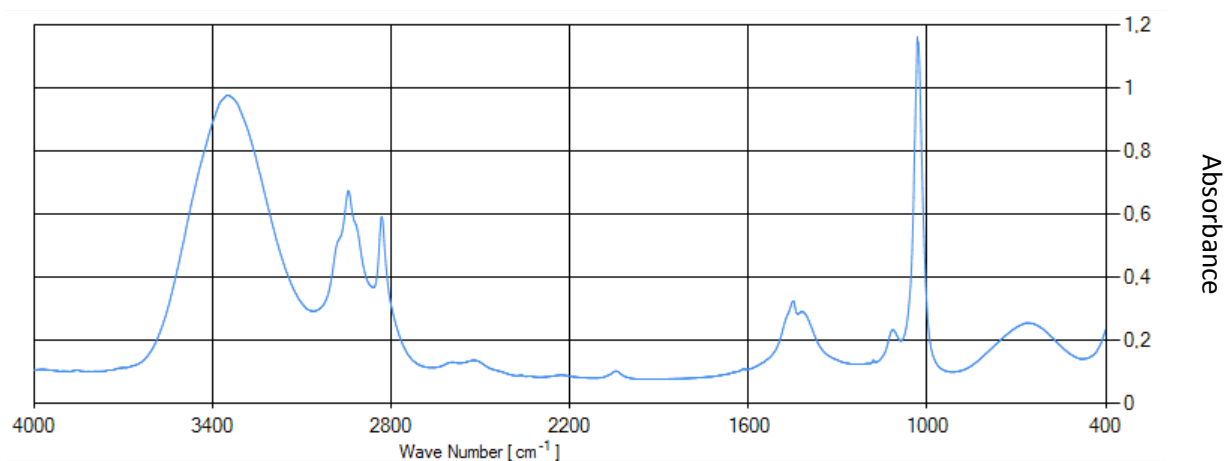
**Rys.6.4.a** Widmo transmisyjne Eteru etylowego



**Rys.6.4.b** Widmo absorpcyjne Eteru etylowego

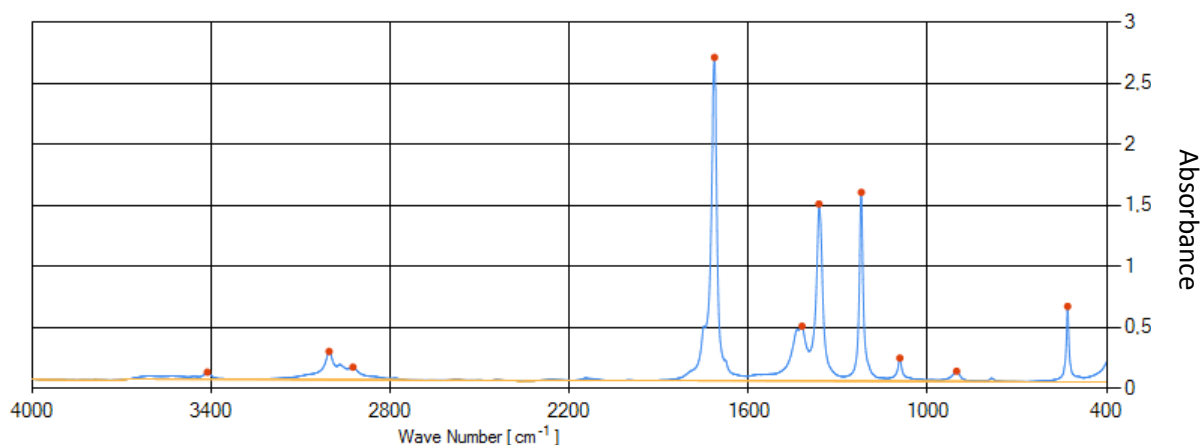


**Rys.6.5.a** Widmo transmisyjne Metanolu

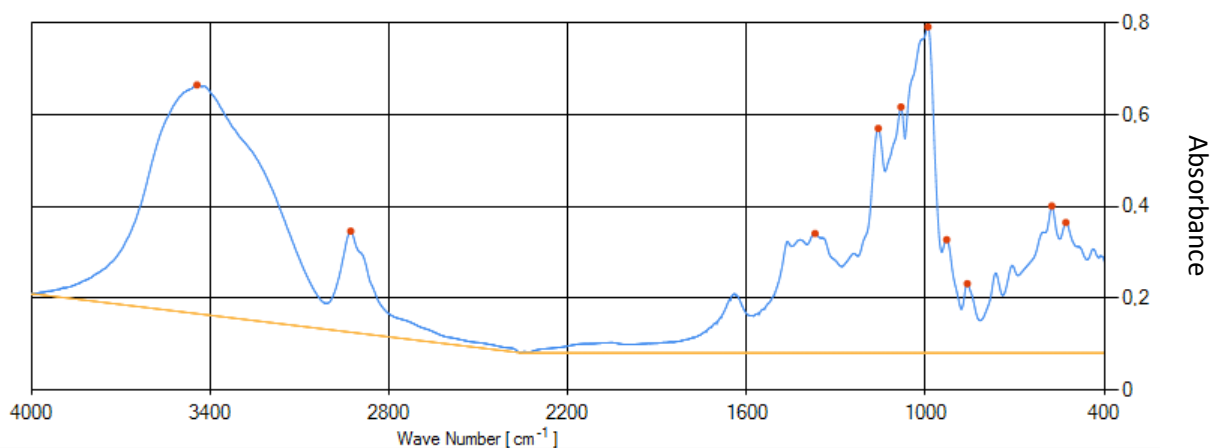


**Rys.6.5.b** Widmo absorpcyjne Metanolu

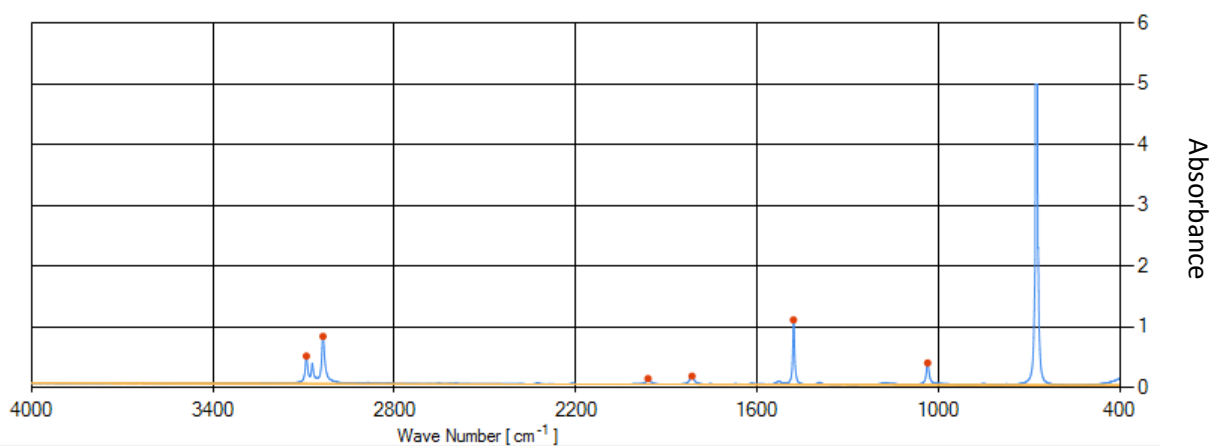
Rysunki **6.1.c**, **6.2.c**, **6.3.c**, **6.4.c** i **6.5.c** przedstawiają widma absorpcyjne z wyznaczoną linią bazową (linia żółta) oraz punktami maksymalnych absorbancji (punkty czerwone), których wartość oraz położenie będzie wykorzystane podczas procesu uczenia sztucznej sieci neuronowej.



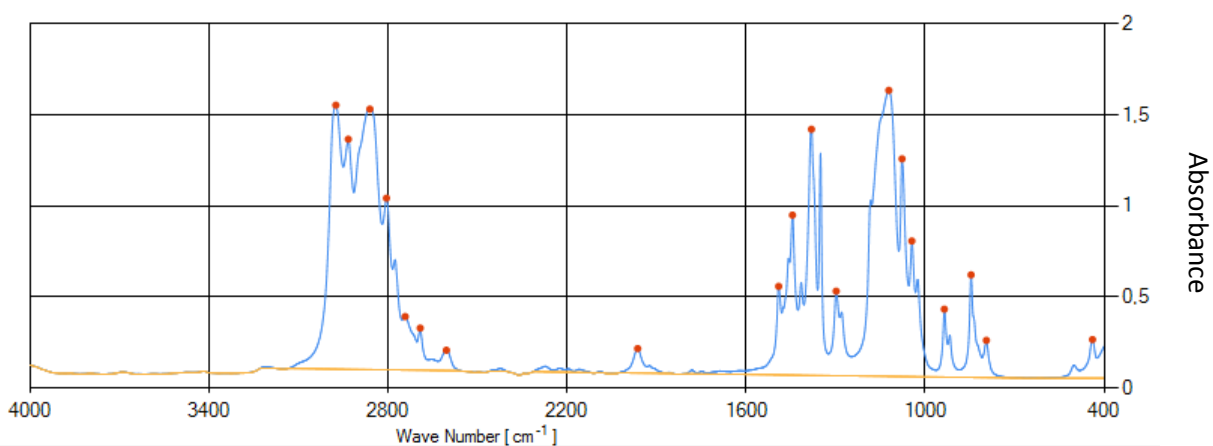
**Rys.6.1.c** Widmo absorpcyjne Acetonu z wyznaczoną linią bazową oraz punktami maksymalnymi



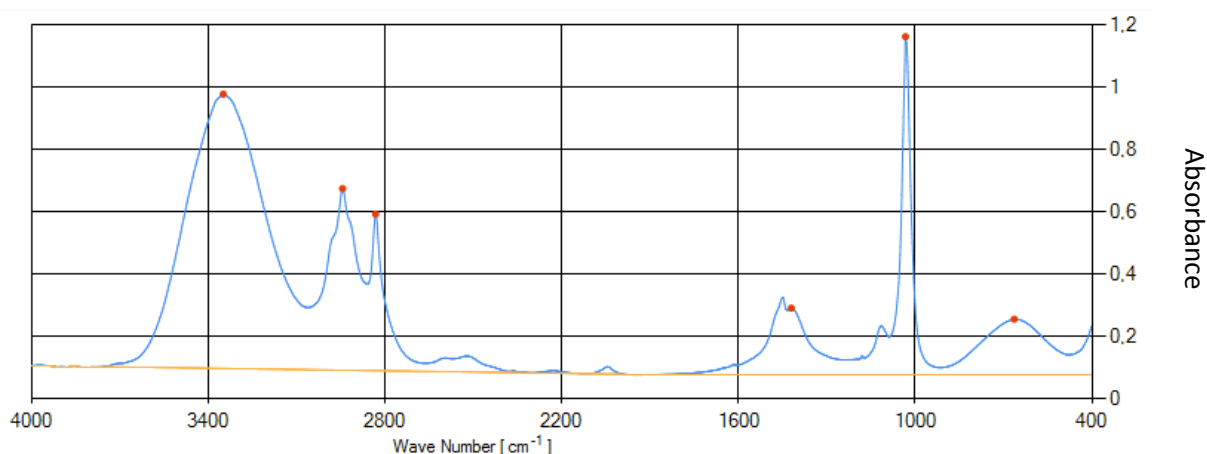
**Rys.6.2.c** Widmo absorpcyjne Atmeru z wyznaczoną linią bazową oraz punktami maksymalnymi



**Rys.6.3.c** Widmo absorpcyjne Benzenu z wyznaczoną linią bazową oraz punktami maksymalnymi



**Rys.6.4.c** Widmo absorpcyjne Eteru z wyznaczoną linią bazową oraz punktami maksymalnymi



*Rys.6.5.c Widmo absorpcyjne Metanolu z wyznaczoną linią bazową oraz punktami maksymalnymi*

W tabeli **6.1.** przedstawiono wartości punktów maksymalnych po procesie normalizacji, która polega na wyznaczeniu punktów tak, że maksymalna wartość wynosi 1, a minimalna 0. Należy dodać, że wyszukiwanych jest co najwyżej 20 punktów maksymalnych. Zazwyczaj w widmach występuje 15-30 maksimów. W przypadku wykrycia większej ilości program ogranicza je do 20 najwyższych wartości, co jest wystarczające do przeprowadzenia poprawnej interpretacji widm.

