

**БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ**

**CSIST'2022**

**ИНФОРМАЦИОННЫЕ СИСТЕМЫ  
И ТЕХНОЛОГИИ**

**Материалы международного научного конгресса по информатике**

**В трех частях**

**Часть 2**

**Республика Беларусь  
Минск, 27–28 октября 2022 г.**

**INFORMATION SYSTEMS  
AND TECHNOLOGIES**

**Proceedings of the International Scientific Congress  
on Computer Science**

**In three parts**

**Part 2**

**Republic of Belarus  
Minsk, October 27–28, 2022**

Научное электронное издание

МИНСК, БГУ, 2022

**ISBN 978-985-881-425-0 (ч. 2)  
ISBN 978-985-881-427-4**

© БГУ, 2022

УДК 37:004(06)  
ББК 74.044.4я431

**Редакционная коллегия:**

С. В. Абламейко (гл. ред.), В. В. Казаченок (зам. гл. ред.),  
Л. Л. Босова, С. М. Босяков, Н. В. Бровка, С. Демиденко, Н. М. Дмитрук,  
М. А. Журавков, В. В. Краснопрошин, А. Н. Курбацкий, В. Левашенко,  
Н. А. Лиходед, А. М. Недзьведь, А. В. Тузиков, А. Ю. Харин, Ю. С. Харин

**Рецензенты:**

член-корреспондент НАН Беларуси,  
доктор физико-математических наук *А. В. Тузиков*;  
доктор технических наук *В. В. Краснопрошин*;  
доктор технических наук *А. Н. Курбацкий*;  
доктор физико-математических наук *М. А. Журавков*;  
доктор физико-математических наук *Н. А. Лиходед*

**Информационные системы и технологии = Information Systems and Technologies** [Электронный ресурс] : материалы междунар. науч. конгресса по информатике. В 3 ч. Ч. 2, Респ. Беларусь, Минск, 27–28 окт. 2022 г. / Белорус. гос. ун-т ; редкол.: С. В. Абламейко (гл. ред.) [и др.]. – Минск : БГУ, 2022. – 1 электрон. опт. диск (CD-ROM). – ISBN 978-985-881-425-0.

Представлены материалы международного научного конгресса по информатике, организованного Белорусским государственным университетом и Объединенным институтом проблем информатики НАН Беларуси при поддержке ООО «Фабрика инноваций и решений».

Во второй части издания рассматриваются следующие вопросы: биоинформатика и приложения; машинное обучение, компьютерное зрение и графика; теоретическая информатика и программная инженерия; геоинформатика и дистанционное зондирование Земли; параллельная и распределенная обработка данных.

---

**Минимальные системные требования:**

PC, Pentium 4 или выше; RAM 1 Гб; Windows XP/7/10;  
Adobe Acrobat.

Оригинал-макет подготовлен в программе Microsoft Word.

На русском и английском языках

В авторской редакции

Ответственный за выпуск *И. С. Козловская*

Подписано к использованию 10.10.2022. Объем 8,8 МБ.

Белорусский государственный университет.  
Управление редакционно-издательской работы.  
Пр. Независимости, 4, 220030, Минск.  
Телефон: (017) 259-70-70.  
email: [urir@bsu.by](mailto:urir@bsu.by)  
<http://elib.bsu.by>

---

## ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

### Председатель конгресса

*Абламейко Сергей Владимирович* – академик Национальной академии наук (НАН) Беларуси, доктор технических наук

### Сопредседатели

*Медведев Дмитрий Георгиевич* – профессор Белорусского государственного университета (БГУ), доктор педагогических наук, кандидат физико-математических наук

*Тузиков Александр Васильевич* – заведующий лабораторией Объединенного института проблем информатики НАН Беларуси (ОИПИ), член-корреспондент НАН Беларуси, доктор физико-математических наук

*Харин Юрий Семенович* – директор Научно-исследовательского института прикладных проблем математики и информатики БГУ, академик НАН Беларуси, доктор физико-математических наук

### Председатель Программного комитета

*Недзьведь Александр Михайлович* – доктор технических наук, профессор, декан факультета прикладной математики и информатики БГУ

### Председатель Организационного комитета

*Казаченок Виктор Владимирович* – заведующий кафедрой компьютерных технологий и систем, доктор педагогических наук, кандидат физико-математических наук

---

# ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

## Председатель Программного комитета

**Недзьведь** Александр Михайлович – доктор технических наук, профессор, декан факультета прикладной математики и информатики БГУ, Беларусь

## Члены программного комитета

**Бодягин** Игорь Александрович – кандидат физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой математического моделирования и анализа данных факультета прикладной математики и информатики БГУ, Беларусь

**Босяков** Сергей Михайлович – доктор физико-математических наук, профессор, декан механико-математического факультета БГУ, Беларусь

**Бровка** Наталья Владимировна – доктор педагогических наук, профессор, заведующий кафедрой теории функций БГУ, Беларусь

**Васьковский** Максим Михайлович – доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой высшей математики факультета прикладной математики и информатики БГУ, Беларусь

**Воротницкий** Юрий Иосифович – кандидат физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой телекоммуникаций и информационных технологий факультета радиофизики и компьютерных технологий БГУ, Беларусь

**Демиденко** Олег Михайлович – доктор технических наук, профессор, проректор Гомельского государственного университета имени Ф. Скорины, Беларусь

**Дмитрук** Наталья Михайловна – кандидат физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой методов оптимального управления факультета прикладной математики и информатики БГУ, Беларусь

**Журавков** Михаил Анатольевич – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой теоретической и прикладной механики ММФ БГУ, Беларусь

**Кадан** Александр Михайлович – кандидат технических наук, доцент, заведующий кафедрой системного программирования и компьютерной безопасности Гродненского государственного университета имени Янки Купалы, Беларусь

**Казаченок** Виктор Владимирович – доктор педагогических наук, профессор, заведующий кафедрой компьютерных технологий и систем факультета прикладной математики и информатики БГУ, Беларусь

**Каракозов** Сергей Дмитриевич – доктор педагогических наук, профессор, проректор, директор Института математики и информатики Московского педагогического государственного университета, Россия

**Ковалев** Михаил Яковлевич – доктор физико-математических наук, профессор, член-корреспондент НАН Беларуси, заместитель генерального директора Объединенного института проблем информатики НАН Беларуси, Беларусь

**Котов** Владимир Михайлович – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой дискретной математики и алгоритмики БГУ, Беларусь

