

Tirpalų mišinių koncentracijų atpažinimo netiesiniai modeliai

Feliksas IVANAUSKAS (VU, MII), Robertas PAULAUSKAS (VU),

Pranas VAITKUS (VU)

el. paštas: paulauskas.robortas@gmail.com

Reziumė. Darbe yra nagrinėjamas dviejų netiesinės regresijos modelių, ekstremalaus apmokymo regresija (ELM) (angl. k. *Extreme Learning Machine*) ir atraminių vektorių regresija (SVR) (angl. k. *Support Vector Regression*), tinkamumas biojutiklių atsakui į tirpalų mišinius analizuoti. Gauti rezultatai yra lyginamai tarpusavyje, bei su kitais rezultatais, kurie gauti kitais metodais.

Raktiniai žodžiai: ekstremalaus apmokymo regresija, atraminių vektorių regresija.

1. Įvadas

Biojutikliai – tai įrenginiai, kuriuos pagrindiniai sudaro biologiškai aktyvi medžiaga, dažniausiai fermentas, ir elektroninis signalo keitiklis [1]. Fermentui reaguojant su analizuojamu tirpalu, fizikiniai-cheminiai pasikeitimai yra paverčiami elektros signalu, kurio stiprumas priklauso nuo tirpalo koncentracijos. Biojutikliai plačiai taikomi įvairiose analitinėse sistemose.

Darbo tikslas – panaudoti ekstremalaus apmokymo (ELM) [6] ir atraminių vektorių (SVR) [8] regresijas biojutiklio signalui klasifikuoti, bei nustatyti kuris iš dviejų metodų tinkamesnis šiam konkrečiam uždaviniui spręsti. Darbas yra darbų [3,4,5] tęsinys, kuriuose biojutiklio atsakui klasifikuoti buvo taikomi kiti metodai.

2. Matematinis modelis

Sumodeliuoti duomenys

Tegul $\vec{c} = (c_1, \dots, c_L)$ yra L tirpalų koncentracijų vektorius, $\vec{z} = \vec{z}(\vec{c}) = (z_1(\vec{c}), \dots, z_P(\vec{c}))$ yra biojutiklio signalas momentais t_1, \dots, t_P . \vec{z} yra biojutiklio atsakas į mišinį $\vec{c} = (c_1, \dots, c_L)$. Pažymėkime, $C = \{\vec{c}\}$ yra aibė visų tirpalų galimų koncentracijų vektorių ir $Z = \{\vec{z}(\vec{c})\}$ yra atitinkamai stebėtų biojutiklio signalų aibė. Aibė Z suskaidoma į dvi dalis: apmokymo ir testinę imtis. Duomenys sumodeliuoti naudojant modelį aprašytą [2].

Ekstremalaus apmokymo regresija

Ekstremalaus apmokymo regresija yra ne kas kita, kaip neuroninis tinklas su vienu paslėptu sluoksniu, su tam tikrais apmokymo algoritmo pakeitimais, kurie ženkliai

pagreitina apmokymo procedūrą. Apmokymo metu įėjimo svoriai ir poslinkis yra atsitiktinai sugeneruojami, o išėjimo svoriai apskaičiuojami pasinaudojant apibendrinta Moore–Penrose atvirkštine matrica [6].

Matematinis modelis

Standartinis vieno paslėpto sluoksnio neuroninis tinklas modeliuojamas taip:

$$\sum_{i=1}^L \beta_i G(\mathbf{a}_i, b_i, \mathbf{x}_j) = \mathbf{y}_j, \quad j = 1, \dots, N, \quad (2.1)$$

kur \mathbf{a}_i yra įėjimo svorių vektorius, b_i yra poslinkis, β_i yra išėjimo sluoksnio svorių vektorius, G yra aktyvacijos funkcija.

(2.1) lygybė ekvivalenti $\mathbf{H}\beta = \mathbf{Y}$, kur

$$\mathbf{H}(a_1, \dots, a_L, b_1, \dots, b_L, x_1, \dots, x_N) = \begin{bmatrix} G(\mathbf{a}_1, b_1, \mathbf{x}_1) & \dots & G(\mathbf{a}_L, b_L, \mathbf{x}_1) \\ \vdots & \dots & \vdots \\ G(\mathbf{a}_1, b_1, \mathbf{x}_N) & \dots & G(\mathbf{a}_L, b_L, \mathbf{x}_N) \end{bmatrix}_{N \times L},$$

$$\beta = \begin{bmatrix} \beta_1^T \\ \vdots \\ \beta_L^T \end{bmatrix}_{L \times m} \quad \text{ir} \quad \mathbf{Y} = \begin{bmatrix} \mathbf{y}_1^T \\ \vdots \\ \mathbf{y}_N^T \end{bmatrix}_{N \times m}. \quad (2.2)$$

\mathbf{H} yra vadinama neuroninio tinklo paslėpto sluoksnio išėjimo matrica.