**Tab.6.1** Wartości punktów maksymalnych pasm absorpcji wybranych widm związków chemicznych

<b>Nr pkt. maks.</b>	<b>Aceton</b>	<b>Atmer</b>	<b>Benzen</b>	<b>Eter</b>	<b>Metanol</b>
<b>1</b>	1	1	1	1	1
<b>2</b>	0,5837261	0,7541652	0,7310214	0,9228712	0,8113226
<b>3</b>	0,547359	0,7015851	0,4263122	0,910825	0,5372005
<b>4</b>	0,2332636	0,6885753	0,3390065	0,8603874	0,463156
<b>5</b>	0,1693595	0,4505282	0,1281469	0,8045552	0,1970622
<b>6</b>	0,08729737	0,3998213	0,08940856	0,7609597	0,1644093
<b>7</b>	0,07154877	0,3663159	-	0,6002357	-
<b>8</b>	0,03888361	0,3472842	-	0,5593262	-
<b>9</b>	0,03149752	0,3102185	-	0,4744351	-
<b>10</b>	0,02213695	0,2123704	-	0,3586368	-
<b>11</b>	-	-	-	0,3094452	-
<b>12</b>	-	-	-	0,2955685	-
<b>13</b>	-	-	-	0,237613	-
<b>14</b>	-	-	-	0,1869657	-
<b>15</b>	-	-	-	0,1473681	-
<b>16</b>	-	-	-	0,1351227	-
<b>17</b>	-	-	-	0,1303013	-
<b>18</b>	-	-	-	0,08577783	-
<b>19</b>	-	-	-	0,07099328	-
<b>20</b>	-	-	-	-	-

W tabeli 6.2 przedstawiono wartości wyjść sztucznej sieci neuronowej odpowiadające danym widmom dla danych uczących. Wyjście 1 wskazywało jako wynik klasyfikacji na Aceton, wyjście drugie wskazywało na Atmer, wyjście trzecie wskazywało na Benzen, wyjście czwarte na Eter, wyjście piąte na Metanol. Jak widać na przedstawionych

wynikach sztuczna sieć neuronowa poprawnie przeprowadziła proces interpretacji widm, o czym świadczą wartości na poszczególnych wyjściach sieci.

**Tab.6.2** Wartości wybranych wyjść sztucznej sieci neuronowej dla poszczególnych związków chemicznych (dane uczące).

	<b>Wyjście 1</b>	<b>Wyjście 2</b>	<b>Wyjście 3</b>	<b>Wyjście 4</b>	<b>Wyjście 5</b>
<b>Aceton</b>	<b>0,9990</b>	0,0003	0,0129	-0,0101	-0,0153
<b>Atmer</b>	0,0005	<b>0,9993</b>	-0,0163	-0,0071	0,0121
<b>Benzen</b>	0,0124	-0,0025	<b>0,9985</b>	0,0063	0,0005
<b>Eter</b>	-0,0004	-0,0022	-0,0005	<b>0,9997</b>	0,0017
<b>Metanol</b>	-0,0034	-0,0019	0,0027	-0,0084	<b>0,9994</b>

W tabeli 6.3 przedstawiono wyniki wyjść odpowiadające danym widmom dla danych testowych, dla których sieć również uzyskała pozytywne wyniki interpretacji widm.

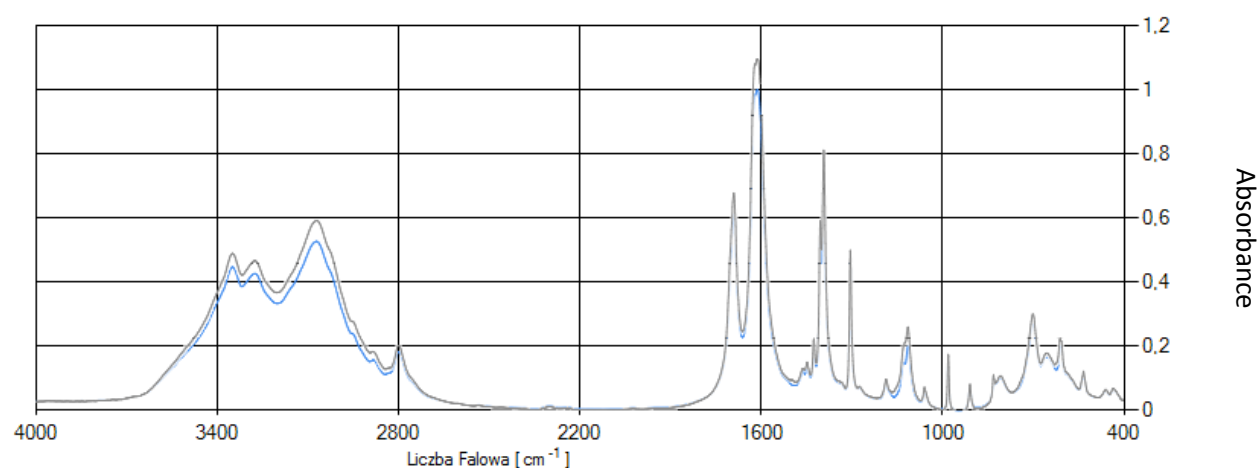
**Tab.6.3** Wartości wybranych wyjść sztucznej sieci neuronowej dla poszczególnych związków chemicznych (dane testowe).

	<b>Wyjście 1</b>	<b>Wyjście 2</b>	<b>Wyjście 3</b>	<b>Wyjście 4</b>	<b>Wyjście 5</b>
<b>Aceton</b>	<b>0,9075</b>	0,0593	-0,0368	-0,0051	-0,0046
<b>Atmer</b>	-0,0614	<b>0,9846</b>	-0,0594	0,0899	-0,0269
<b>Benzen</b>	0,0504	0,0600	<b>0,9206</b>	-0,0558	0,1527
<b>Eter</b>	-0,0154	0,0305	-0,0199	<b>0,9541</b>	-0,0044
<b>Metanol</b>	0,0042	-0,0400	0,0774	0,0563	<b>0,9962</b>

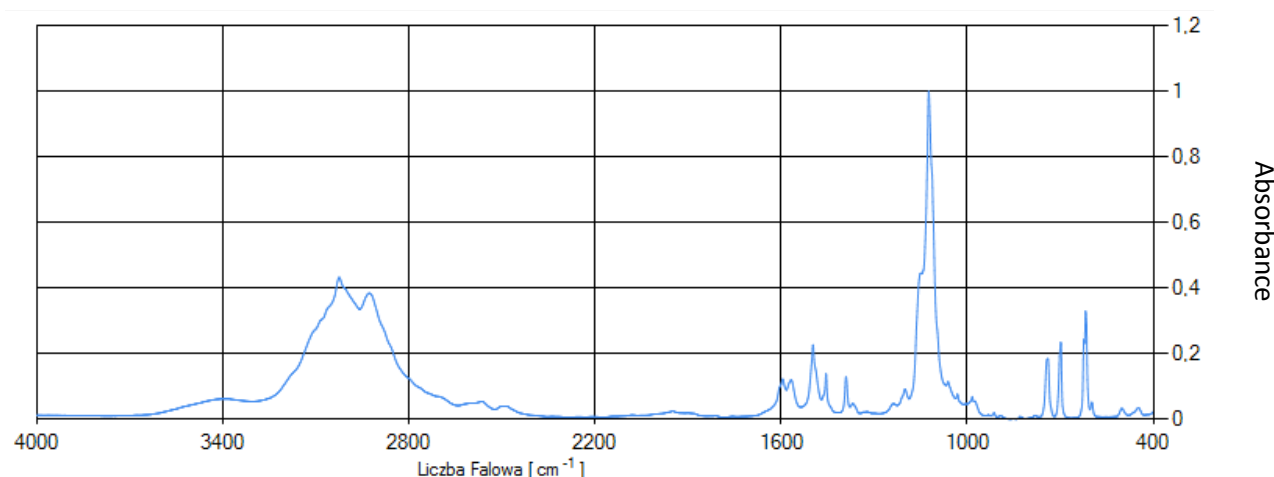
Podsumowując sieć sklasyfikowała widma prawidłowo zarówno dla danych uczących, jak i dla danych testowych udowadniając słuszność stawianym tezom.

## 6.2 Analiza układów dwuskładnikowych

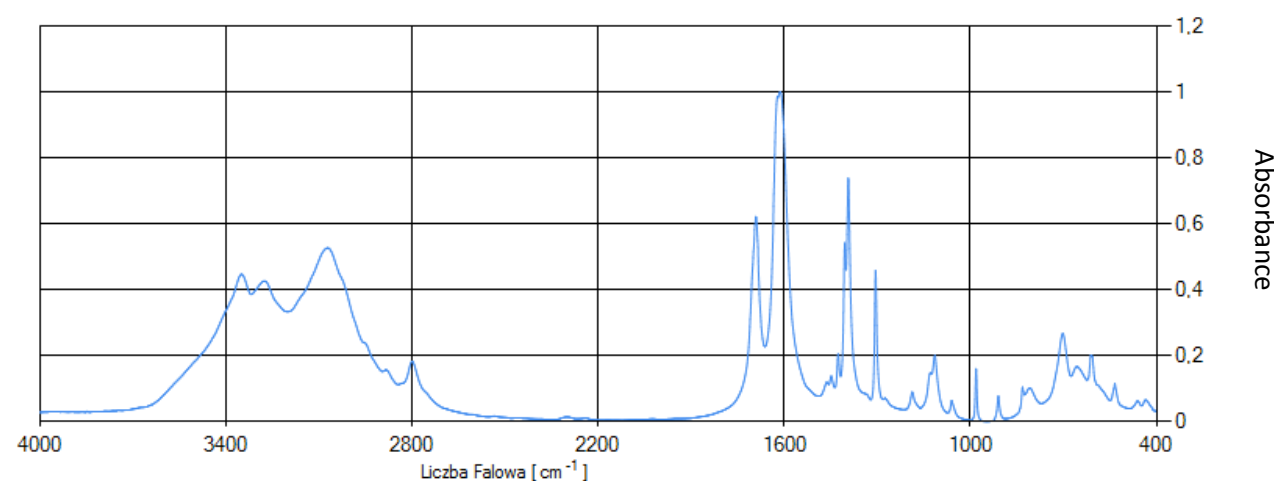
W celu potwierdzenia skuteczności metody identyfikacyjnej związków chemicznych na podstawie ich widm w podczerwieni z wykorzystaniem SSN wykonano badania mieszaniny dwóch związków chemicznych – kreatyniny oraz amfetaminy. Głównym powodem wyboru tych dwóch substancji była ich zbliżona budowa, która powoduje, że pasma absorpcji widm nakładają się na siebie utrudniając tym samym ich identyfikację (**rys. 6.6**). Podczas wizyty autora niniejszej pracy w Laboratorium Kryminalistycznym Policji w Opolu oraz Instytucie Ciężkiej Syntezy Organicznej w Kędzierzynie-Koźlu zaobserwowano również zapotrzebowanie praktyczne na badanie tego typu układów. Na **rys.6.7** widoczne jest widmo absorpcyjne amfetaminy, natomiast na **rys.6.8** widmo absorpcyjne kreatyniny.