**Краснопрошин** Виктор Владимирович – доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой информационных систем управления факультета прикладной математики и информатики БГУ, Беларусь

**Курбацкий** Александр Николаевич – доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой технологий программирования факультета прикладной математики и информатики БГУ, Беларусь

**Лиходед** Николай Александрович – доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры вычислительной математики факультета прикладной математики и информатики БГУ, Беларусь

**Марков** Сергей Викторович – кандидат физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой многопроцессорных систем и сетей факультета прикладной математики и информатики БГУ, Беларусь

**Орлович** Юрий Леонидович – кандидат физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой биомедицинской информатики факультета прикладной математики и информатики БГУ, Беларусь

**Репников** Василий Иванович – кандидат физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой вычислительной математики факультета прикладной математики и информатики БГУ, Беларусь

**Русаков** Александр Александрович – доктор педагогических наук, профессор, президент Академии информатизации образования, профессор МИРЭА-Российский технологический университет, Россия

**Тузилов** Александр Васильевич – доктор физико-математических наук, профессор, член-корреспондент НАН Беларуси, заведующий лабораторией Объединенного института проблем информатики НАН Беларуси, Беларусь

**Харин** Алексей Юрьевич – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой теории вероятностей и математической статистики факультета прикладной математики и информатики БГУ, Беларусь

**Харин** Юрий Семенович – доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН Беларуси, директор Научно-исследовательского института прикладных проблем математики и информатики БГУ, Беларусь

**Dao Van Tuyet** – Professor, Binh Duong University, Vietnam

**Demidenko Serge** – Dean, Sunway University, Malaysia

**Levashenko Vitaly** – Head of Department, Zilina University, Slovakia

**Marcelli Angelo** – Professor, Salerno University, Italy

**Seiichi Uchida** – Professor, Fukuoka University, Japan

**Ye Shiping** – Vice-President, Zhejiang Shuren University, China

# СОДЕРЖАНИЕ

## **БИОИНФОРМАТИКА И ПРИЛОЖЕНИЯ .....12**

*Chen Y., Tuzikov A.*

IDENTIFICATION OF GENOMIC MUTATIONS ASSOCIATED WITH DRUG-RESISTANCE..... 13

*Андреанов А.М., Корноушенко Ю.В., Королёва Е.В., Игнатович Ж.В.*

КОМПЬЮТЕРНЫЙ ДИЗАЙН ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ МУЛЬТИТАРГЕТНЫХ ПРОТИВООПУХОЛЕВЫХ СОЕДИНЕНИЙ НОВОГО ПОКОЛЕНИЯ ДЛЯ ТЕРАПИИ ХРОНИЧЕСКОГО МИЕЛОИДНОГО ЛЕЙКОЗА ..... 20

*Андреанов А.М., Фурс К.В., Юшкевич А.М., Гончар А.В., Габриэлян А., Розенталь А., Тузиков А.В.*

IN SILICO ИДЕНТИФИКАЦИЯ ВЫСОКОАФФИННЫХ ЛИГАНДОВ БЕЛКА KasA МИКОБАКТЕРИИ M.TUBERCULOSIS – ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ИНГИБИТОРОВ ЛЕКАРСТВЕННО-УСТОЙЧИВЫХ ФОРМ ТУБЕРКУЛЕЗА ..... 27

*Андреанов А.М., Фурс К.В., Юшкевич А.М., Гончар А.В., Тузиков А.В.*

ВИРТУАЛЬНЫЙ СКРИНИНГ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ИНГИБИТОРОВ КОРОНАВИРУСА SARS-CoV-2 И ПРЕДСКАЗАНИЕ ИХ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ..... 34

*Гринев В.В., Ильюшёнков И.Н., Сучек В.А., Гузова Е.В.*

БИОИНФОРМАТИЧЕСКИЙ ПАЙПЛАЙН ПО ИДЕНТИФИКАЦИИ ПЕПТИДОВ, ПРИГОДНЫХ ДЛЯ CAR-T ТЕРАПИИ ЛЕЙКОЗОВ..... 41

*Карпенко А.Д., Войтко Т.Д., Тузиков А.В., Андреанов А.М.*

РАЗРАБОТКА ГЕНЕРАТИВНОЙ МОДЕЛИ ГЕТЕРОЭНКОДЕРА ДЛЯ КОМПЬЮТЕРНОГО ДИЗАЙНА НОВЫХ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ МУЛЬТИТАРГЕТНЫХ ИНГИБИТОРОВ VSR-AVL ТИРОЗИНАЗЫ ..... 47

*Сучёк В.А., Гринев В.В.*

ИДЕНТИФИКАЦИЯ ИНТРОНОВ, СОХРАНЯЕМЫХ В МОЛЕКУЛАХ РНК КЛЕТОК ЧЕЛОВЕКА, ПО ДАННЫМ ПОЛНОТРАНСКРИПТОМНОГО СЕКВЕНИРОВАНИЯ ..... 55

|   |           |
|---|-----------|
| <i>Шинкевич Я.В., Яцков Н.Н., Трусов И.С., Ильюшенков И.Н., Скакун В.В.,<br/>Гринев В.В.</i><br>СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ АЛГОРИТМОВ ОБНАРУЖЕНИЯ<br>САЙТОВ ОДНОНУКЛЕОТИДНЫХ ВАРИАЦИЙ .....                                       | 61        |
| <i>Шульдов Н.А., Юшкевич А.М., Фурс К.В., Тузиков А.В., Андрианов А.М.</i><br>ГЕНЕРАТИВНЫЕ МОДЕЛИ ГЛУБОКОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ<br>РАЗРАБОТКИ НОВЫХ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ<br>ПРЕПАРАТОВ ПРОТИВ КОРОНАВИРУСА SARS-CoV-2 ..... | 67        |
| <b>МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ, КОМПЬЮТЕРНОЕ ЗРЕНИЕ И<br/>ГРАФИКА .....</b>   | <b>75</b> |
| <i>Hongxi Quan, Sergey Ablameyko</i><br>MULTI-OBJECT TRACKING BY USING STRONG SORT<br>TRACKER AND YOLOv7 NETWORK.....   | 76        |
| <i>Zhuda Yang</i><br>A YOLOv7 BASED VISUAL DETECTION OF WASTE.....  | 80        |
| <i>Yuandong Yao, Sergey Ablameyko</i><br>SMALL OBJECT DETECTION ALGORITHM BASED<br>ON YOLOv5 AND ATTENTION MODEL .....  | 86        |
| <i>Абрамович М.С., Стельмашок В.И., Дорофеев Г.С.</i><br>ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ПЕРФОРАЦИЙ КОРОНАРНЫХ АРТЕРИЙ<br>С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ .....   | 94        |
| <i>Аксёнова Н.А., Ворувев А.В., Демиденко О.М.</i><br>ПОСТРОЕНИЕ ТРЁХМЕРНЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ<br>РАСПОЗНАВАНИЯ КЛЮЧЕВЫХ ТОЧЕК.....   | 99        |
| <i>Ассанович Б.А., Бич Н.Н., Пушкина А.К.</i><br>РАСПОЗНАВАНИЕ ЖЕСТОВЫХ КОМАНД НА ОСНОВЕ<br>ИНСТРУМЕНТА MEDIAPIPE И НЕЙРОСЕТИ LSTM.....   | 106       |
| <i>Вувуникян Ю.М., Чэнь Ваньли</i><br>МЕТОДЫ ПРЯМОГО ОБУЧЕНИЯ ГЛУБОКИХ<br>ИМПУЛЬСНЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ .....  | 112       |