Ekstremalaus apmokymo algoritmas:

1. Atsitiktinai sugeneruojami įėjimo svorių vektoriai \mathbf{a}_i ir poslinkiai b_i , $i = 1, \dots, L$.
2. Suskaičiuojama paslėpto sluoksnio išėjimo matrica \mathbf{H} .
3. Apskaičiuojami išėjimo svoriai β : $\beta = \mathbf{H}^{\mp} \mathbf{Y}$, kur \mathbf{H}^{\mp} yra apibendrinta Moore–Penrose atvirkštinė matrica.

Metodų tikslumui įvertinti taikome

$$Q_k = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \text{Ind}(\hat{C}_{i,k} \in \Delta y) \cdot \text{Ind}(C_{i,k} = y) \cdot 100\%, \quad (2.3)$$

kur indikatoriaus funkcija $\text{Ind}(\hat{C}_{i,k} \in \Delta y)$ yra lygi vienam, kai y_{ik} priklauso koncentracijų intervalui $(y - \delta_{1,y}, y + \delta_{2,y})$, kitu atveju 0. L yra stebėjimų skaičius testinėje arba apmokymo aibėje.

1 lentelė. Tikslumo intervalai Δ prognozuojamoms koncentracijoms

y (nmol/cm ³)	1	2	4	8	12	16	32	64
$\Delta_1 y$ (nmol/cm ³)	<1.5	[1.5,3)	[3,6)	[6,10)	[10,14)	[14,24)	[24,48)	≥ 48
$\Delta_2 y$ (nmol/cm ³)	[0,1.5)	[1.5,2.9)	[3.1,5)	[7,9)	[11,13)	[15,17)	[31,33)	[63,65)

3. Skaičiavimų rezultatai

Sumodeliuotų duomenų analizė

Naudojant modelį pateiktą [2], buvo modeliuojamas biojutiklių atsakas į keturių ($L = 4$) tirpalų mišinį, vonios (BA) ir apipurškimo (FIA) režimais. Vonios režimu biojutiklio veikimas modeliuotas dviems membranos storiams: $d = 0,02$ ir $d = 0,05$ cm. Apipurškimo režime storis buvo $d = 0,02$ cm. Naudotos aštuonios kiekvieno tirpalo koncentracijos: 1, 2, 4, 8, 12, 16, 32, 64 nmol/cm³. Iš viso buvo gauta 4096 skirtingų tirpalų koncentracijų vektorių. Biojutiklių signalo modeliavimo laikas: BA atveju ($d = 0,02$) 301 sekundė ($N = 301$), BA atveju ($d = 0,05$) 501 sekundė ($N = 501$) ir FIA atveju ($d = 0,02$) 151 sekundė ($N = 151$), FIA atveju ($d = 0,05$) 301 sekundė ($N = 301$). Šiame darbe lyginsime tik rezultatus gautus BA atveju kai membranos storis: $d=0,02$, kadangi būtent šis atvejis ir yra pats sudėtingiausias. Apipurškimo režimo (FIA) rezultatai yra vienodai geri tiek naudojant SVM tiek ELM modelį, abiem atvejais pasiekiamas visiškas atpažinimas.

Duomenų aibę suskaidėme į testinę ir apmokymo aibes, sudarant testinę aibę atsitiktinai be grąžinimo buvo išrinkta 2000 tirpalų koncentracijų vektorių, likę 2096 vektoriai sudarė apmokymo aibę. Ekstremalaus apmokymo regresija (ELM¹) buvo

2 lentelė. Klasifikavimo tikslumas vonios režime, naudojant intervalus Δ_1 ir Δ_2 bei ELM su 512 neuronų paslėptame sluoksnyje

M	BA, $\Delta_1, d = 0.02$		BA, $\Delta_2, d = 0.02$	
	Apm. aibė	Test. aibė	Apm. Aibė	Test. aibė
1	100.00	100.00	100.00	100.00
2	99.97	100.00	99.97	100.00
3	88.93	89.14	63.93	61.13
4	51.30	48.08	13.67	12.50

M yra tirpalo numeris

3 lentelė. Klasifikavimo tikslumas vonios režime, naudojant intervalus Δ_1 ir Δ_2 bei atraminių vektorių regresiją SVR

M	BA, $\Delta_1, d = 0.02$		BA, $\Delta_2, d = 0.02$		C	g	s	SV
	Apm. aibė	Test. aibė	Apm. Aibė	Test. aibė				
1	99.05	98.90	97.47	96.95	13296	0.3250	37.81	1235
2	99.71	99.50	99.38	98.65	31.20	0.4452	45.87	1208
3	73.57	68.35	48.47	37.70	21.70	0.1299	42.37	2003
4	73.62	58.40	53.15	29.80	7.80	0.0181	756.77	2012

C ir g yra SVR parametrai, s yra vidutinis apmokymo laikas sekundėmis, SV yra atraminių vektorių skaičius.

¹ELM kodas: <http://www.ntu.edu.sg/home/egbhuang/>.