**Rys.6.6** Widma absorpcyjne mieszaniny amfetaminy(5%) i kreatyniny(95%) (kolor szary) oraz kreatyniny (100% - kolor niebieski)



**Rys.6.7** Widmo absorpcyjne amfetaminy



**Rys.6.8** Widmo absorpcyjne kreatyniny

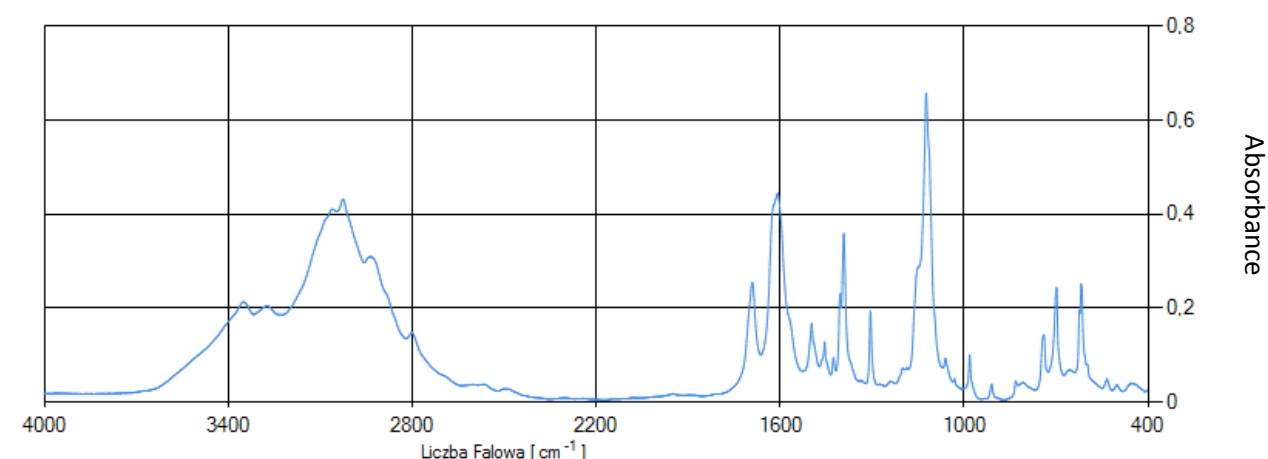
Dzięki temu, że oba widma zostały wykonane metodą FTIR (Fourier Transform Infrared Spectroscopy) możliwe jest ich komputerowe składanie w celu uzyskania widm mieszanin o różnych składach. W ten właśnie sposób zostało utworzonych czternaście widm mieszanin z zawartością widma amfetaminy od 5% do 95% z krokiem co 5% (5, 10, 15, 20, 25, 85, 90, 95 procent) oraz co 10% (30, 40, 50, 60, 70, 80 procent).

Oba widma czystych monosubstancji mają pasma charakterystyczne przy podobnych liczbach falowych, a dodatkową trudność stanowi fakt, że pasma w momencie zmieszania widm tych dwóch substancji nakładają się na siebie zacierając różnice, co bardzo utrudnia późniejszą identyfikację składników mieszaniny. Na **rys.6.9** widoczne jest widmo mieszaniny kreatyniny (40%) i amfetaminy (60%). Na **rys.6.10** widać natomiast tę samą

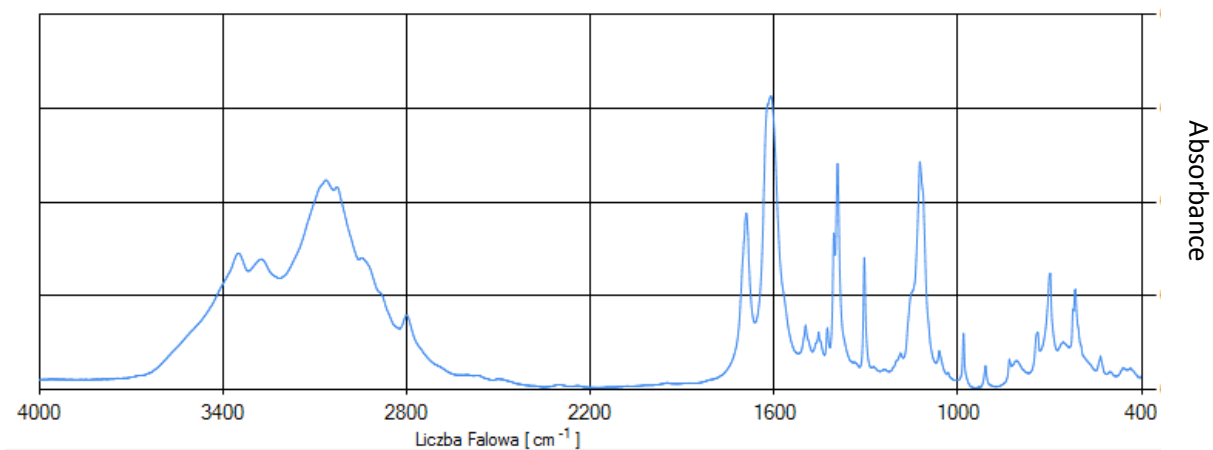


mieszaninę, lecz przy odwróconych proporcjach (kreatynina – 60%, amfetamina – 40%). O ile w tym przypadku można nieuzbrojonym okiem wychwycić różnicę pomiędzy tymi dwoma widmami, to w przypadku, gdy amfetamina jest tylko w 5% składnikiem mieszaniny, występuje problem z zauważeniem różnic pomiędzy widmem czystej kreatyniny, a tej mieszaniny, co widać na **rys.6.11**.

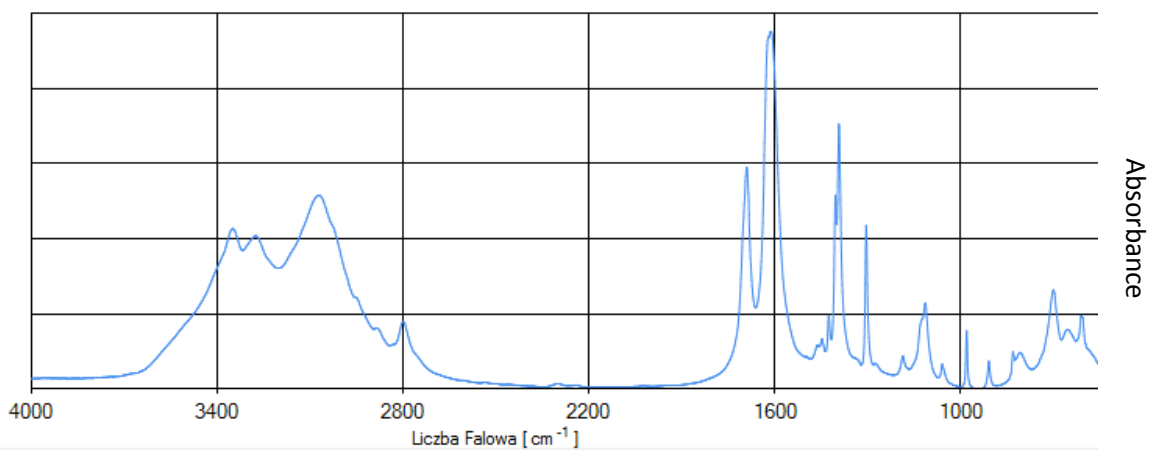
Opracowaną bazę 16 widm wykorzystano do nauki SSN identyfikacji mieszanin dwuskładnikowych i pojedynczych związków. SSN poradziła sobie ze znalezieniem minimalnych różnic między widmami, co wykorzystała przy ich późniejszej identyfikacji. Na 16 widm badanych próbek, SSN po procesie uczenia była w stanie rozróżnić wszystkie badane widma. W tym przypadku poradziła sobie o wiele lepiej niż dotychczas stosowane programy identyfikujące, natrafiające na problemy, gdy amfetaminy w mieszaninie było dużo mniej niż kreatyniny.



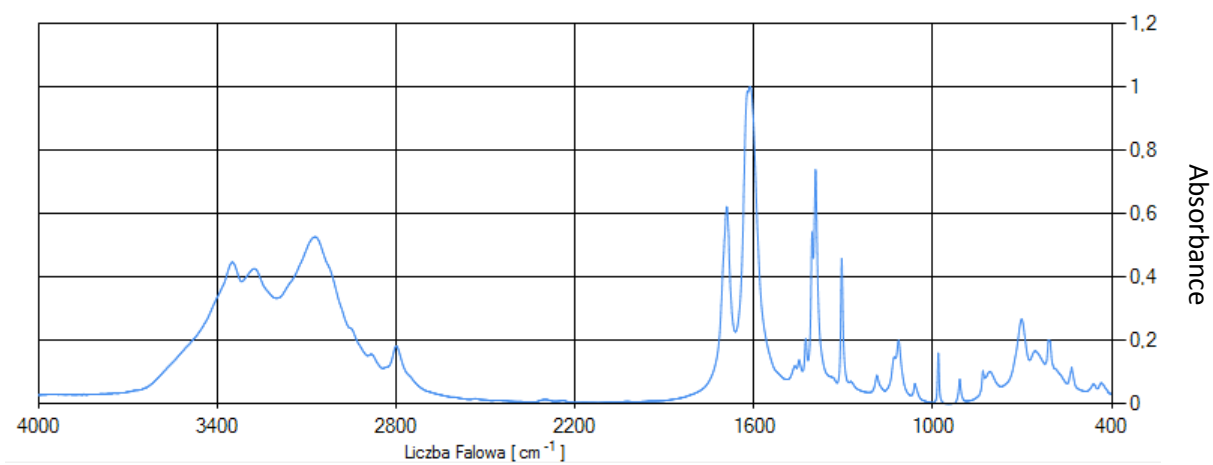
**Rys.6.9** Widmo absorpcyjne mieszaniny kreatyniny (40%) i amfetaminy (60%)



**Rys.6.10** Widmo absorpcyjne mieszaniny kreatyniny (60%) i amfetaminy (40%)



**Rys.6.11** Widmo absorpcyjne mieszaniny kreatyniny (95%) i amfetaminy (5%)



**Rys.6.12** Widmo absorpcyjne kreatyniny

W tabeli 6.4 przedstawiono wartości wyjść sztucznej sieci neuronowej dla danych uczących, natomiast w tabeli 6.5 widoczne są wartości wyjść dla danych testowych. Jak widać sieć była w stanie odnaleźć charakterystyki pozwalające poprawnie zinterpretować badane widma.

**Tab.6.4** Wartości wybranych wyjść sztucznej sieci neuronowej dla poszczególnych związków chemicznych oraz ich mieszanin (dane uczące).

	Wyjście 1	Wyjście 2	Wyjście 3	Wyjście 4	Wyjście 5
<b>Amfetamina</b>	<b>0,9573</b>	-0,0048	-0,0038	-0,0042	-0,0134
<b>Kreatynina</b>	-0,0147	<b>0,9805</b>	-0,0051	-0,0054	-0,0144
<b>5% Amfet.</b>	-0,0053	-0,0035	<b>0,9752</b>	-0,0045	-0,0058
<b>60% Amfet.</b>	0,0087	0,0042	0,0045	<b>0,9918</b>	0,0088
<b>95% Amfet.</b>	0,0117	-0,0071	-0,0072	-0,0081	<b>0,9590</b>

**Tab.6.5** Wartości wybranych wyjść sztucznej sieci neuronowej dla poszczególnych związków chemicznych oraz ich mieszanin (dane testowe).

	Wyjście 1	Wyjście 2	Wyjście 3	Wyjście 4	Wyjście 5
<b>Amfetamina</b>	<b>0,9766</b>	-0,0637	-0,8221	-0,0252	-0,5446
<b>Kreatynina</b>	-0,0923	<b>0,9782</b>	0,0552	0,1126	0,0080
<b>5% Amfet.</b>	0,0079	0,1569	<b>0,9802</b>	-0,1305	0,0945
<b>60% Amfet.</b>	0,0615	-0,0500	-0,1760	<b>0,9931</b>	-0,0886
<b>95% Amfet.</b>	-0,2788	-0,0906	0,0813	-0,0142	<b>0,9870</b>

Powyższe wyniki pokazują, że sztuczna sieć neuronowa jest w stanie skutecznie rozpoznawać mieszaniny dwóch substancji, gdy posiada dokładne dane widmowe. Ciekawie prezentują się odpowiedzi sieci, gdy została nauczona na bazie widm substancji jednoskładnikowych, a nie ich mieszaninami (tabela 6.6).