|   |     |
|---|-----|
| <i>Головко В.А., Крощенко А.А., Михно Е.В., Соловчук А.М.</i><br>АДАПТИВНЫЙ ШАГ ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ НЕКОНТРОЛИРУЕМОГО<br>ОБУЧЕНИЯ ГЛУБОКИХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ .....   | 117 |
| <i>Дудкин А.А., Старовойтов В.В., Воронов А.А., Ганченко В.В.,<br/>Марушко Е.Е., Инютин А.В., Поденок Л.П.</i><br>ПРОГРАММНАЯ СИСТЕМА ДЛЯ ОЦЕНКИ ИНФОРМАТИВНОСТИ<br>ПРИЗНАКОВ 2D ИЗОБРАЖЕНИЙ КОСТНЫХ ОБЪЕКТОВ<br>В СУДЕБНО-ЭКСПЕРТНЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ ..... | 123 |
| <i>Игнатъева С.А., Богуш Р.П., Абламейко С.В.</i><br>АУГМЕНТАЦИЯ ДАННЫХ ДЛЯ РЕГУЛЯРИЗАЦИИ В<br>НЕЙРОСЕТЕВЫХ АЛГОРИТМАХ ПОВТОРНОЙ<br>ИДЕНТИФИКАЦИИ ЛЮДЕЙ ПО ВИДЕОДАНЫМ.....  | 132 |
| <i>Косарева А.А., Павленко Д.А., Снежко Э.В., Ковалев В.А.</i><br>ЭТАПЫ КОНТРОЛЯ ВХОДНЫХ ДАННЫХ ПРИ РАБОТЕ<br>СИСТЕМЫ АВТОМАТИЧЕСКОГО ВЫЯВЛЕНИЯ ПАТОЛОГИЙ<br>ЛЕГКИХ .....   | 138 |
| <i>Краснопрошин В.В., Карканица А.В., Родченко В.Г.</i><br>РАСПОЗНАВАНИЕ НА ОСНОВЕ СИНТЕЗА ПАТТЕРНОВ<br>КЛАССОВ .....   | 144 |
| <i>Крощенко А.А., Головко В.А.</i><br>МЕТОД РЕДУЦИРОВАНИЯ НЕЙРОСЕТЕВЫХ МОДЕЛЕЙ<br>КОМПЬЮТЕРНОГО ЗРЕНИЯ .....  | 151 |
| <i>Левашенко В.Г., Зайцева Е.Н., Султанова З.</i><br>ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЙ ЦЕНТР БИОМЕДИЦИНСКОЙ<br>И МЕДИЦИНСКОЙ ИНФОРМАТИКИ .....  | 157 |
| <i>Леонов И.К.</i><br>ИСПОЛЬЗОВАНИЕ БЫСТРОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ФУРЬЕ<br>ДЛЯ УСКОРЕНИЯ СВЕРТОЧНЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ .....   | 164 |
| <i>Лукашевич М.М., Голуб Ю.И., Старовойтов В.В.</i><br>КЛАССИФИКАЦИИ СТАДИЙ ДИАБЕТИЧЕСКОЙ<br>РЕТИНОПАТИИ НА ОСНОВЕ АЛГОРИТМОВ<br>МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ И НАБОРА ПРИЗНАКОВ .....  | 169 |



|   |            |
|---|------------|
| <i>Мацкевич В.В.</i><br>ЭФФЕКТИВНЫЙ АЛГОРИТМ ОБУЧЕНИЯ НА ОСНОВЕ<br>СЛУЧАЙНОГО ПОИСКА.....   | 177        |
| <i>Мороз А.С., Вальвачев А.Н.</i><br>МЕТОД ПРИНЯТИЯ ОПЕРАТИВНЫХ РЕШЕНИЙ В<br>РАСПРЕДЕЛЕННЫХ КОМПАНИЯХ НА ОСНОВЕ<br>РЕДУКЦИИ БОЛЬШИХ ДАННЫХ.....               | 183        |
| <i>Недзьведь М.А., Недзьведь А.А.</i><br>ОПРЕДЕЛЕНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК<br>ОБЛАСТИ НА ФРАГМЕНТЕ RGB ИЗОБРАЖЕНИЯ<br>ДЛЯ ОЦЕНКИ РАЗВИТИЯ РАСТЕНИЙ ..... | 189        |
| <i>Образцов В.А.</i><br>НАХОЖДЕНИЕ СТЕПЕНИ СХОДСТВА ОБЪЕКТОВ<br>В МНОЖЕСТВАХ, ЗАДАННЫХ ПО ПРЕЦЕДЕНТНОСТИ.....   | 197        |
| <i>Сорокина В.В.</i><br>СОЗДАНИЕ КАТАЛОГА ТОВАРОВ ЭЛЕКТРОННОЙ<br>КОММЕРЦИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ .....   | 203        |
| <i>Хомутов Е.В., Арзыматов К.</i><br>МЕТОДЫ ГЛУБОКОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ<br>ВРЕМЕНИ ДО ПОСЛЕДНЕГО ОБЩЕГО ПРЕДКА ПО ГЕНОМУ .....                         | 209        |
| <i>Шолтанюк С.В.</i><br>ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОПТИМАЛЬНОЙ СЕГМЕНТАЦИИ<br>ИЗОБРАЖЕНИЯ ТОЛПЫ МЕТОДОМ ВОДОРАЗДЕЛОВ .....   | 217        |
| <b>ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ИНФОРМАТИКА И ПРОГРАММНАЯ<br/>ИНЖЕНЕРИЯ .....</b>  | <b>224</b> |
| <i>Tufegdžić M.J.</i><br>DISC SCHEDULER ALGORITHMS PERFORMANCE ANALYSIS<br>USING OBJECT-ORIENTED PROGRAMMING .....  | 225        |
| <i>Андрушевич А.А., Вардак А.С., Войтешенко И.С.</i><br>ПРОТОТИП АППАРАТНО–ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА<br>УПРАВЛЕНИЯ ПРИЛОЖЕНИЯМИ «УМНОГО ДОМА».....               | 231        |