4 lentelė. Klasifikavimo tikslumas vonios režime testinėje aibėje, naudojant intervalus Δ_1 ir Δ_2 bei skirtingus klasifikavimo metodus

M	BA, Δ_1 , $d = 0.02$				BA, Δ_2 , $d = 0.02$				
	SVR	ELM	TPCR	NN	SVR	ELM	NN	LWNN	LWELM
1	98.90	100.00	100.00	100.00	96.95	100.00	100.00	100.00	100.00
2	99.50	100.00	99.20	100.00	98.65	100.00	100.00	100.00	100.00
3	68.35	89.14	91.40	99.60	37.70	61.13	96.00	99.55	86.40
4	58.40	48.08	48.35	86.95	29.80	12.50	57.40	76.75	61.50

TPCR – apibendrintų pagrindinių komponentų regresija, NN – neuroninis tinklas, LWNN – lokaliai pasvertas neuroninis tinklas, LWELM – lokaliai pasverta ekstramalaus apmokymo regresija.

apmokoma naudojant skirtingą paslėptų neuronų skaičių, su kiekvienu iš jų buvo atliekami 5 bandymai iš kurių buvo išrenkamas geriausias rezultatas. Atraminų vektorių regresija (SVR) buvo naudojama su radialine bazine branduolio funkcija. Apmokymo etapas buvo suskaidytas į du poetapius: pirma buvo nustatinėjama sritis iš kurios geriausia būtų rinkti parametrus (C , g), sritis buvo atrinkinėjama naudojantis kryžminiu patikros metodu (angl. k. Cross Validation). Antra, nustačius tinkamiausias sritis, iš jų atsitiktinai buvo renkamos (C , g) poros, kurios buvo naudojamos atraminų vektorių regresijai apmokoti. Atraminų vektorių regresija buvo realizuota paketu LIBSVM 2.84².

Lokalaus pasverimo (angl. k. Locally weighted) metodiką pateiktą [4] pritaikėme ELM modeliui ir gavome ženkliai geresnius rezultatus. Vienas iš didžiausių lokalaus pasverimų trūkumų yra dideles laiko sąnaudas.

4. Išvados

Iš pasiektų rezultatų galima teigti, kad nei ELM nei SVR nėra patys tinkamiausi metodai šiam uždaviniui spręsti. Tačiau lyginant juos tarpusavyje manytume, kad ekstramalaus apmokymo regresija, šiam uždaviniui yra tinkamesnė, jos tikslumas ženkliai atsilieka nuo SVR tik klasifikuojant ketvirtą tirpalą, klasifikuojant kitus tirpalus ji lenkia SVR, žymus yra ir apmokymo laiko skirtumas, jei SVR užtrunka apie 800 sekundžių, tai ELM užtenka tik 13 sekundžių, be to ELM reikia mažiau neuronų paslėptame sluoksnyje, nei SVR atraminų vektorių. Pritaikius lokalų pasverimą galima ženkliai pagerinti ELM tikslumą, tačiau laiko prasme viskas užtrunka gerokai ilgiau.

Literatūra

1. U. Wollenberger, F. Lisdat, F.W. Scheller, *Frontiers in Biosensors 2, Practical Applications*, Birkhauser Verlag, Basel (1997).
2. R. Baronas, J. Christensen, F. Ivanauskas, J. Kulys, Computer simulation of amperometric biosensor response to mixtures of compounds, *Nonlinear Analysis: Modelling and Control*, **7**(2), 3–14 (2002).

²LIBSVM 2.84 rasite: <http://www.csie.ntu.edu.tw/~cjlin/libsvm/>.

3. R. Baronas, F. Ivanauskas, R. Maslovskis, P. Vaitkus, An analysis of mixtures using amperometric biosensors and artificial neural networks, *Journal of Mathematical Chemistry*, **36**(3), 281–297 (2004).
4. R. Baronas, F. Ivanauskas, R. Maslovskis, P. Vaitkus, M. Radavičius, Locally weighted neural networks for an analysis of the biosensor response, *Kybernetika*, **43**(1), 21–30 (2007).
5. R. Baronas, F. Ivanauskas, R. Paulauskas, P. Vaitkus, Tirpalų mišinių koncentracijų klasifikavimas, naudojant apibendrintą pagrindinių komponentų regresiją, *Liet. matem. rink.*, **45**(spec. nr.), 454–458 (2005).
6. G.-B. Huang, Q.-Y. Zhu, C.-K. Siew, Extreme learning machine: Theory and application, *Neurocomputing*, **70**, 489–501 (2006).
7. C.-C. Chang, C.-J. Lin, *LIBSVM: A Library for Support Vector Machines* (2001).
8. B. Scholkopf, A.J. Smola, *Learning with Kernels*, Massachusetts Institute of technology (2002).

SUMMARY

F. Ivanauskas, R. Paulauskas, P. Vaitkus. Nonlinear models for recognition of concentration of mixture

In this paper extreme learning machine and support vector regression are used for biosensors response to mixtures of compounds classification. The results are compared with the results obtained using artificial neural networks and others.

Keywords: extreme learning machine, support vector regression.