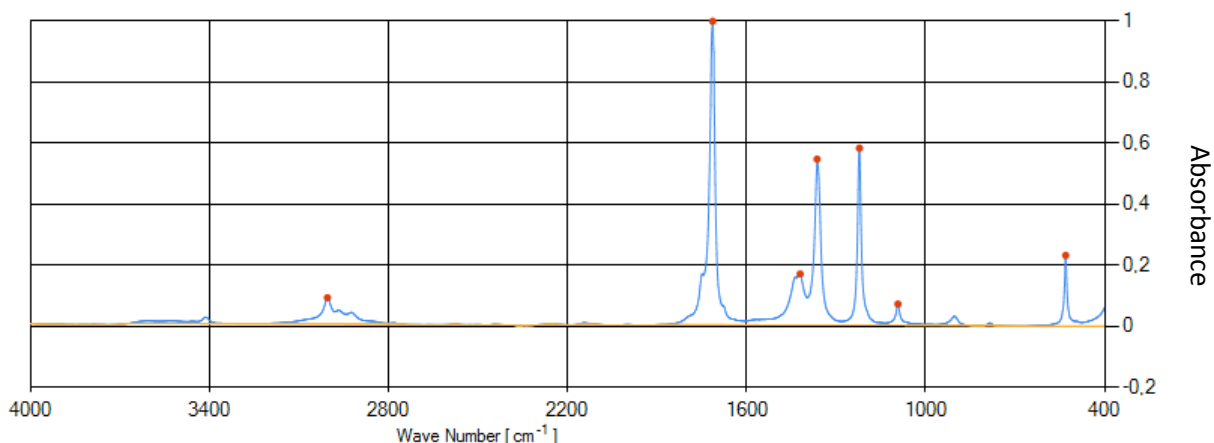
**Tab.6.6** Wartości wyjść sztucznej sieci neuronowej dla poszczególnych związków chemicznych.

	<b>Amfetamina</b>	<b>Kreatynina</b>
<b>Amfetamina</b>	0,9999	-0,0003
<b>Kreatynina</b>	-0,0001	0,9999
<b>5% Amfet.</b>	-0,0691	0,9999
<b>10% Amfet.</b>	-0,1863	0,9999
<b>15% Amfet.</b>	-0,2141	0,9999
<b>20% Amfet.</b>	0,3688	0,9999
<b>25% Amfet.</b>	0,5480	0,9999
<b>30% Amfet.</b>	0,2409	0,9999
<b>40% Amfet.</b>	0,3425	0,9999
<b>50% Amfet.</b>	-0,4132	0,9999
<b>60% Amfet.</b>	0,3481	0,9999
<b>70% Amfet.</b>	0,8370	0,9999
<b>80% Amfet.</b>	0,9986	0,9988
<b>85% Amfet.</b>	0,9997	0,9941
<b>90% Amfet.</b>	0,9999	0,9397
<b>95% Amfet.</b>	0,9999	0,2942

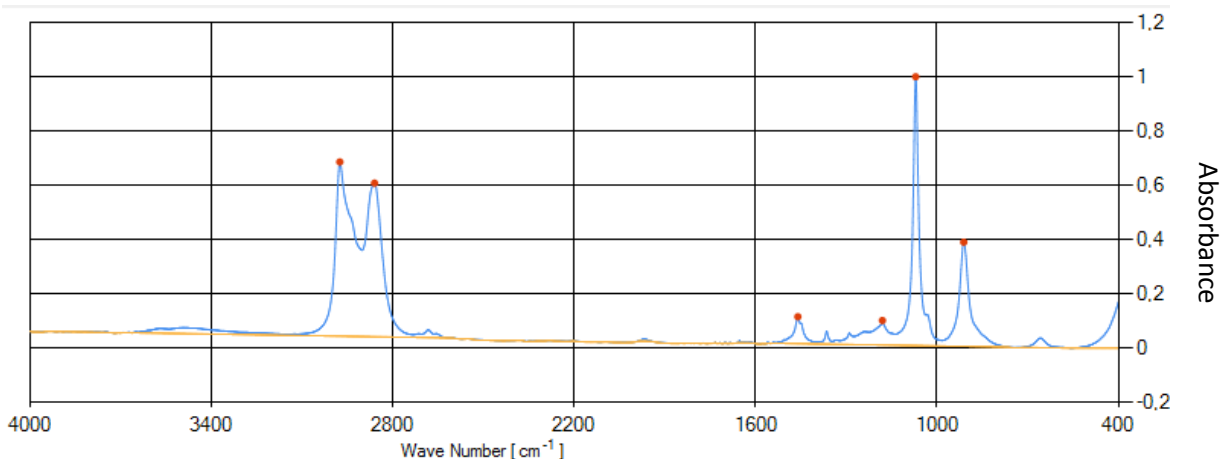
Sieć nauczona rozpoznawania mieszanin związków chemicznych jest w stanie znaleźć charakterystyki, dzięki którym może sklasyfikować związek chemiczny, bądź też jego mieszaninę. W sytuacji, gdy sieć nie została nauczona wzorcami mieszanin, również wykazuje zmiany na wyjściu, sygnalizując możliwość występowania substancji nawet w niewielkich ilościach.

### 6.3 Analiza układów trzyskładnikowych

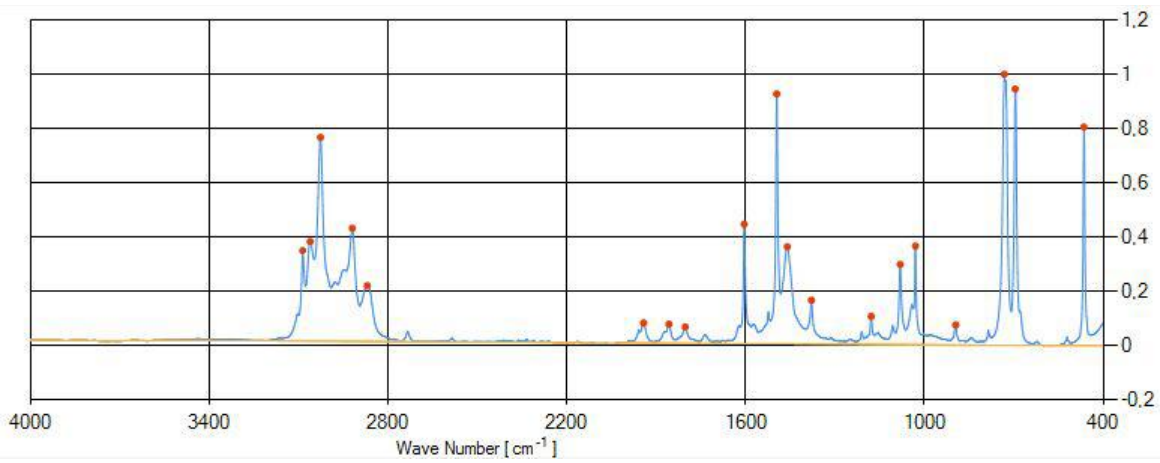
Do przeprowadzenia badania została opracowana baza danych składająca się z 10 jednoskładnikowych związków chemicznych. Celem badania było sprawdzenie skuteczności działania procesu interpretacji dla widm mieszaniny trzech substancji chemicznych. Na rysunkach 6.13, 6.14, 6.15, 6.16 widoczne są widma jednoskładnikowych substancji, które następnie zostały poddane procesowi mieszania w różnych proporcjach (tabela 6.7).



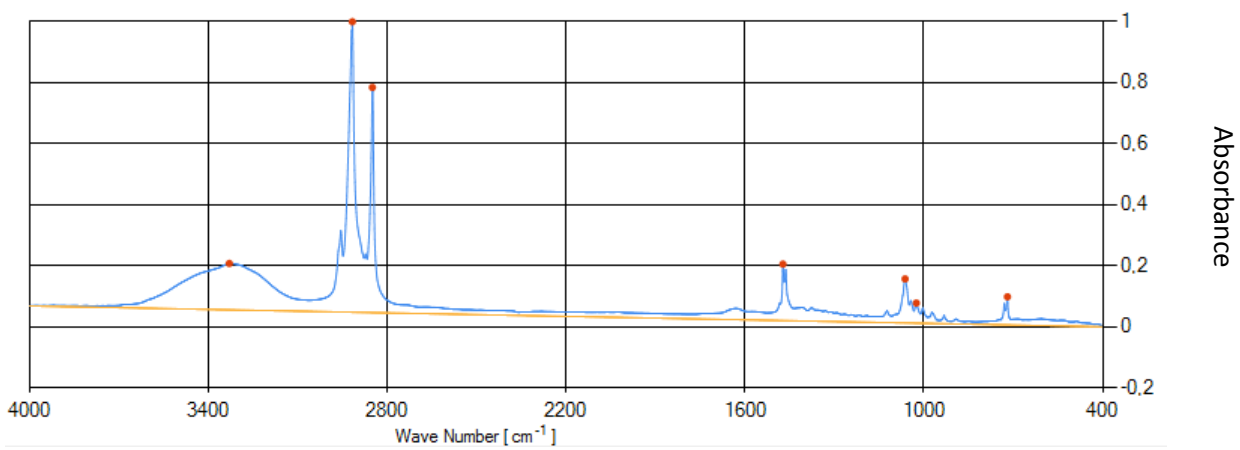
*Rys.6.13 Widmo absorpcyjne próbki A z wyznaczoną linią bazową oraz punktami maksymalnymi*



*Rys.6.14 Widmo absorpcyjne próbki B z wyznaczoną linią bazową oraz punktami maksymalnymi*



**Rys.6.15** Widmo absorpcyjne próbki C z wyznaczoną linią bazową oraz punktami maksymalnymi

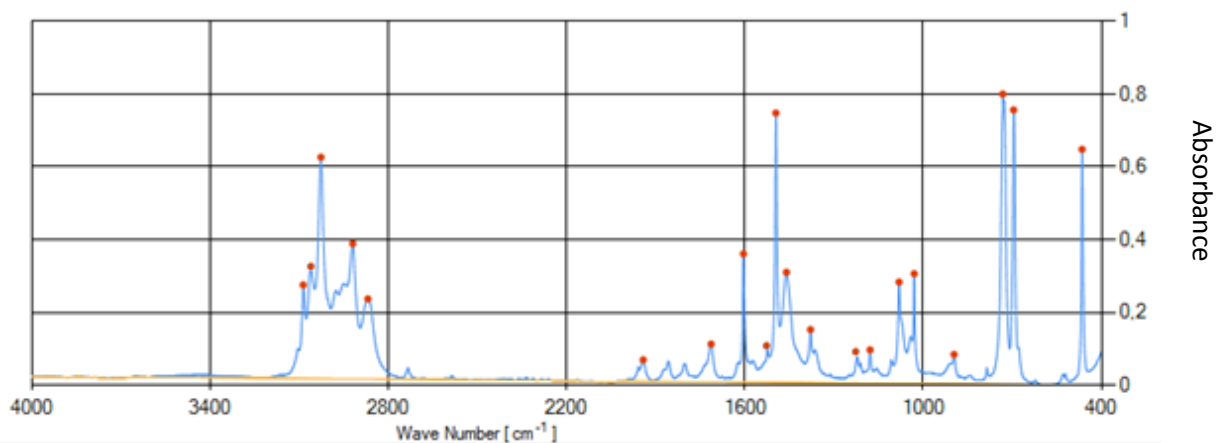


**Rys.6.16** Widmo absorpcyjne próbki D z wyznaczoną linią bazową oraz punktami maksymalnymi

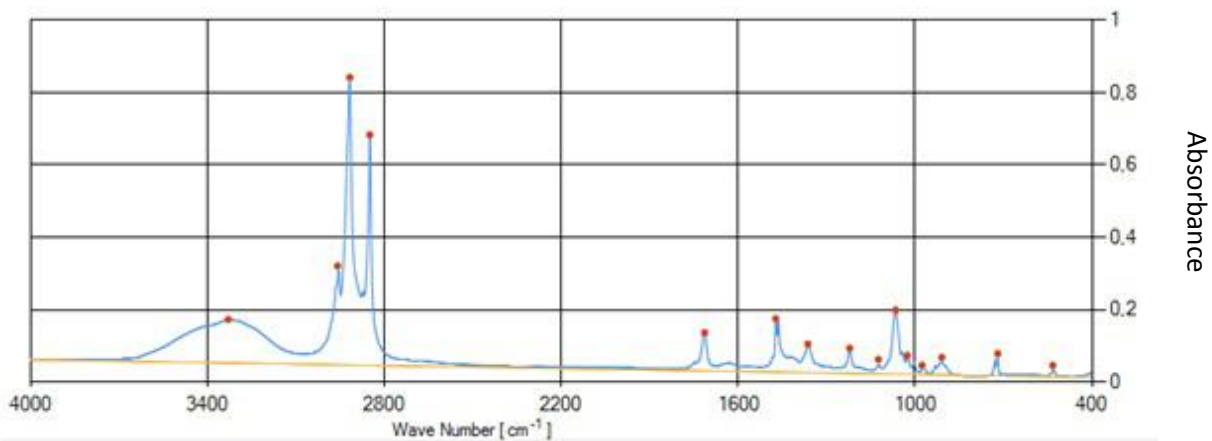
Tab.6.7 Wartości procentowe widm w poszczególnych próbkach.