|   |            |
|---|------------|
| <i>Давидовская М.И., Мойсейчик Е.С.</i><br>ПРОЕКТИРОВАНИЕ СИСТЕМ, УПРАВЛЯЕМЫХ СОБЫТИЯМИ.....  | 238        |
| <i>Карпук А.А., Краснопрошин В.В., Говорко А.В.</i><br>ОНТОЛОГИЧЕСКИЙ ПОДХОД К РАЗРАБОТКЕ<br>ИНФОРМАЦИОННЫХ СИСТЕМ УПРАВЛЕНИЯ<br>ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РАДИОЧАСТОТНОГО СПЕКТРА .....                             | 244        |
| <i>Орлович Ю.Л., Суравежский А.Д., Картынник Ю.А.</i><br>СТРУКТУРНЫЕ И АЛГОРИТМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ СЛАБЫХ<br>РЕБЕРНЫХ ПОКРЫТИЙ В ГРАФАХ.....  | 251        |
| <i>Рудикова-Фронхёфер Л.В., Жвалевский А.И.</i><br>О ПОДХОДАХ К РЕАЛИЗАЦИИ ИНФОРМАЦИОННО-<br>АНАЛИТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ИСТОРИЧЕСКИХ<br>ПАМЯТНИКОВ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ.....                                    | 259        |
| <i>Рудикова-Фронхёфер Л.В., Игнатенко Н.И.</i><br>ОЦЕНКА ПАССАЖИРОПОТОКА И ТРАНСПОРТНОГО<br>ТРАФИКА В ГОРОДСКИХ УСЛОВИЯХ.....   | 265        |
| <i>Рудикова-Фронхёфер Л.В., Сакута В.П.</i><br>О ПОДХОДАХ К ПОСТРОЕНИЮ СИСТЕМЫ НАКОПЛЕНИЯ<br>И ОБРАБОТКИ ДАННЫХ ПРОИЗВЕДЕНИЙ ХУДОЖЕСТВЕННОЙ<br>ЦЕННОСТИ .....   | 271        |
| <i>Сытова С.Н., Гавриловец В.В., Дунец А.П., Коваленко А.Н., Черепица С.В.</i><br>ИНФОРМАЦИОННАЯ СИСТЕМА УЧЕТА ИСТОЧНИКОВ<br>ИОНИЗИРУЮЩЕГО ИЗЛУЧЕНИЯ, ЯДЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ<br>И РАДИОАКТИВНЫХ ОТХОДОВ ..... | 277        |
| <b>ГЕОИНФОРМАТИКА И ДИСТАНЦИОННОЕ ЗОНДИРОВАНИЕ<br/>ЗЕМЛИ .....</b>  | <b>283</b> |
| <i>Barovik D.V., Taranchuk V.B.</i><br>ANALYSIS AND VISUALIZATION OF NUMERICAL RESULTS<br>OF SURFACE FOREST FIRES MODELING.....   | 284        |

|  |            |
|--|------------|
| <i>Ганченко В.В., Дудкин А.А., Инютин А.В., Марушко Е.Е., Камиров М.М., Фазылов Ш.Х.</i><br>ОБРАБОТКА ИЗОБРАЖЕНИЙ ГИБРИДНЫМИ НЕЙРОННЫМИ СЕТЯМИ.....                                  | 290        |
| <i>Ганченко В.В., Дудкин А.А., Инютин А.В., Марушко Е.Е., Писаренко В.Г.</i><br>КЛАССИФИКАЦИЯ ОБЪЕКТОВ НА ИЗОБРАЖЕНИЯХ,<br>ПОЛУЧЕННЫХ С ПОМОЩЬЮ КОСМИЧЕСКИХ<br>АППАРАТОВ И БПЛА..... | 296        |
| <b>ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ И РАСПРЕДЕЛЕННАЯ ОБРАБОТКА<br/>ДАННЫХ .....</b>  | <b>303</b> |
| <i>Абрашина-Жадаева Н.Г.</i><br>СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ РАСЧЕТА<br>ЗАДАЧ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ С УРАВНЕНИЕМ<br>ВЛАГОПЕРЕНОСА .....                                       | 304        |
| <i>Баханович С.В., Лиходед Н.А.</i><br>МЕТОД ПАРАЛЛЕЛЬНОЙ МАТРИЧНОЙ ПРОГОНКИ С<br>УМЕНЬШЕННОЙ РЕДУЦИРОВАННОЙ СИСТЕМОЙ .....  | 311        |
| <i>Баханович С.В., Лиходед Н.А.</i><br>ПОСТРОЕНИЕ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ<br>ПРОЦЕССОВ НА ОСНОВЕ ГЕКСАГОНАЛЬНОГО ТАЙЛИНГА .....  | 317        |
| <i>Мигель А.С., Малыш С.В.</i><br>АНАЛОГОВЫЙ ДИФФЕРЕНЦИАТОР НА ОСНОВЕ SiO <sub>2</sub> И TiO <sub>2</sub> .....  | 323        |
| <i>Пчелинцева И.Ю.</i><br>О СТРУКТУРЕ ИНФОРМАЦИОННОЙ СИСТЕМЫ<br>РАСПРЕДЕЛЕННОЙ ОБРАБОТКИ ИНФОРМАЦИИ<br>ДЛЯ УЛУЧШЕНИЯ КАЧЕСТВА ГАЛЬВАНИЧЕСКИХ<br>ПОКРЫТИЙ.....                        | 329        |
| <i>Рафеенко Е.Д., Кондратьева О.М.</i><br>РАСПРЕДЕЛЕННЫЕ И ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ СИСТЕМЫ:<br>СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ .....  | 335        |

# БИОИНФОРМАТИКА И ПРИЛОЖЕНИЯ

## IDENTIFICATION OF GENOMIC MUTATIONS ASSOCIATED WITH DRUG-RESISTANCE

Y. Chen<sup>a</sup>, A. Tuzikov<sup>b</sup>

<sup>a</sup>*Belarusian State University, 4 Niezalieznasci Avenue, Minsk 220030, Belarus, c894424323@outlook.com*

