

УДК 535.34:539.19

РАЗДЕЛЕНИЕ НА КОМПОНЕНТЫ ОПТИЧЕСКИХ ИСКАЖЕННЫХ СЛУЧАЙНЫМ ШУМОМ СПЕКТРОВ МЕТОДОМ ИСКУССТВЕННОЙ ИММУННОЙ СИСТЕМЫ

*Д.И. Галиахметова¹, М.Э. Сибгатуллин^{1,2},
Д.З. Галимуллин³, Д.И. Камалова¹*

¹Казанский (Приволжский) федеральный университет, г. Казань, 420008, Россия

²Академия наук Республики Татарстан, Институт прикладных исследований,
г. Казань, 420111, Россия

³Казанский инновационный университет имени В.Г. Тимирязова (ИЭУП),
г. Казань, 420111, Россия

Аннотация

В работе рассмотрена задача разделения сложных спектральных контуров на компоненты с применением алгоритма искусственной иммунной системы – оптимизационного метода, основанного на модели поведения иммунной системы. В качестве модели шума использован случайный фрактальный шум, позволяющий рассматривать как высокочастотные, так и низкочастотные шумы. Приведены результаты разложения модельного контура, состоящего из трех компонент, представляющих собой контуры Гаусса. Исследована эффективность разложения спектральных контуров в зависимости от относительного уровня и спектральной структуры шума.

Ключевые слова: оптическая спектроскопия, разделение сложных спектров, искусственная иммунная система, случайный шум

Введение

При проведении спектроскопических исследований часто имеют дело со сложными спектральными контурами, имеющими неразрешенную структуру. Определив параметры отдельных полос, которые входят в состав сложного спектра, можно получить необходимую исследователю информацию. Задача разложения на компоненты относится к классу оптимизационных задач, для ее решения в настоящей работе предлагается применить метод искусственной иммунной системы (ИИС), являющийся одним из активно развивающихся методов Natural Computing [1–3], основывающихся на законах и процессах, происходящих в природе. «Природные» вычисления подразделяются на несколько типов: искусственные нейронные сети, автономные вычисления, мембранные вычисления, искусственная жизнь и аморфные вычисления. Искусственная иммунная система, как и биологическая иммунная система, предназначена для решения задач поиска и классификации, способна к обучению и обладает памятью. Алгоритмы на основе поведения иммунной системы оказались эффективными при решении математических задач поиска, распознавания и оптимизации [4].

Одной из проблем, возникающих при обработке оптических спектров, является присутствие случайного шума в экспериментальных данных, который искажает

форму спектральной линии и приводит к некорректным результатам при разделении на компоненты [3]. В настоящей работе рассматривается эффективность разделения спектрального контура на компоненты методом ИИС при наличии случайного шума. Оцениваются возможности применения алгоритма без проведения предварительной операции удаления шума.

Разделение спектров на компоненты в присутствии случайного шума

Искусственные иммунные сети представляют собой набор В-лимфоцитов, которые связаны между собой и над которыми проводятся некоторые операции клонирования и мутации. При попадании в организм чужеродного агента образуются молекулы, называемые антигенами, в ответ на их появление, свою очередь, образуются реагирующие с ними антитела. Если при распознавании антигенов степень близости (схожести) генетических наборов антигена и антитела (R^{gb} -аффинность) мала, происходит мутация антител. После этого для защиты организма происходит клонирование лучших антител с максимально возможной аффинностью. В случае, если контакт с чужеродным агентом происходит не в первый раз, используется иммунная память системы (применяются наилучшие антитела, выработанные ранее при первом контакте с данными патогенами [5, 6]).

В настоящей работе используются следующие биологические понятия и соответствующие им математические определения [3, 6]:

- антиген – исходный спектральный контур, полученный экспериментально;
- антитело b – решение $x \in D$, (D – область допустимых значений), представляющее собой сумму спектральных компонент, каждая из которых зависит от трех параметров (частоты, интенсивности и полуширины); $f(b)$ – значение целевой функции, соответствующее данному антителу;
- аффинность $\varphi_i = -f(b)$ – величина, характеризующая полезность антитела, определяет разность между экспериментальным контуром и решением x ;
- популяция $B = \{b_i, i \in [1 : n_b]\}$ – множество антител;
- клон $b_j^{C_i}$ – антитело, образованное из другого антитела путем клонирования (копирования); $b_{\text{best}}^{C_i}$ – лучший (соответствующий минимальному значению целевой функции) клон антитела b_i ;
- мутация – изменение антитела, соответствующее случайному изменению компонент вектора x .