	Widmo A	Widmo B	Widmo C	Widmo D
<b>Próbka 1</b>	10%	10%	80%	-
<b>Próbka 2</b>	10%	10%	-	80%
<b>Próbka 3</b>	10%	80%	10%	-
<b>Próbka 4</b>	10%	80%	-	10%
<b>Próbka 5</b>	25%	25%	50%	-
<b>Próbka 6</b>	25%	25%	-	50%
<b>Próbka 7</b>	25%	50%	25%	-
<b>Próbka 8</b>	33%	33%	33%	-
<b>Próbka 9</b>	33%	33%	-	33%
<b>Próbka 10</b>	50%	25%	25%	-
<b>Próbka 11</b>	50%	25%	-	25%
<b>Próbka 12</b>	80%	10%	10%	-
<b>Próbka 13</b>	80%	10%	-	10%

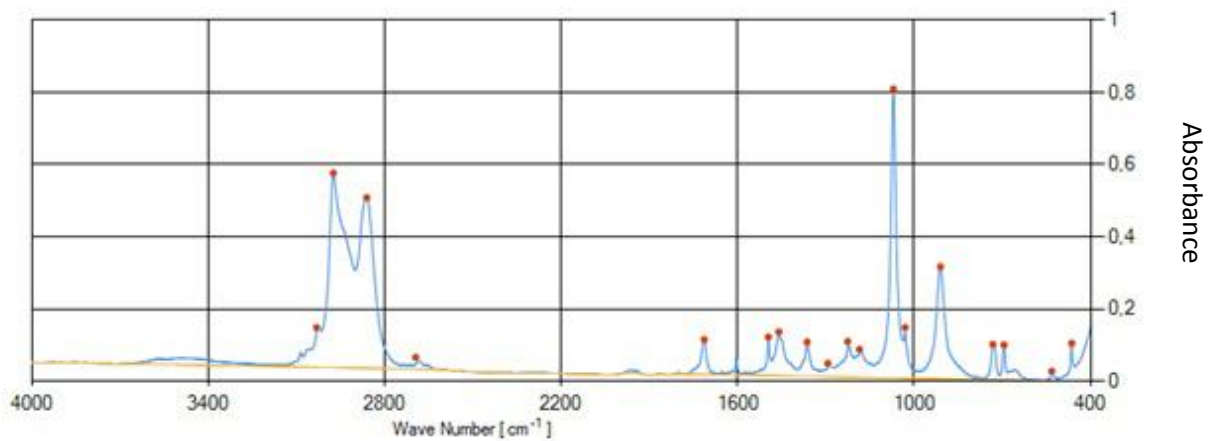
W rezultacie wymieszania widm monosubstancji A-D uzyskano trzynaście próbek widm mieszanin przedstawionych na rysunkach 6.17-29.



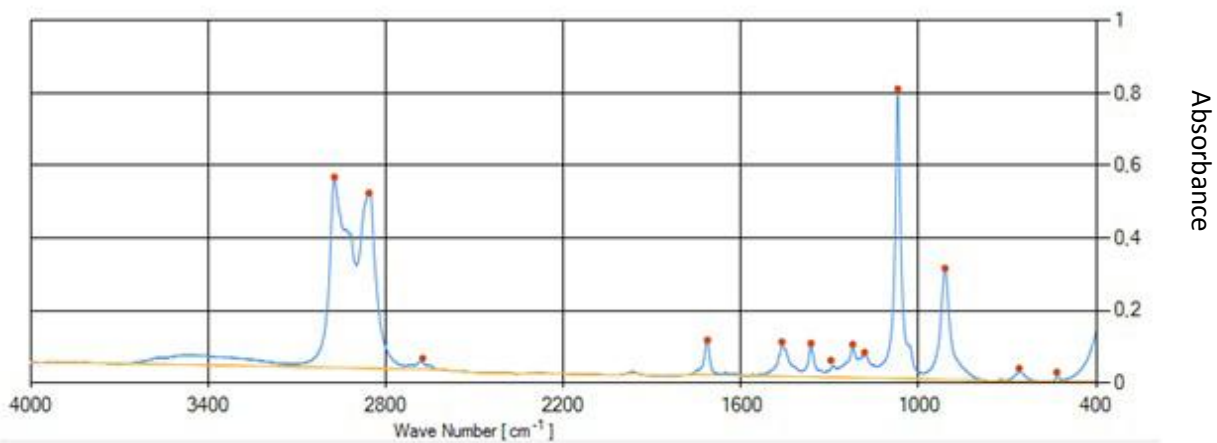
Rys.6.17 Widmo absorpcyjne próbki 1 z wyznaczoną linią bazową oraz punktami maksymalnymi



**Rys.6.18** Widmo absorpcyjne próbki 2 z wyznaczoną linią bazową oraz punktami maksymalnymi

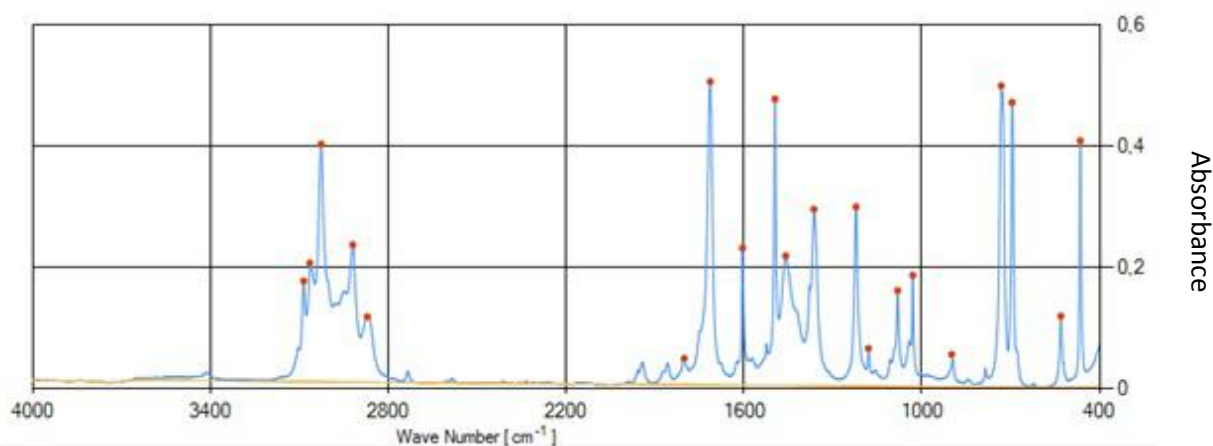


**Rys.6.19** Widmo absorpcyjne próbki 3 z wyznaczoną linią bazową oraz punktami maksymalnymi

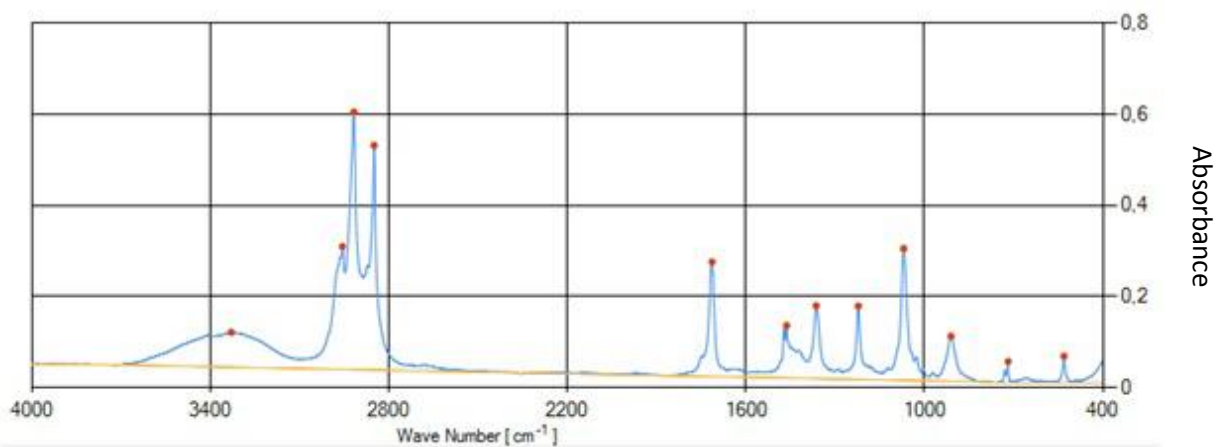


**Rys.6.20** Widmo absorpcyjne próbki 4 z wyznaczoną linią bazową oraz punktami maksymalnymi

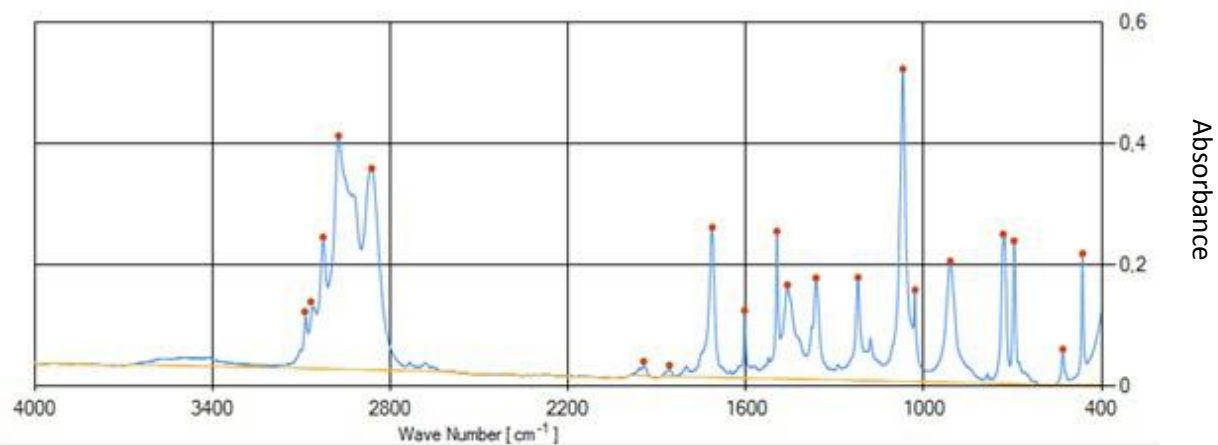




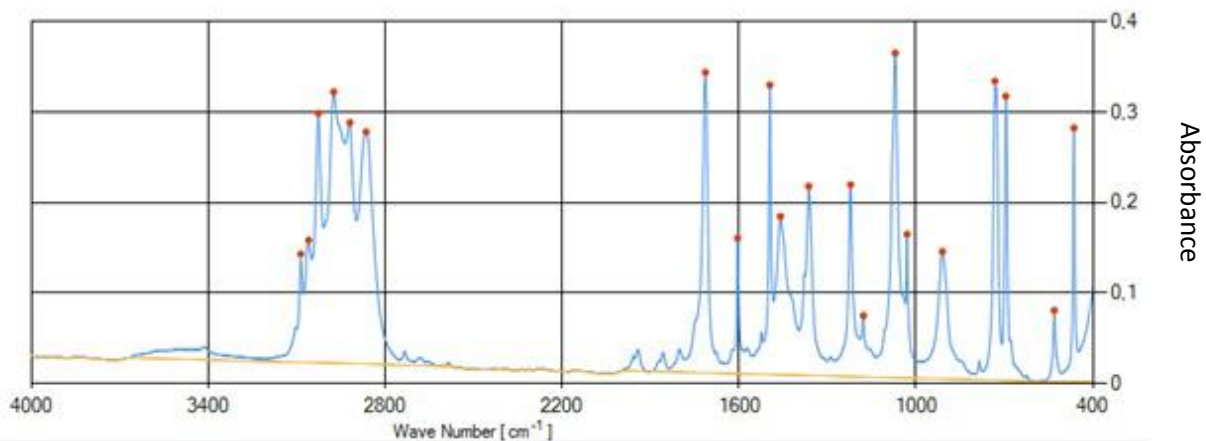
*Rys.6.21 Widmo absorpcyjne próbki 5 z wyznaczoną linią bazową oraz punktami maksymalnymi*