<sup>b</sup>*United Institute of Informatics Problems of the National Academy of Sciences of Belarus Surganova 6, 220012 Minsk, Belarus*

Corresponding author: [c894424323@outlook.com](mailto:c894424323@outlook.com)

Drug resistance in tuberculosis (TB) is a global public health problem, and resistance testing early in treatment can help prevent antibiotic misuse. The data used were from the NIAID TB Portals project (<https://tbportals.niaid.nih.gov>). Mtb whole genome sequences of 3178 patients and resistance testing to 27 drugs were utilized after quality checks. To identify mutant loci associated with drug resistance, single and multiple marker tests were used. Important mutant loci associated with drug resistance in TB were identified. On the one hand, these mutant loci can provide important information for understanding drug resistance in TB, and on the other hand, they can be used as a rapid screening method for various forms of Mtb resistance.

**Keywords:** drug-resistance; tuberculosis; single-marker tests; multi-marker tests.

### Introduction

Worldwide Globally, it is estimated that about 10 million (range 8.9-11 million) people have the diseases with TB in 2020, and this number has been declining very slowly in recent years [1]. More cases of drug resistance have emerged, the appearance including Monoresistance (MonoDR), resistance to one first-line anti-TB drug only; multi-drug resistance (MDR-TB), resistance to isoniazid and rifampicin; and extensive drug resistance (XDR-TB), one fluoroquinolone, and one second- line injectable drug [2]. For the most effective first-line drug, rifampicin, the proportion of new cases of resistance is higher [1]. Therefore, TB drug resistance is a global public health issue. Various machine learning models have been applied to determine drug resistance, e.g., logistic regression (LR) [3], and random forest (RF) [4]. The Genome-wide association analysis (GWAS) method was applied for TB drug resistance analysis [5–7].

## 1. Methodology

### Dataset

The data set contained 3178 samples and their resistance test results for 27 drugs. There are 4418596 nucleotide loci in the whole genome of *Mycobacterium tuberculosis*. Due to the large amount of data, some unmutated loci need to be removed. The unmutated nucleotide loci in the sample subset are deleted. At this point, the total number of loci in this sample is 294153. The MAF (minor allele frequency) was set to 0.01 and remove loci with mutation rates smaller than the MAF were removed. After filtering out, the number of mutations (SNPs) left in the samples was 20,976.

### Single-marker test

Single-marker tests are used to test associations between observed drug resistance and individual mutations. Fisher's exact test and the linear regression model were used as single-marker tests. Fisher's exact test needs constructing the drug sensitivity test and mutation 2D contingency table of cases. Contingency tables considered in single-marker tests for finding mutations associated with resistance

Table 1 – Contingency table considered in single-marker tests for finding mutations associated with resistance

| Drug susceptibility | Presence of mutation |          |          |
|---------------------|----------------------|----------|----------|
|                     | Absent               | Present  | Total    |
| Sensitive           | $n_{00}$             | $n_{01}$ | $n_{0*}$ |
| Resistant           | $n_{10}$             | $n_{11}$ | $n_{1*}$ |
| Total               | $n_{*0}$             | $n_{*1}$ | $n_{**}$ |

The contingency table used for testing correlation of mutation in position 2155175 of *Mtb* genome and resistance to the isoniazid drug for our data is the following:

Table 2 – Isoniazid susceptibility and SNP(2155175) contingency table

| Present   | Absent | Present |
|-----------|--------|---------|
| Sensitive | 435    | 15      |
| Resistant | 151    | 844     |

Application of the Fisher's exact test to this table results in the probability  $p=1.31e-212$  which characterize a statistical significance of the mutation for the resistance to isoniazid. In this case null hypothesis assumes that there is no correlation between the mutation in the considered position and resistance to isoniazid. The probability achieved strongly rejects the null hypothesis that this mutation and isoniazid drug resistance are independent.

## Linear regression model

$$Y = \beta X + \varepsilon \quad (1)$$

Here  $Y$  - phenotype vector,  $\beta$  - parameters to be estimated,  $X$  – genotype vector,  $\varepsilon$  – residual vector.

If resistance to the corresponding drug or drug combination is observed,  $Y_i=1$ ; otherwise, it is equal to 0. If the genotype of this site is '0/0', means no mutation, then  $X_i = 0$ , otherwise if its genotype is '1/1', then  $X_i = 2$ . For example, consider testing mutations at position 2155175 of the Mtb genome and isoniazid resistance. The regression function is  $\hat{Y} = 0.25641 + 0.363074X$ . The chi-square test probability for the parameter  $\beta$  is  $p = 1.456125e-283$ . In this case null hypothesis assumes that there is no correlation between the mutation in the considered position and resistance to isoniazid. The probability achieved strongly rejects the null hypothesis that this mutation and isoniazid drug resistance are independent. By calculating the estimate and its negative logarithm of p-values of all SNPs, and sorting them, we can finally get the relevant mutation sites for drugs.

### Multi-marker test

Multi-marker test is used to select SNP combinations with forward selection method (greedy algorithm). The ratio of training set to test set is 7 versus 3. The classification model is SVM. The evaluation indicator is accuracy.

First, the p-value of a single SNP can be obtained according to the linear regression model. In order to reduce the amount of calculation, SNPs with p-values smaller than 0.05 are used for classification. The number of useful SNPs depends on the type of drug. Then, in the second step, based on the selection of the first SNP, each SNP is re-evaluated to participate in the classification together with the first SNP, and the combination with the greatest improvement in accuracy is selected. Finally, keep iterating to add new SNPs until the accuracy no longer improves.