Инициализируется популяция антител и определяется их полезность. Над антителом с наибольшей полезностью осуществляется операция клонирования: создается множество антител C_i , идентичных исходному. Множество клонов подвергается мутации $b_j^{C_i} = b_j^{C_i} + \alpha$, где α определяется по формуле $\alpha = 10^{-3}b_j^{C_i}$. Вычисляется полезность всех клонированных антител, определяется антитело $b_{\text{best}}^{C_i}$ с наивысшей аффинностью. Происходит клональный отбор. Лучшие из потомков антител замещают родителей по формуле:

$$b_i = \begin{cases} b_i, & f(b_{\text{best}}^{C_i}) > f(b_i), \\ b_{\text{best}}^{C_i}, & f(b_{\text{best}}^{C_i}) \leq f(b_i). \end{cases}$$

Для исследования эффективности метода оптимизации на основе алгоритма искусственной иммунной системы при решении задачи разделения сложных спектральных контуров использовались модельные спектры, полученные путем сложения трех элементарных контуров, представляющих собой контуры Гаусса со следующими параметрами: первый контур $I=3.2$ (отн. ед.), $\delta = 50$ (отн. ед.),

$\omega_0 = 250$ (отн. ед.); второй контур $I = 2.5$ (отн. ед.), $\delta = 80$ (отн. ед.), $\omega_0 = 360$ (отн. ед.); третий контур $I = 0.4$ (отн. ед.), $\delta = 120$ (отн. ед.), $\omega_0 = 460$ (отн. ед.), где I – интенсивность, δ – полуширина, ω_0 – положение центра линии.

При проведении математических экспериментов в качестве модели шума в работе применялся случайный фрактальный шум [7]. Фрактальные случайные процессы занимают промежуточное положение между детерминированными и случайными, поэтому эта модель может быть полезной при описании реальных физических процессов, в частности, при анализе экспериментального шума, искажающего оптические спектры. Она позволяет моделировать шумы с известным значением одной из характеристик, в данном случае показателя Херста, задаваемого при моделировании. Это дает возможность осуществить привязку поведения остальных параметров в зависимости от персистентного или антиперсистентного поведения наблюдаемого процесса.

Фрактальный шум $\xi_f(t)$ определяется как производная от фрактального броуновского движения $x(t)$, описываемого уравнением [7]:

$$\xi_f(t) = \frac{dx(t)}{dt} = D^{-(H-1/2)}[\xi_g(t)].$$

Характер фрактального шума существенно зависит от показателя H . Для $1/2 < H < 1$ фрактальные шумы характеризуются положительной корреляцией, в случае $0 < H < 1/2$ – отрицательной корреляцией.

Для количественной оценки меры расхождения восстановленного сигнала и истинного в работе применялось среднеквадратичное отклонение:

$$\sigma_2 = \|f - \varphi\|_2 / \|f - \langle f \rangle\|_2,$$

где φ – восстановленный сигнал, f – истинный сигнал, $\langle \cdot \rangle$ – означают процедуру вычисления среднего, $\|x\|_2 = \left(\sum_k |x_k|^2 \right)^{1/2}$. При расчетах использовался искаженный шумом модельный сигнал f_ξ :

$$f_\xi = \varphi + (\max(\varphi) - \min(\varphi)) \cdot \eta \cdot \xi,$$

где φ – чистый сигнал, ξ – шум, η – относительный уровень шума.

На рис. 1–4 приведены результаты разложения модельного трехкомпонентного контура на составляющие. Сплошной кривой изображен модельный спектр, пунктирными линиями показаны рассчитанные с помощью метода ИИС составляющие суммарного контура и исходные модельные компоненты. Для восстановления элементарных составляющих были заданы количество компонент в модельном контуре и соответствующие им значения частот. В результате разделения оптических спектров алгоритмом иммунной системы были получены значения интенсивности и полуширины восстановленных компонент.

На рис. 1 исходный спектр искажен случайным шумом с показателем Херста $H = 0.1$ и относительным уровнем шума 1%. Такой случай наиболее близок к случаю чистого сигнала, визуально шум не наблюдается и имеет высокочастотную структуру. В результате разложения исходные и восстановленные компоненты неразличимы на рисунке, восстановленные компоненты максимально совпадают с исходными. Отличия интенсивностей модельных и восстановленных компонент составляют для первого контура 0.06%, для второго контура 0.51%, для третьего контура 1.23%. Отличия полуширин модельных и восстановленных компонент составляют для первого контура 0.6%, для второго контура 0.7%, для третьего контура 5%.