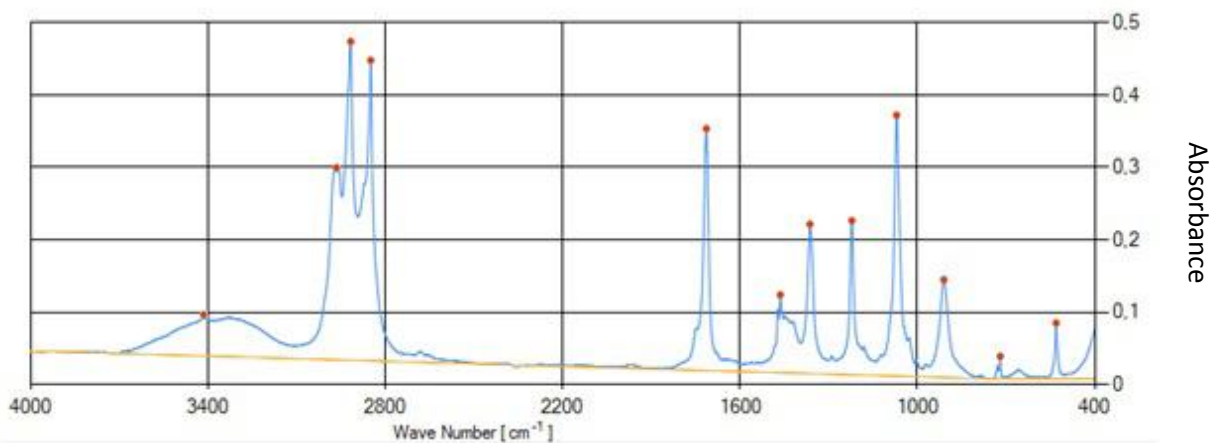
*Rys.6.22 Widmo absorpcyjne próbki 6 z wyznaczoną linią bazową oraz punktami maksymalnymi*



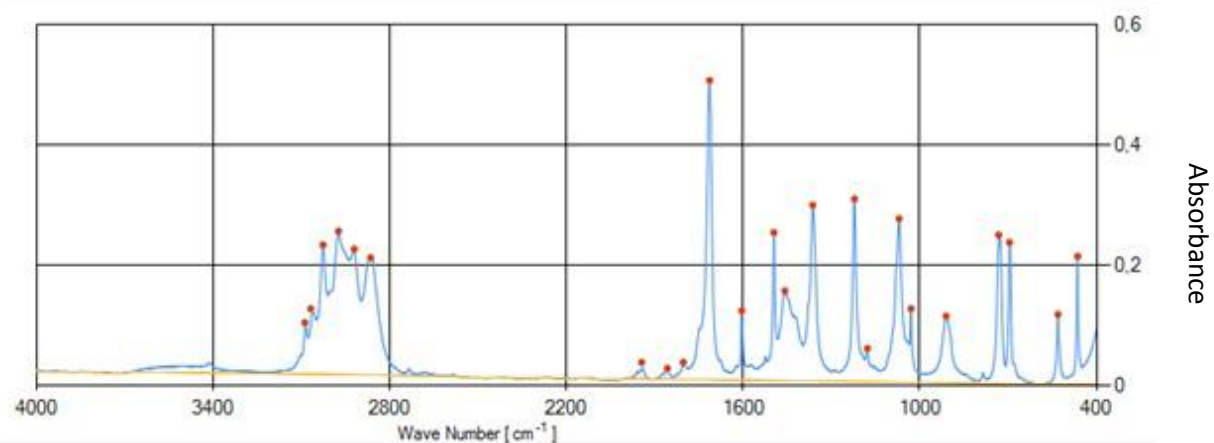
*Rys.6.23 Widmo absorpcyjne próbki 7 z wyznaczoną linią bazową oraz punktami maksymalnymi*



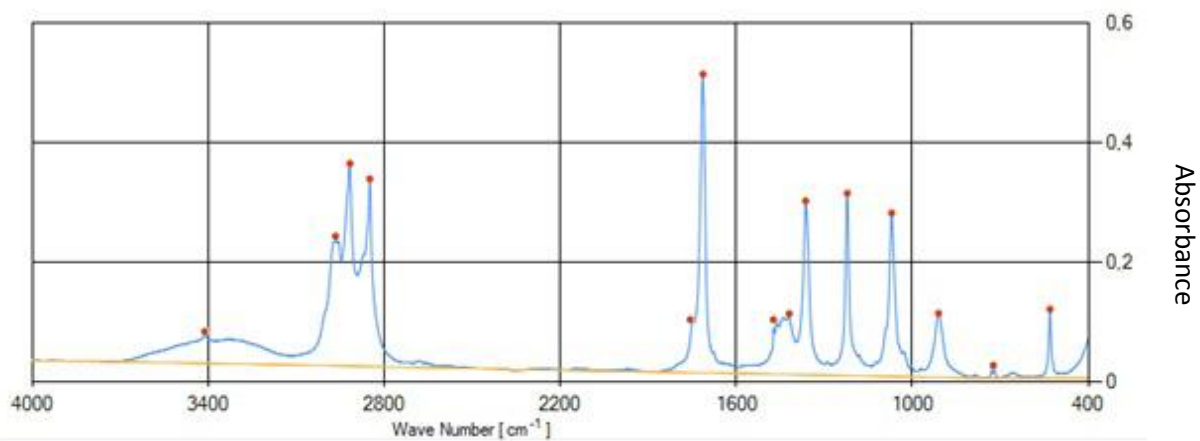
**Rys.6.24** Widmo absorpcyjne próbki 8 z wyznaczoną linią bazową oraz punktami maksymalnymi



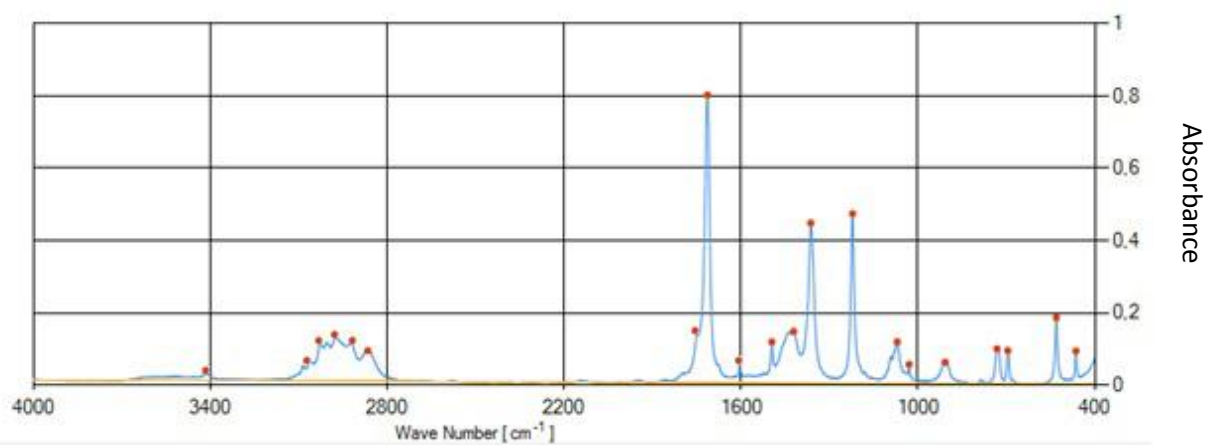
**Rys.6.25** Widmo absorpcyjne próbki 9 z wyznaczoną linią bazową oraz punktami maksymalnymi



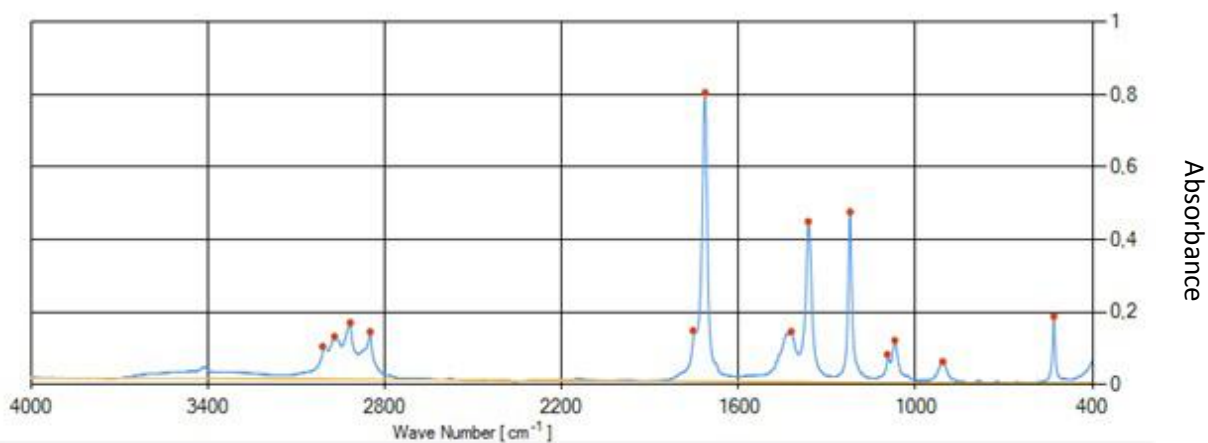
**Rys.6.26** Widmo absorpcyjne próbki 10 z wyznaczoną linią bazową oraz punktami maksymalnymi



**Rys.6.27** Widmo absorpcyjne próbki 11 z wyznaczoną linią bazową oraz punktami maksymalnymi



**Rys.6.28** Widmo absorpcyjne próbki 12 z wyznaczoną linią bazową oraz punktami maksymalnymi



**Rys.6.29** Widmo absorpcyjne próbki 13 z wyznaczoną linią bazową oraz punktami maksymalnymi

**Tab.6.8** Wartości wyjść sztucznej sieci neuronowej dla poszczególnych próbek podanych na wejście sieci

	<b>Widmo A</b>	<b>Widmo B</b>	<b>Widmo C</b>	<b>Widmo D</b>
<b>Próbka 1</b> <b>(A10 B10 C80)</b>	-0,6522	-0,0180	0,9998	0,0725
<b>Próbka 2</b> <b>(A10 B10 D80)</b>	0,3243	-0,7361	0,7096	0,9997
<b>Próbka 3</b> <b>(A10 B80 C10)</b>	0,9706	0,9888	0,9845	0,6021
<b>Próbka 4</b> <b>(A10 B80 D10)</b>	0,9882	0,9999	0,5730	-0,7231
<b>Próbka 5</b> <b>(A25 B25 C50)</b>	-0,9854	0,7600	0,9998	-0,2973
<b>Próbka 6</b> <b>(A25 B25 D50)</b>	0,1596	0,3459	0,9999	0,9893
<b>Próbka 7</b> <b>(A25 B50 C25)</b>	0,9991	-0,9999	0,9998	-0,9877
<b>Próbka 8</b> <b>(A33 B33 C33)</b>	0,6431	0,9998	0,9999	-0,9111
<b>Próbka 9</b> <b>(A33 B33 D33)</b>	0,7199	-0,9998	0,9999	0,8895
<b>Próbka 10</b> <b>(A50 B25 C25)</b>	0,9999	0,9932	0,9995	-0,9719
<b>Próbka 11</b> <b>(A50 B25 D25)</b>	0,9985	-0,9999	0,9999	0,9434
<b>Próbka 12</b> <b>(A80 B10 C10)</b>	0,9999	-0,9925	0,9306	0,3704
<b>Próbka 13</b> <b>(A80 B10 D10)</b>	0,9999	-0,9896	0,8049	0,1113

W tabeli **6.8** przedstawiono wartość wyjść sztucznej sieci neuronowej dla poszczególnych próbek podanych na wejście sieci. Wyniki przedstawione w tabeli powyżej wskazują, że sztuczna sieć neuronowa nie zawsze jest w stanie trafnie sklasyfikować mieszaniny trzech substancji. Jakość klasyfikacji uzależniony jest w tym przypadku od struktury związków chemicznych – im bardziej skomplikowana, tym trudniej sieci stwierdzić obecność innych związków. Również zbyt mała zawartość substancji w mieszaninie może skutkować potraktowaniem jej przez sieć jako zakłócenie, a nie widmo innego związku chemicznego.