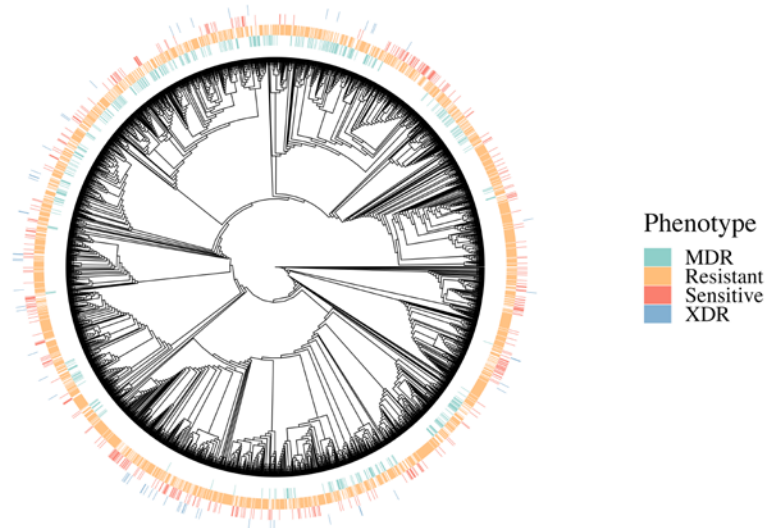
## 2. Results and discussion

### Characterization of the dataset

Each isolate was tested for resistance to at least one of 27 anti-TB drugs: four first-line drugs, isoniazid, rifampicin, ethambutol, and pyrazinamide, some second-line drugs, and other drugs.

A phylogenetic tree of the samples was constructed using all genome-wide SNPs (Picture1). Phenotypic analysis of anti-TB drug susceptibility revealed that 71.1% of the isolates were resistant to at least one drug, of which 13.8% were classified as MDR-TB and 1.9% as XDR-TB

A phylogenetic tree was constructed using all genome-wide SNPs (Picture 1). Phenotypic analysis of anti-TB drug susceptibility revealed that 71.1% of the isolates were resistant to at least one drug, of which 13.8% were classified as MDR-TB and 1.9% as XDR-TB. Because of the small sample size or severe data imbalance for bedaquiline, clarithromycin, aminoglycosides injectible agents, and fluoroquinolone, these four drugs are not involved in training the model



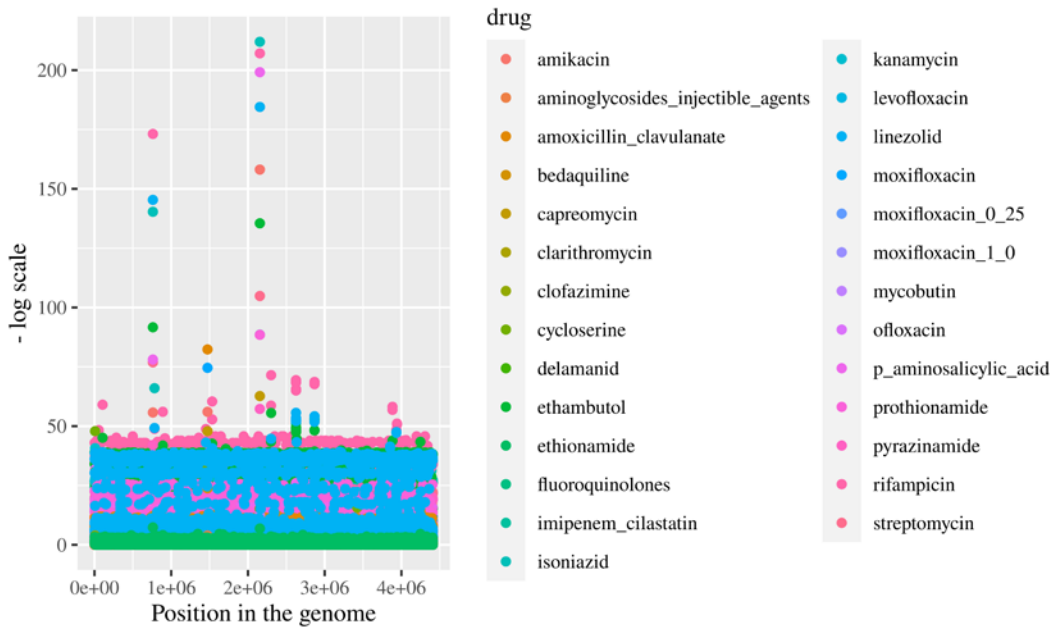
Picture 1 – Whole-genome phylogeny of the 3178 Mycobacterium tuberculosis isolates used for association study

#### Single-marker test results.

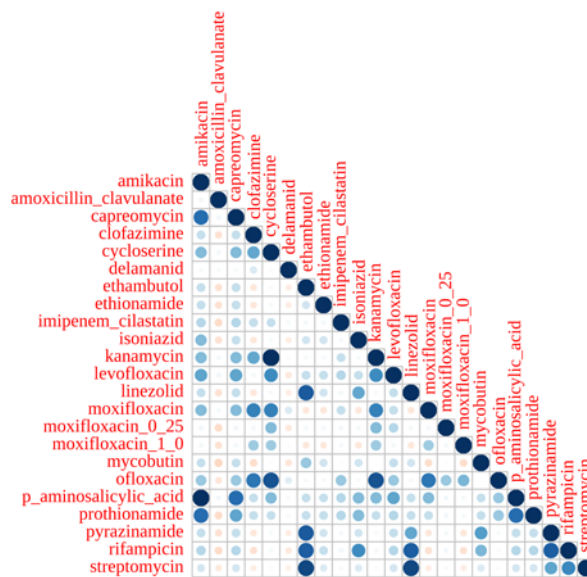
We calculated p-values for the corresponding mutations for all SNPs. To visualize the test results, a Manhattan plot (Picture 2) was used. To allow a more visual representation of the results, the p-values were converted to  $-\log_{10}$  (p-value). The height of the SNP locus on the Y-axis corresponds to the degree of association with a certain drug resistance, the stronger the association (i.e., the lower the p-value) the higher it is. These SNPs with strong associations with drug resistance were also of most interest throughout the research.

Then, the corresponding genes were found based on the five most significant mutant loci for each drug. A correlation analysis was then performed. From Picture 3, it was found that there was a correlation between drug resistance genes of different drugs