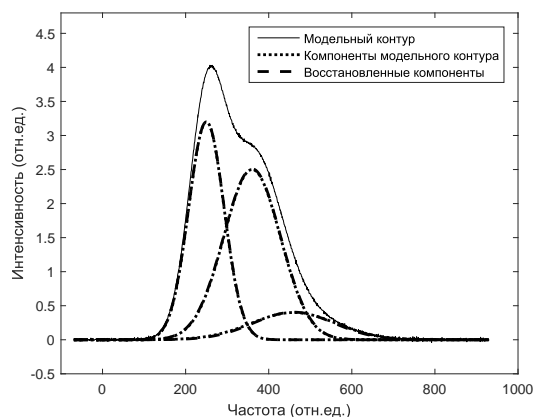


Рис. 1. Разделение на компоненты модельного контура, $H = 0.1$, относительный уровень шума 1%

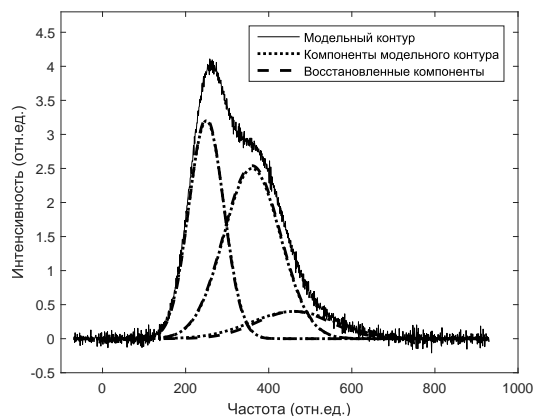


Рис. 2. Разделение на компоненты модельного контура, $H = 0.1$, относительный уровень шума 5%

На рис. 2 показаны результаты восстановления компонент в случае шума с показателем Херста $H = 0.1$ и относительным уровнем шума 5%. В этом случае также визуально практически не наблюдается различие между формой восстановленных и модельных компонент. Небольшое различие наблюдается в случае третьего контура, который слабее по интенсивности. Отличия интенсивностей модельных и восстановленных компонент составляют для первого контура 1%, для второго контура 1.6% для третьего контура 0.4%. Отличия в полуширине модельных и восстановленных компонент составляют для первого контура 1.6%, для второго контура 0.4%, для третьего контура 14%.

На рис. 3 приведены восстановленные компоненты в случае шума с показателем Херста $H = 0.5$ и относительным уровнем шума 5%. В этом случае первая и вторая компоненты визуально восстанавливаются приемлемо, имеются небольшие различия в интенсивности между модельными и восстановленными компонентами. Третья компонента восстанавливается заметно хуже, форма восстановленного контура повторяет форму модельного, но наблюдаются существенные визуальные различия

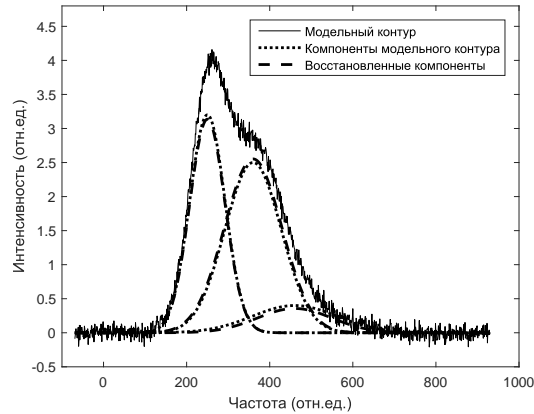


Рис. 3. Разделение на компоненты модельного контура, $H = 0.5$, относительный уровень шума 5%

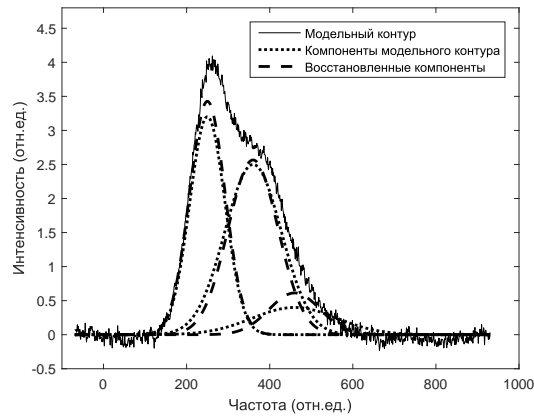


Рис. 4. Разделение на компоненты модельного контура, $H = 0.9$, относительный уровень шума 5%

в интенсивности и полуширине. Отличия интенсивностей модельных и восстановленных компонент составляют для первого контура 2%, для второго контура 2%, для третьего контура 11%. Отличия полуширин модельных и восстановленных компонент составляют для первого контура 0.7%, для второго контура 2%, для третьего контура 11%.

