

АРХИТЕКТУРА НЕЙРОСЕТЕВОЙ МОДЕЛИ ДЛЯ ВЫЯВЛЕНИЯ ИЗМЕНЕНИЯ АКТИВНОСТИ ПЕРВИЧНЫХ ПРОЦЕССОВ ФОТОСИНТЕЗА

Хрущев С.С., Плюснина Т.Ю., Ризниченко Г.Ю.

Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, Биологический факультет, каф. биофизики, Россия, 119234, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 12, styx@biophys.msu.ru

Для определения функционального состояния фотосинтезирующих организмов широкое распространение получили флуорометрические методы, основанные на явлении индукции флуоресценции хлорофилла *a*. При освещении адаптированных к темноте образцов наблюдается сложная многофазная кинетика интенсивности флуоресценции, параметры которой (характерные времена и амплитуды отдельных фаз нарастания и уменьшения интенсивности) определяются скоростью протекания первичных процессов фотосинтеза и позволяют получить информацию об отдельных стадиях переноса электрона в электрон-транспортной цепи (ЭТЦ) хлоропласта. Нами предложен основанный на нейросетевой модели со спонтанным обучением алгоритм, позволяющий определить параметры минимального набора экспоненциальных функций. Предполагаемое число экспоненциальных функций является фиксированным параметром модели. Для оценки характерных времён фаз используется нейронная сеть, обучаемая на полученных в эксперименте индукционных кривых, а амплитуды определяются по тем же кривым методом наименьших квадратов. В качестве функции потерь при обучении используется суммарное отклонение аппроксимированных суммой экспонент кривых от экспериментальных.

Экспериментальные данные, используемые для обучения модели, должны быть получены в ходе одного эксперимента (или серии экспериментов), в котором происходит постепенное изменение формы индукционных кривых. Объединение выборок, полученных при существенно различающихся условиях эксперимента, нежелательно, так как может привести к ошибочной идентификации соответствующих друг другу фаз в разных экспериментах как различных, и, наоборот, объединению в одну фазу появлений различных физических процессов. В связи с этим при анализе результатов эксперимента обучение модели приходится проводить на сравнительно небольших выборках (сотни или тысячи индукционных кривых). В результате зачастую число параметров нейросетевой модели оказывается больше, чем число экспериментальных кривых в обучающей выборке. Для того, чтобы избежать переобучения модели, в процессе обучения к её входу и выходу добавляется случайный шум с амплитудой порядка единиц процентов от максимальной амплитуды соответствующего сигнала.

Для определения оптимального числа экспоненциальных функций, достаточных, но не избыточных для аппроксимации экспериментальных кривых, мы используем «метод локтя». Для одного и того же набора экспериментальных данных строится ряд моделей с разным числом экспонент на выходе, и определяется средняя по всему набору ошибка аппроксимации (доля необъяснённой дисперсии). На графике зависимости ошибки аппроксимации от числа экспоненциальных функций виден достаточно чёткий излом, соответствующий оптимальному значению.