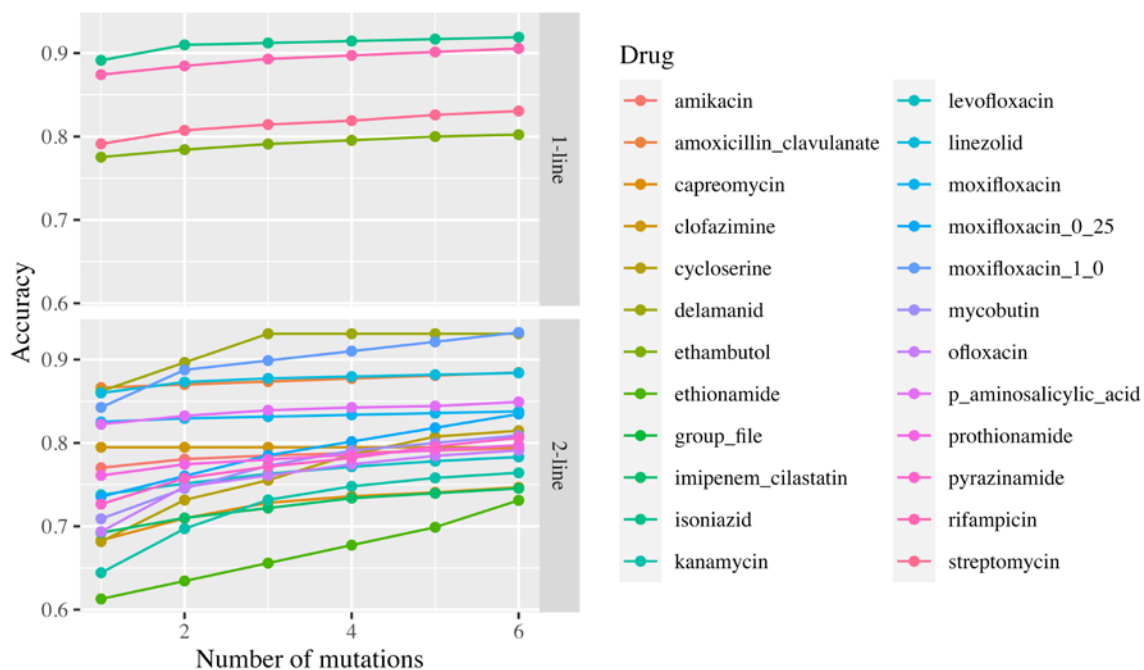
Picture 2 – Single-marker test result



Picture 3 – Correlation between drugs with mutated loci  
Multi-marker test results.

We used the SVM function in the ‘e1071’ package to complete the calculations, and the parameters kernel, c, with default values are respectively. Due to the huge amount of computation, the maximum number of combinations of mutation sites was set to 6. For each drug, some combination of mutation sites that can help improve classification accuracy were obtained.

It can be seen from Picture 4, that the classification accuracy of the model increases as the number of SNPs as classification features increases.



Picture 4 – Multi-marker test result

## Conclusions

In this paper, we used single-marker and multi-marker tests to identify mutations associated with TB drug resistance. The results of the single marker test reflect the association of a single mutation site with resistance to each drug. We found that the mutation sites highly associated with first-line drug resistance were different from those of second-line drugs. We have found that mutations at some loci were highly associated with resistance to several drugs, reflecting the presence of cross-resistance between drugs. In addition, for some second-line drugs, the accuracy improvement of the classifier is larger with combination of mutations.

## Acknowledgment

We acknowledge support from TB Portals Consortium and the TB Portals Program (<https://tbportals.niaid.nih.gov>) [8].

## References

1. World Health Organization et al. World Health Organization Global Tuberculosis Report 2021. URL: <https://www.who.int/teams/global-tuberculosis-programme/tb-reports/global-tuberculosis-report-2021>
2. for the Meta T C G, Ahmad N, Ahuja S D, et al. Treatment correlates of successful outcomes in pulmonary multidrug-resistant tuberculosis: an individual patient data meta-analysis // J. The Lancet. 2018. Vol. 392, № 10150. P. 821–834.

3. Farhat M R, Sultana R, Iartchouk O, et al. Genetic determinants of drug resistance in Mycobacterium tuberculosis and their diagnostic value // J. American journal of respiratory and critical care medicine, 2016. Vol. 194, № 5. P. 621–630.
4. Kouchaki S, Yang Y, Lachapelle A, et al. Multi-label random forest model for tuberculosis drug resistance classification and mutation ranking // J. Frontiers in microbiology. 2020. Vol. 11. P. 667.
5. Sergeev R S, Kavaliou I S, Sataneuski U V, et al. Genome-wide analysis of MDR and XDR Tuberculosis from Belarus: Machine-learning approach // J. IEEE/ACM Transactions on Computational Biology and Bioinformatics. 2017. Vol. 16, № 4. P. 1398–1408.
6. Crook D W, Rodrigues C, Ismail N A, et al. Genome-wide association studies of global Mycobacterium tuberculosis resistance to 13 antimicrobials in 10,228 genomes identify new resistance mechanisms // J. PLoS biology. 2022. Vol. 20, № 8. P. e3001755.
7. Conkle-Gutierrez D, Kim C, Ramirez-Busby S M, et al. Distribution of Common and Rare Genetic Markers of Second-Line-Injectable-Drug Resistance in Mycobacterium tuberculosis Revealed by a Genome-Wide Association Study // J. Antimicrobial Agents and Chemotherapy, 2022. P. e02075-21.
8. Rosenthal A., Gabrielian A., Engle E, et. al. The TB Portals: an Open-Access, Web-Based Platform for Global Drug-Resistant-Tuberculosis Data Sharing and Analysis. // Journal of Clinical Microbiology, 2017. № 77(1). P. 3261–3282. doi.org/10.1128/JCM.01013-17.

**КОМПЬЮТЕРНЫЙ ДИЗАЙН ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ  
МУЛЬТИТАРГЕТНЫХ ПРОТИВООПУХОЛЕВЫХ СОЕДИНЕНИЙ  
НОВОГО ПОКОЛЕНИЯ ДЛЯ ТЕРАПИИ ХРОНИЧЕСКОГО  
МИЕЛОИДНОГО ЛЕЙКОЗА**

**А.М. Андрианов<sup>1</sup>, Ю.В. Корноушенко<sup>1</sup>, Е.В. Королёва<sup>2</sup>,  
Ж.В. Игнатович<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*Институт биоорганической химии Национальной академии наук Беларуси,  
ул. Купревича 5/2, 220141, г. Минск, Беларусь,  
alexande.andriano@yandex.ru, yurakorval@gmail.com*

<sup>2</sup>*Институт химии новых материалов Национальной академии наук Беларуси,  
ул. Франциска Скорины 36, 220141, г. Минск, Беларусь,  
evk@ichnm.by*

Осуществлен компьютерный дизайн 126 амидов 2-ариламинопиримидинового ряда – потенциальных мультитаргетных ингибиторов протеинкиназ Bcr-Abl, Bcr-Abl<sup>T315I</sup>, mTOR и JAK2, играющих важную роль в развитии хронического миелоидного лейкоза. С помощью метода молекулярного докинга проведена оценка биологической активности сконструированных соединений по отношению к этим ферментам. В результате идентифицированы четыре соединения-лидера, эффективно взаимодействующие с АТФ-связывающими сайтами всех исследованных протеинкиназ. Выполнен анализ межмолекулярных взаимодействий, реализующихся в структурных комплексах этих соединений с терапевтическими мишенями, и рассчитаны свободные энергии их образования. На основе полученных данных показано, что идентифицированные соединения формируют перспективные базовые структуры для разработки эффективных противоопухолевых препаратов нового поколения.