Восстановленные компоненты в случае шума с показателем Херста $H = 0.9$ и относительным уровнем шума 5% приведены на рис. 4. В этом случае наблюдаются существенные различия в восстановлении всех трех компонент. Первая и вторая восстановленные компоненты повторяют по форме модельные, при этом существенно отличаются по интенсивности и незначительно по полуширине. Третья компонента восстанавливается некорректно, наблюдается значительное различие по интенсивности и полуширине. Отличия интенсивностей модельных и восстановленных компонент составляют для первого контура 7%, для второго контура 2.5%, для третьего контура 34.7%. Отличия по полуширине модельных и восстановленных компонент составляют для первого контура 0.7%, для второго контура 11.3%, для третьего контура 39.5%.

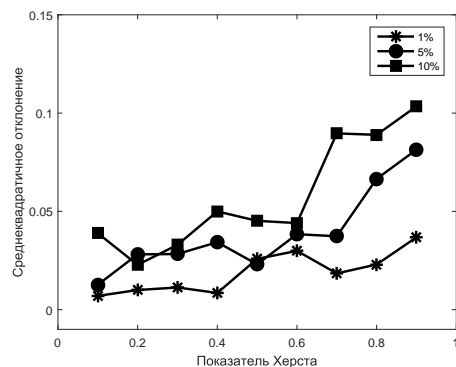


Рис. 5. Оценка качества восстановления первого контура в зависимости от показателя Херста. Относительный уровень шума 1%, 5% и 10%

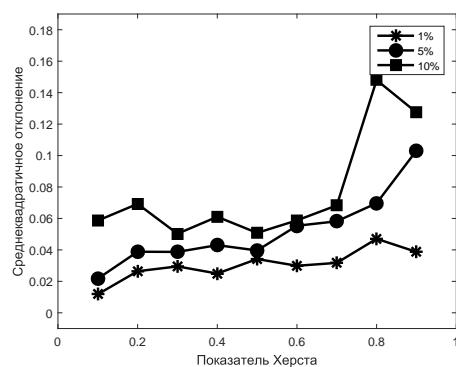


Рис. 6. Оценка качества восстановления второго контура в зависимости от показателя Херста. Относительный уровень шума 1%, 5% и 10%

На рис. 5–7 приведены зависимости среднеквадратичного отклонения, рассчитываемого для оценки качества восстановления компонент, от показателя Херста H . На каждом из этих рисунков показаны зависимости для относительных уровней шума в 1%, 5% и 10%.

Если принять, что для сложного контура при наличии слабой по интенсивности компоненты качество восстановления, приведенное на рис. 1, считается удовлетворительным, то среднеквадратичное отклонение при этом будет иметь величину, меньшую 0.05. В этом случае уже при значениях H , больших 0.1, и относительном уровне шума более 1% необходимо предварительно применять методы удаления шума при разложении оптических спектров на компоненты. Связано это с тем, что относительный уровень шума определяется относительно интенсивности суммарного контура, а так как интенсивность слабой компоненты на порядок меньше интенсивности суммарного спектра (в рассматриваемом примере), то относительный уровень шума в 1% для суммарного спектра будет составлять 10% для третьего контура. Если восстанавливаемые компоненты будут сопоставимы по интенсивности, то при относительном уровне шума менее 5% возможно разделение на компоненты при H от 0.1 до 0.7 без выполнения предварительной операции удаления шума.