### **Podsumowanie przeprowadzonych eksperymentów**

Podsumowując przeprowadzone badania eksperymentalne należy podkreślić, że interpretacja widm w podczerwieni substancji chemicznych więcej niż jedno składnikowych należy do bardzo skomplikowanych analiz i nieraz jest niemożliwa do przeprowadzenia nawet przez wykwalifikowanego eksperta w tej dziedzinie.

Odpowiedzi modelu neuronowego na zadany sygnał nie są opisem ilościowej zawartości danej substancji w widmie mieszaniny, a jedynie wskazują na obecność danego związku chemicznego w widmie podczerwonym.

Interpretacja widm substancji jednoskładnikowych została pomyślnie przeprowadzona zarówno dla danych uczących sieć, jak również dla danych testowych, co przedstawiają tabele **6.2** i **6.3** w niniejszym rozdziale. Model potrafił sklasyfikować widma przypisując je do odpowiadającym im związkom chemicznym. Odpowiedzi modelu neuronowego były prawidłowe zarówno dla danych uczących, jak i dla danych testowych. Wyniki te potwierdzają, że udało się uzyskać najcenniejszą właściwość sztucznych sieci neuronowych, czyli uogólnianie zdobytej wiedzy.

Proces interpretacji widm substancji dwuskładnikowych na przykładzie związków o zbliżonej budowie, utrudniającej proces identyfikacji, również należy określić jako pozytywny, co przedstawiają tabele **6.4** i **6.5**. Model potrafił rozpoznać widma mieszanin, które uprzednio zostały wprowadzone do bazy danych. Zadanie było utrudnione również ze względu na niemalże całkowity brak różnic optycznych pomiędzy widmem czystej substancji, a substancji posiadającej niewielką ilość drugiego związku. Odpowiedzi modelu

neuronowego, tak jak to miało miejsce przy analizie układów jednoskładnikowych, były prawidłowe dla danych uczących oraz testowych.

Analiza związków tryskładnikowych była ostatnim etapem badań i zdecydowanie należała do najbardziej skomplikowanych. Niestety program nie zawsze jest w stanie stwierdzić, jakie substancje chemiczne odzwierciedlają swoją obecność w widmie podczerwonym mieszanin trójskładnikowych. W trakcie badań można było zauważyć, iż im bardziej skomplikowana była struktura jednej z substancji znajdujących się w mieszaninie, tym trudniej program interpretował widma. Natomiast pozytywne rezultaty otrzymano dla mieszanin związków o niezbyt skomplikowanej budowie. Należy podkreślić, że dotychczasowe wyniki są obiecujące i warte poświęcenia im więcej uwagi w przyszłych badaniach.

## 7. Wnioski i kierunki dalszych badań

Przedstawione w rozprawie wyniki, szczególnie w rozdziale szóstym, dowodzą efektywności procesu interpretacji widm w podczerwieni opartego na metodzie wykorzystującej sztuczną sieć neuronową. Wyniki osiągnięte podczas badań (szczególnie w tab. 6.2, 6.3 oraz 6.4, 6.5) jednoznacznie potwierdzają przyjętą w rozprawie tezę (rozdział 1) zakładającą, iż zastosowanie sztucznych sieci neuronowych i metody diagnostyki na podstawie tzw. „odcisku palca”, umożliwi opracowanie modelu neuronowego, który pozwala na efektywną identyfikację związków chemicznych wykorzystując ich widma absorpcyjne w podczerwieni. Przyjętej w rozprawie tezy dowodzą również wyniki odnoszące się do doboru sposobu uczenia sztucznych sieci neuronowych, badania powtarzalności poziomu błędów uzyskiwanych podczas procesu uczenia oraz doboru struktury sieci neuronowej. W oparciu o powyższe można zatem stwierdzić, że przyjęta teza została udowodniona.

Za główny cel obrano ulepszenie i rozwinięcie procesu interpretacji widm w podczerwieni. Cel ten osiągnięto poprzez modyfikację metody identyfikacyjnej oraz połączeniu jej ze sztuczną inteligencją w postaci sztucznych sieci neuronowych, czego skutkiem jest opracowanie modelu neuronowego umożliwiającego diagnostykę związków chemicznych. Z przeprowadzonego przeglądu stanu wiedzy wynika, że przedstawiona w pracy zmodyfikowana metoda identyfikacyjna oraz jej połączenie ze sztuczną inteligencją nie była dotychczas proponowana i może być uznana za innowacyjną.

W ramach realizacji zadania wkładem własnym i naukowym autora jest:

- modyfikacja metody interpretacji widm w podczerwieni i dostosowanie jej do wykorzystania przez sztuczną sieć neuronową,
- opracowanie autorskiego programu, zajmującego się wyodrębnieniem z badanych widm ciągu uczącego sztuczną sieć neuronową,
- opracowanie modelu neuronowego oraz modyfikacja algorytmu uczącego, mającego na celu podniesienie efektywności interpretacji,

Badania wykonane w ramach rozprawy zostały przeprowadzone w obecności specjalisty w dziedzinie spektroskopii podczerwonej. Do badań wybrano środowisko Matlak 7.5. Tworzenie modelu neuronowego obejmowało:

- dobór struktury sieci rozumianej jako liczba warstw ukrytych sieci oraz liczba neuronów w warstwach ukrytych,
- porównanie funkcji przejścia neuronów w warstwach ukrytych,
- testowanie różnych algorytmów uczących.

Wybór konfiguracji sieci oraz metod uczenia następował na podstawie oceny poziomu błędów odchylenia średniego oraz odchylenie standardowego, które były obliczane dla odpowiedzi sieci na wybrane wartości sygnałów wejściowych. Aby ograniczyć możliwość wybrania nie optymalnej konfiguracji sieci, dla której otrzymano bardzo małe wartości błędów w wyniku jednorazowego, korzystnego doboru wag początkowych, najlepsze wg autora konfiguracje przebadano pod kątem powtarzalności otrzymanych wyników.

W wyniku przeprowadzonych badań stwierdzono, że:

- wybrana na podstawie danych literaturowych nieliniowa sieć o jednokierunkowym przepływie sygnałów jest w stanie z powodzeniem modelować proces interpretacji widm w podczerwieni,
- dobór jednej z dwóch przebadanych w pracy funkcji aktywacji neuronów nie ma zasadniczego wpływu na poziom popełnianego błędu przez sieć.
- wybór algorytmów uczących, zaproponowanych w pracy, nie ma znaczącego wpływu na poziom błędów popełnianych przez nauczoną sieć,
- modyfikacja algorytmu uczącego wstecznej propagacji błędu poprawiła efektywność identyfikacji oraz pozwoliła uniknąć problemów z nadmiernym dopasowaniem.

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 wyczulona na małe zmiany, dzięki czemu lepiej identyfikuje mieszaniny związków, co doskonale widać na przykładzie układów dwuskładnikowych. SSN sama „uczy się” znajdowanie zależności pomiędzy związkami i ich rozpoznawania, a uszkodzenie nie ma wpływu na jej poprawne działanie. SSN znalazły 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.

Kierunkiem dalszych prac badawczych, wynikających z rezultatów rozprawy:

- Dalsze doskonalenie opracowanego modelu neuronowego poprzez rozszerzenie bazy o nowe substancje, zwłaszcza te, dla których dotychczasowe rozwiązania nie znajdują poprawnych odpowiedzi (analiza układów trzyskładnikowych).
- Otrzymane wyniki badań należy skonfrontować z innymi dostępnymi narzędziami klasyfikacyjnymi, nie tylko związanymi ze sztuczną inteligencją.

## Literatura

- [1] Adamczak R., Rozprawa doktorska - Zastosowanie sieci neuronowych do klasyfikacji danych doświadczalnych, Uniwersytet Mikołaja Kopernika, Toruń, 2001.
- [2] Akkas S.B., Severcan M., Yilmaz O., Severcan F. Effects of lipoic acid supplementation on rat brain tissue: An FTIR spectroscopic and neural network study, *Food Chemistry*, Volume 105, Issue 3, 2007, Pages 1281–1288.
- [3] Analiza polimerów metodą FTIR, instrukcja stanowiskowa, Wydział Chemii Uniwersytetu Opolskiego, pracownia Analiz FTIR, Opole, 2011 (dokument wewnętrzny).
- [4] Arinton E., Caraman S., Korbicz J., Neural networks for modelling and fault detection of the inter-stand strip tension of a cold tandem mill, *Control Engineering Practice*, Vol. 20, s. 684-694, 2012.
- [5] Bartecki K., Czorny M., Implementacja sztucznej sieci neuronowej w architekturze równoległej z wykorzystaniem protokołu MPI. PAK 2011 nr 06, s. 638-640.
- [6] Bartecki K., Klasyczna i neuronowa analiza głównych składowych na przykładzie zadania kompresji obrazu. *Pomiary Automatyka Kontrola*, nr 1/2013, ss. 34-37.
- [7] Bartecki K., Sztuczne sieci neuronowe w zastosowaniach. Zbiór ćwiczeń laboratoryjnych z wykorzystaniem przybornika Neural Network Toolbox programu Matlab. Skrypt Politechniki Opolskiej nr 289, Opole 2010.
- [8] Chudzik S., Gryś S., Minkina W., Wykorzystanie sztucznych sieci neuronowych w zagadnieniu odwrotnym dyfuzji ciepła. PAK 2009 nr 02, s. 83-88.
- [9] Cichosz P., Systemy uczące się. WNT, Warszawa, 2000.
- [10] Colthup N.B., Wiberley S.E., Daly L.H., Introduction to infrared and Raman spectroscopy, Academic Press, New York and London, 1964.

- [11] Drapała J., Rozprawa doktorska - Identyfikacja dynamicznych systemów złożonych z wykorzystaniem sieci neuronowych, Politechnika Wroclawska, Wroclaw, 2009.
- [12] Drapała J., Świątek J., Dynamiczne sieci neuronowe jako globalnie optymalny model systemu złożonego - zbieżność algorytmu uczenia. Sterowanie i automatyzacja: aktualne problemy i ich rozwiązania. Pod red. Krzysztofa Malinowskiego, Leszka Rutkowskiego, Akademicka Oficyna Wydawnicza EXIT, Szczyrk, Maj 2008. 155–164.
- [13] Duch W., Korbicz J., Rutkowski L., Tadeusiewicz R., Biocybernetyka i inżynieria biomedyczna 2000 – tom 6 sieci neuronowe, Akademicka Oficyna Wydawnicza Exit, Warszawa, 2000.
- [14] Dziuba B. Identification of selected leuconostoc species with the use of ftir spectroscopy and artificial neural networks, ACTA Scientiarum Polonorum, Olsztyn, 2011.
- [15] Ewing G.W. , Metody instrumentalne w analizie chemicznej, Państwowe Wydawnictwo Naukowe, Warszawa, 1980.
- [16] Fessenden R., Györgyi L., Identifying functional groups in IR spectra using an artificial neural network, J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2, s.1755-1762, 1991.
- [17] Giergiel M., Małka P., Sztuczne sieci neuronowe w sterowaniu mini robota kołowego. PAK 2004 nr 05, s.20-24.
- [18] Goodacre R., Timmins E., Burton R., Kaderbhai N., Woodward A., Kell D., Rooney P., Rapid identification of urinary tract infection bacteria using hyperspectral whole-organism fingerprinting and artificial neural networks, Microbiology vol. 144 no. 5 1157-1170, 1998.
- [19] Goodacre R., Timmins E.M., Rooney P.J., Rowland J.J., Kell D.B., Rapid identification of Streptococcus and Enterococcus species using diffuse reflectance-absorbance Fourier transform infrared spectroscopy and artificial neural networks, FEMS Microbiology Letters Volume 140, Issue 2-3, pages 233–239, July 1996.