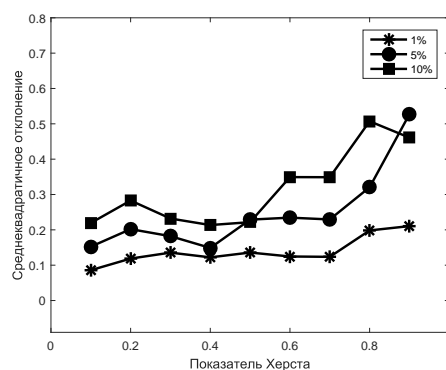


Рис. 7. Оценка качества восстановления третьего контура в зависимости от показателя Херста. Относительный уровень шума 1%, 5% и 10%

Заключение

В работе рассмотрена задача разделения сложных спектральных контуров на компоненты при помощи метода искусственной иммунной системы. Проведена оценка эффективности алгоритма разложения в случае присутствия в спектре случайного шума. При низкочастотной структуре шума и необходимости выделения спектральных компонент, слабых по интенсивности, но обладающих большой полусириной, следует применять методы удаления шумов до проведения процедуры разложения спектра на составляющие.

Литература

1. Карпенко А.П. Современные алгоритмы поисковой оптимизации. – М.: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2014. – 446 с.
2. Galiakhmetova D.I., Sibgatullin M.E., Galimullin D.Z., Kamalova D.I. The deconvolution of complex spectra by artificial immune system // J. Phys.: Conf. Ser. – 2017. – V. 917. – Art. 042007, P. 1–5. – doi: 10.1088/1742-6596/917/4/042007.
3. Камалова Д.И., Галимуллин Д.З., Сибгатуллин М.Э., Шаймухаметова Э.Р., Салахов М.Х. 3. Разделение близкорасположенных ИК фурье-полос поглощения с помощью генетического алгоритма // Оптика и спектроскопия. – 2013. – V. 26, No 1. – С. 44–50. – doi: 10.7868/S0030403413010133.
4. Курейчик В.В., Курейчик В.М., Родзин С.И. Теория эволюционных вычислений. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2012. – 260 с.
5. Кушнин Н.В., Кушнин А.В., Анацкая Е.В., Катыхшева П.А., Устинов К.Г. Искусственные иммунные системы: обзор и современное состояние // Науч. тр. КубГТУ. – 2015. – № 12. – С. 1–10.
6. Карпенко А.П., Шуров Д.Л. Гибридный метод глобальной оптимизации на основе искусственной иммунной системы // Науч. изд. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Наука и образование. – 2012. – № 8. – С. 339–378. – doi: 10.7463/0812.0433381.
7. Салахов М.Х., Харинцев С.С. Математическая обработка и интерпретация спектроскопического эксперимента. – Казань: Казан. гос. ун-т, 2001. – 238 с.

Поступила в редакцию
28.11.17

Галияхметова Диана Ильдаровна, студент Института физики

Казанский (Приволжский) федеральный университет
ул. Кремлевская, д. 18, г. Казань, 420008, Россия
E-mail: *galiakhmetova.di@gmail.com*

Сибгатуллин Мансур Эмерович, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры оптики и нанофотоники; старший научный сотрудник

Казанский (Приволжский) федеральный университет
ул. Кремлевская, д. 18, г. Казань, 420008, Россия
Академия наук Республики Татарстан, Институт прикладных исследований
ул. Баумана, д. 20, г. Казань, 420111, Россия
E-mail: *sibmans@mail.ru*

Галимуллин Дамир Зиннурович, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры информационных технологий и безопасности

Казанский инновационный университет имени В.Г. Тимирязова (ИЭУП)
ул. Московская, д. 42, г. Казань, 420111, Россия
E-mail: *galimullin_d.z@mail.ru*

Камалова Дина Илевна, доктор физико-математических наук, профессор кафедры оптики и нанофотоники

Казанский (Приволжский) федеральный университет
ул. Кремлевская, д. 18, г. Казань, 420008, Россия
E-mail: *Dina.Kamalova@kpfu.ru*

ISSN 2541-7746 (Print)

ISSN 2500-2198 (Online)

UCHENYE ZAPISKI KAZANSKOGO UNIVERSITETA.
SERIYA FIZIKO-MATEMATICHESKIE NAUKI
(Proceedings of Kazan University. Physics and Mathematics Series)

2018, vol. 160, no. 1, pp. 72–80

Deconvolution of Optical Spectra Distorted by Random Noise Using an Artificial Immune System

D.I. Galiakhmetova^{a}, M.E. Sibgatullin^{a,b**}, D.Z. Galimullin^{c***},
D.I. Kamalova^{a****}*

^a*Kazan Federal University, Kazan, 420008 Russia*

^b*Tatarstan Academy of Sciences, Institute of Applied Research, Kazan, 420111 Russia*

^c*V.G. Timiryasov Kazan Innovative University (IEMU), Kazan, 420111 Russia*

E-mail: **galiakhmetova.di@gmail.com, **sibmans@mail.ru,*

****galimullin_d.z@mail.ru, ****Dina.Kamalova@kpfu.ru*

Received November 28, 2017

Abstract

The deconvolution of a complex spectral contour into components by the algorithm of artificial immune system has been considered. It is the optimization method which is based on the behavior of the immune system. The random fractal noise has been used as a noise model which allows one to employ different noises, such as the high- and low-frequency noises. The results of the decomposition of the model contour consisting of three Gaussian components have been represented. The dependence of the efficiency of decomposition of spectral contours on the relative level of noise and the spectral structure of noise has been investigated.

Keywords: optical spectroscopy, deconvolution of complex spectra, artificial immune system, random noise

Figure Captions

- Fig. 1. Deconvolution of the model contour, $H = 0.1$, relative noise level 1%.
 Fig. 2. Deconvolution of the model contour, $H = 0.1$, relative noise level 5%.
 Fig. 3. Deconvolution of the model contour, $H = 0.5$, relative noise level 5%.
 Fig. 4. Deconvolution of the model contour, $H = 0.9$, relative noise level 5%.
 Fig. 5. Assessment of the quality of recovery of the first contour depending on the Hurst exponent. Relative noise level 1%, 5%, and 10%.
 Fig. 6. Assessment of the quality of recovery of the second contour depending on the Hurst exponent. Relative noise level 1%, 5%, and 10%.
 Fig. 7. Assessment of the quality of recovery of the third contour depending on the Hurst exponent. Relative noise level 1%, 5%, and 10%.

References

1. Karpenko A.P. *Sovremennye algoritmy poiskovoi optimizatsii* [Modern Algorithms of Search Optimization]. Moscow, Izd. MGTU im. N. E. Baumana, 2014. 446 p. (In Russian)
2. Galiakhmetova D.I., Sibgatullin M.E., Galimullin D.Z., Kamalova D.I. The deconvolution of complex spectra by artificial immune system. *J. Phys.: Conf. Ser.*, 2017, vol. 917, art. 042007, pp. 1–5. doi: 10.1088/1742-6596/917/4/042007.
3. Kamalova D.I., Galimullin D.Z., Sibgatullin M.E., Shaimukhametova E.R., Salakhov M.Kh. Separation of closely located IR Fourier absorption bands using the genetic algorithm. *Opt. Spectrosc.*, vol. 114, no. 1, pp. 41–46. doi: 10.1134/S0030400X1301013X.
4. Kureichik V.V., Kureichik V.M., Rodzin S.I. *Teoriya evolyutsionnykh vychislenii* [Theory of Evolutionary Calculations]. Moscow, FIZMATLIT, 2012. 260 p. (In Russian)
5. Kushnir N.V., Kushnir A.V., Anatskaya E.V., Katysheva P.A., Ustinov K.G. Artificial immune systems: Review and current state. *Nauchn. Tr. KubGTU*, 2015, no. 12, pp. 1–10. (In Russian)
6. Karpenko A.P., Shurov D.L. A global optimization hybrid algorithm based on the algorithm of artificial immune system and swarm of particles. *Nauch. Izd. MGTU im. N.E. Baumana. Nauka Obraz.*, 2012, no. 8, pp. 339–378. doi: 10.7463/0812.0433381. (In Russian)
7. Salakhov M.Kh., Kharintsev S.S. *Matematicheskaya obrabotka i interpretatsiya spektroskopicheskogo eksperimenta* [Mathematical Processing and Interpretation of Spectroscopic Experiment]. Kazan, Kazan. Gos. Univ., 2001. 238 p. (In Russian)

Для цитирования: Галиахметова Д.И., Сибгатуллин М.Э., Галимуллин Д.З., Камалова Д.И. Разделение на компоненты оптических искаженных случайным шумом спектров методом искусственной иммунной системы // Учен. зап. Казан. ун-та. Сер. Физ.-матем. науки. – 2017. – Т. 160, кн. 1. – С. 72–80.

For citation: Galiakhmetova D.I., Sibgatullin M.E., Galimullin D.Z., Kamalova D.I. Deconvolution of optical spectra distorted by random noise using an artificial immune system. *Uchenye Zapiski Kazanskogo Universiteta. Seriya Fiziko-Matematicheskie Nauki*, 2018, vol. 160, no. 1, pp. 72–80. (In Russian)