- [20] Jalali-Heravi M. Neural networks in analytical chemistry, *Methods in Molecular Biology*, 2008.
- [21] Józwick J., Wykorzystanie sztucznej sieci neuronowej do modelowania ugięć sprężystych przedmiotów obrabianych w procesie skrawania toczeniem, *Postęp Nauki i Techniki*, nr 4, 2010.
- [22] Kęcki Z., *Podstawy spektroskopii molekularnej*. Warszawa: Wydawnictwo PWN; 1998.
- [23] Klistala T., *Rozprawa doktorska – Ocena skuteczności badań diagnostycznych układów izolacyjnych transformatorów dużej mocy*, Politechnika Opolska, Opole, 2010.
- [24] Komitet Automatyki i Robotyki Polskiej Akademii Nauk, Plan strategiczny ,<http://www.kair.pan.pl/images/stories/pliki/pdf/propozycjagrroboczej9.pdf>.
- [25] Korbicz J. Systemy inteligentne w automatyce i diagnostyce procesów – stan i kierunki rozwoju w kraju, zbiór artykułów opracowanych na podstawie referatów wygłoszonych podczas XVII Krajowej Konferencji Automatyki-KKA'2011. Cz. 1 / pod red. Krzysztofa Malinowskiego i Ryszarda Dindorfa, Samodzielna Sekcja "Wydawnictwo Politechniki Świętokrzyskiej", Kielce, 2011.
- [26] Korbicz J., Kościelny J.M., Kowalczyk Z., Cholewa W., *Diagnostyka procesów – modele, metody sztucznej inteligencji, zastosowania*, WNT, Warszawa, 2002.
- [27] Korbicz J., Obuchowicz A., Uciński D., *Sztuczne sieci neuronowe – podstawy i zastosowania*, Akademicka Oficyna Wydawnicza PLJ, Warszawa, 1994.
- [28] Korbicz J.: Sztuczne sieci neuronowe i ich zastosowanie w elektrotechnice i energetyce, *Przegląd Elektrotechniczny*, Nr 9, ss. 194-200, 2009.
- [29] Korzyński M., *Metodyka eksperymentu – planowanie, realizacja i statystyczne opracowanie wyników eksperymentów technologicznych*, Wydawnictwo Naukowo-Techniczne, Warszawa, 2006.

- [30] Kowal M., Filipczuk P., Korbicz J.: Hybrid cytological image segmentation method based on competitive neural network and adaptive thresholding, *Pomiary Automatyka Kontrola, PAK*, Vol. 57, Nr 11, s. 1448-1451, 2011.
- [31] Kozik J., Rozprawa doktorska - Analiza parametrów morfometrycznych komórek dla komputerowego wspomaganie diagnostyki medycznej, Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie, Kraków, 2011.
- [32] Kraszewska M., Rozprawa doktorska - Analiza parametrów morfometrycznych komórek dla komputerowego wspomaganie diagnostyki medycznej, Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie, Kraków, 2012.
- [33] Królikowski A., Horla D., Identyfikacja obiektów sterowania – metody dyskretne, Politechnika Poznańska, Poznań 2005.
- [34] Krzyśko M., Wołyński W., Górecki T., Skorzybut M., Systemy uczące się – rozpoznawanie wzorców, analiza skupień i redukcja wymiarowości, Wydawnictwo Naukowo-Techniczne, Warszawa 2008.
- [35] Kwaśnicka H. Sztuczna inteligencja i systemy ekspertowe. Rozwój, perspektywy., Wyższa Szkoła Zarządzania i Finansów we Wrocławiu, Wrocław, 2005.
- [36] Langman J., Pedryc N., Modelowanie procesów przetwórczych z użyciem sztucznych sieci neuronowych, *Inżynieria Rolnicza*, nr 7(125), 2010.
- [37] Macek-Kamińska K., Sudoł M., Stemplewski S., Mixtures identification of chemical compounds on the basis of their ir spectra by artificial intelligence. *Ecological Chemistry and Engineering. A*, Opole 2012.
- [38] Mańczak K., Metody identyfikacji wielowymiarowych obiektów sterowania, Wydawnictwo Naukowo-Techniczne, Warszawa, 1971.
- [39] Markiewicz T., Rozprawa doktorska - Sieci neuronowe SVM w zastosowaniu do klasyfikacji obrazów komórek szpiku kostnego, Politechnika Warszawska, Warszawa, 2005.

- [40] Meyer M., Weigelt T., Interpretation of infrared spectra by artificial neural networks, *Analytica Chimica Acta*, Volume 265, s.183–190, 1992.
- [41] Mulholland M., Hibbert D.B., Haddad P.R., Parslov P., A comparison of classification in artificial intelligence, induction versus a self-organising neural networks, *Chemometric and intelligent laboratory systems* 30, pp. 117-128, 1995.
- [42] Mullholland M., Hibbert D.B., Haddad P.R., Sammut C., Application of the C4.5 classifier to building an expert system for ion chromatography, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* 27, pp. 95-104, 1995.
- [43] Munk M.E., Madison M.S., Robb, E.W. The Neural Network as a Tool for Multispectral Interpretation, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, 1996, 36 (2), pp 231–238.
- [44] Naumann A. A novel procedure for strain classification of fungal mycelium by cluster and artificial neural network analysis of Fourier transform infrared (FTIR) spectra, *Analyst*, 2009, 134, Pages 1215-1223.
- [45] Novic M., Zupan J., Investigation of Infrared Spectra-Structure Correlation Using Kohonen and Counterpropagation Neural Network, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, 35 (3), pp 454–466, 1995.
- [46] Orman M., Rozprawa doktorska – System sterowania układami wielowymiarowymi oparty o sieci neuronowe oraz algorytmy genetyczne, Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie, Kraków 2011.
- [47] Ossowski S., Sieci neuronowe do przetwarzania informacji. Warszawa: Oficyna Wydawnicza Politechniki Warszawskiej; 2000.
- [48] Ossowski S., Sieci neuronowe w ujęciu algorytmicznym, WNT, Warszawa, 1996.
- [49] Ossowski S., Sieci neuronowe, Of. Wyd. Pol. War., Warszawa, 1996.
- [50] Pentoś K. Rozprawa doktorska pt. Modelowanie procesów krystalizacji za pomocą sieci neuronowych, Politechnika Wrocławska, Wrocław 2008.
- [51] Perry S.C., Core C# i .Net, Wydawnictwo Helion, Gliwice 2006.

- [52] Pustułka M., Diagnostyka procesu neutralizacji pH poprzez monitorowanie parametrów modelu w postaci sieci neuronowej, Prace Naukowe Instytutu Maszyn, Napędów i Pomiarów Elektrycznych Politechniki Wrocławskiej nr 64, Wrocław, 2010.
- [53] Rafajłowicz E., Optymalizacja eksperymentu z zastosowaniami w monitorowaniu jakości produktu, Of. Wyd. Politechniki Wrocławskiej, Wrocław, 2005.
- [54] Ramadan Z., Mulholand M., Hibbert D.B., Preston P., Compton P., Haddad P.R., Towards an expert systems in ion-exclusion chromatography by means of multiple classification ripple-down rules, *Journal of Chromatography A*, 804, pp. 29-35, 1998.
- [55] Rojek R., Bartecki K., Korniak J., Metody sztucznej inteligencji w zastosowaniach automatyki. PAK 2006 nr 10, s. 29-34.
- [56] Rojek R., Bartecki K., Korniak K., Zastosowanie sztucznych sieci neuronowych i logiki rozmytej w automatyce, Skrypt nr 234, Pol. Op., Opole, 2000.
- [57] Rutkowska D., Piliński M, Rutkowski L., Sieci neuronowe, algorytmy genetyczne i systemy rozmyte, Wyd. Nauk. PWN, Warszawa-Łódź, 1997.
- [58] Rutkowski L., Metody i techniki sztucznej inteligencji. Warszawa: PWN; 2006.
- [59] Silverstein R.M., Webster F.X., Kiemle D.J., Spektroskopowe metody identyfikacji związków organicznych, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, 2007.
- [60] Stemplewski S., Identification of Chemical Compounds Using Neural Networks - the Overfitting problem. *Politechnika Opolska, Elektryka* nr 350/2013 z.69, 12-14 czerwca 2013.
- [61] Stemplewski S., Macek-Kamińska K., Wykorzystanie sztucznej sieci neuronowej do diagnostyki związków chemicznych przy pomocy ich widm w podczerwieni – PAK 2013 nr 1.
- [62] Szczerbowska-Borchowska M., Mikrospektroskopia w podczerwieni z transformacją Fouriera w diagnostyce medycznej, PAK nr 9, 2007.

- [63] Tadeusiewicz R., Elementarne wprowadzenie do techniki sieci neuronowych z przykładowymi programami. Warszawa: Akademicka Oficyna Wydawnicza PLJ; 1998.
- [64] Tadeusiewicz R., Gąciarz T., Borowik B., Leper B., Odkrywanie właściwości sieci neuronowych przy użyciu programów w języku C#, Polska Akademia Umiejętności, Kraków, 2007.
- [65] Tadeusiewicz R., Morajda J., Artificial Intelligence Methods - Analysis and Data Processing Computer Methods, Cracov University of Economics Publishing House, Krakow, s. 119 – 168, 2012.
- [66] Tadeusiewicz R., Neural networks as a tools for solving engineering problems, Napędy I Sterowanie, MNiSW, Vol. 118, No.2, 2009.
- [67] Tadeusiewicz R., O celowości zastosowania sieci neuronowych w problemach związanych z elektrotechniką, Przegląd elektrotechniczny, nr 2/2009.
- [68] Tanabe K., Matsumoto T., Tamura T., Hiraishi J., Saeki S., Arima M., Ono C., Itoh S., Uesaka H., Tatsugi Y., Yatsunami K., Inaba T., Mitsunashi M., Kohara S., Masago H., Kaneuchi F., Jin C., Ono S. Identification of Chemical Structures from Infrared Spectra by Using Neural Networks, Applied Spectroscopy, 2001, Vol. 55, Issue 10, pp. 1394-1403.
- [69] Thermo Nicolet Nexus User's Guide, Thermo Nicolet Corporation, Madison, USA, 2001.
- [70] Udelhoven T., Naumann D., Schmitt J., Development of a Hierarchical Classification System with Artificial Neural Networks and FT-IR Spectra for the Identification of Bacteria, Applied Spectroscopy, Vol. 54, 2000.
- [71] Vogel A.I., Preparatyka organiczna, Wydawnictwo Naukowo – Techniczne, Warszawa, 1984.
- [72] Weigel U., Herges R., Automatic interpretation of infrared spectra: recognition of aromatic substitution patterns using neural networks, J. Chem. Inf. Comput. Sci, 32 (6), s.723–731., 1992.



- [73] Wróbel M. Rozprawa doktorska pt. Zastosowanie neuronowych systemów rozmytych w chemii, Uniwersytet Śląski w Katowicach, Katowice, 2011.
- [74] Zieliński W., Rajca A., Metody spektroskopowe i ich zastosowanie do identyfikacji związków organicznych, WNT, Warszawa, 2000.
- [75] Zieliński W., Rajca A., Metody spektroskopowe i ich zastosowanie do identyfikacji związków organicznych. Warszawa: WNT; 1995.
- [76] Zięba T., Rozprawa doktorska – Przetwarzanie równoległe w rozwiązywaniu problemu z optymalnej obserwacji układów z czasoprzestrzenną dynamiką, Uniwersytet Zielonogórski, Zielona Góra 2009.
- [77] Ziółkowski E., Metody i algorytmy automatycznej identyfikacji wybranych parametrów procesu technologicznego, VIII Konferencja Odlewnicza Technical 2005, Nowa Sól, 2005.
- [78] Żurada, Barski, Jędruch, Sztuczne sieci neuronowe, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 1996.