**Ключевые слова.** Хронический миелоидный лейкоз, ингибиторы протеинкиназ, молекулярное моделирование, противоопухолевые препараты.

**COMPUTER-AIDED DESIGN OF POTENTIAL MULTI-TARGETING  
ANTICANCER COMPOUNDS OF A NEW GENERATION FOR  
THERAPY OF CHRONIC MYELOID LEUKEMIA**

**A.M. Andrianov<sup>a</sup>, Yu.V. Kornoushenko<sup>a</sup>, E.V. Koroleva<sup>b</sup>,  
J.V. Ignatovich<sup>b</sup>**

<sup>a</sup>*Institute of Bioorganic Chemistry, National Academy of Sciences of Belarus,  
Kuprevich Street 5/2, Minsk 220141, Belarus, alexande.andriano@yandex.ru,  
yurakorval@gmail.com*

<sup>b</sup>*Institute of Chemistry of New Materials, National Academy of Sciences of Belarus,  
Francysk Skaryna Street 36, Minsk 220141, Belarus, evk@ichnm.by  
Corresponding author: alexande.andriano@yandex.ru*

Computer-aided design of 126 amides of the 2-arylamino-pyrimidine series, potential multi-targeting inhibitors of protein kinases Bcr-Abl, Bcr-Abl<sup>T315I</sup>, mTOR, and JAK2 which play an important role in the development of chronic myeloid leukemia, was carried out. Using molecular docking tools, the biological activity of the designed compounds towards these enzymes was evaluated. As a result, four top-ranking compounds that efficiently interact with the ATP-binding sites of all the above protein kinases were identified. Analysis of intermolecular interactions realized in the structural complexes of these compounds with the therapeutic targets has been performed and the free energies of their formation have been calculated. Based on the data obtained, the identified compounds were predicted to form promising basic structures for the development of potent anticancer drugs of a new generation.

**Keywords:** Chronic myeloid leukemia; protein kinase inhibitors; molecular modeling; anticancer drugs.

## Введение

Современный дизайн противоопухолевых препаратов все больше ориентируется на разработку полифункциональных ингибиторов, содержащих два и более фармакофора из разных лекарственных веществ, что усиливает активность соединений-предшественников и даже приводит к новым видам биологической активности за счет появления дополнительных взаимодействий с белком-мишенью [1]. Многофакторные процессы, ведущие к развитию и прогрессированию рака, влияют на многочисленные сигнальные пути и вызывают нарушение регуляции множества физиологических процессов. По этой причине лечение рака требует модуляции многих биологических мишеней для обеспечения достаточной терапевтической эффективности. Это достигается либо комбинированной терапией несколькими таргетными препаратами, либо применением мультитаргетных препаратов, воздействующих на несколько терапевтических мишеней и оказывающих аддитивное действие [1].

Возникающая со временем лекарственная устойчивость опухолевых клеток к химиотерапевтическим препаратам, используемым для терапии хронического миелоидного лейкоза (ХМЛ), характеризующегося быстрым неконтролируемым ростом миелоидных клеток в периферической крови и костном мозге, стимулирует поиск новых более эффективных ингибиторов протеинкиназ и схем лечения. Одной из перспективных стратегий разработки таких ингибиторов является дизайн химерных молекул на основе производных 2-ариламинопиримидина, которые наиболее часто используются в качестве базовых структур для создания низкомолекулярных ингибиторов протеинкиназ – органических соединений, проявляющих направленное патогенетическое действие.

Цель настоящей работы – осуществить дизайн и *in silico* оценку потенциальной противоопухолевой активности новых низкомолекулярных химических соединений на основе амидов 2-ариламинопиримидинового ряда, способных блокировать АТФ-связывающие сайты нативной Bcr-Abl тирозинкиназы, ее мутантной формы T<sup>315I</sup>, серин/треонин специфической протеинкиназы mTOR и тирозинкиназы JAK2 – ферментов, играющих важную роль в развитии хронических форм миелоидного лейкоза. В то время как Bcr-Abl протеинкиназа непосредственно связана с прогрессированием ХМЛ, активность протеинкиназ mTOR и JAK2 охватывает большую группу различных лейкозов и связана с резистентностью опухолей к ингибиторам и с пролиферацией опухолевых клеток [2].

## 1. Методология исследования

Методология дизайна мультитаргетных ингибиторов протеинкиназ базировалась на объединении 2-ариламинопиримидинового фрагмента – основного фармакофора ингибиторов Bcr-Abl тирозинкиназы иматиниба и нилотиниба – с различными фрагментами азотсодержащих гетероциклических молекул, способных усиливать аффинность связывания лигандов за счет образования дополнительных прямых межатомных контактов с молекулярной мишенью. Для конструирования химерных молекул варьировали фармакофы в кислотном остатке амидов, изменяли положение заместителей в ариламинопиримидине, а также положение NH и NHCO групп. В результате были сконструированы структуры 126 амидов, эффективность связывания которых с протеинкиназами оценивали методом молекулярного докинга. Для генерации двумерных проекций координат атомов молекул использовали химический редактор ChemDraw 18.0 (<https://perkinelmerinformatics.com/products/research/chemdraw>), а затем с помощью программы Open Babel 2.4.1 рассчитывали трехмерные структуры этих соединений с последующей оптимизацией их геометрии и минимизацией энергии в силовом поле UFF ([http://openbabel.org/wiki/Main\\_Page](http://openbabel.org/wiki/Main_Page)).

**Молекулярный докинг.** Подготовку соединений для молекулярного докинга осуществляли с помощью программного пакета MGLTools (<https://ccsb.scripps.edu/mgltools/>). Молекулярный докинг проводили с использованием программы AutoDock Vina (<https://vina.scripps.edu>) в приближении жесткого рецептора и гибких лигандов. Трехмерные структуры протеинкиназ Bcr-Abl, Bcr-Abl<sup>T315I</sup>, mTOR и JAK2 заимствовали из Банка данных белков (<https://www.rcsb.org>; PDB ID: 3KFA, 3OY3, 4JT5, 3KRR соответственно). Ячейки для докинга охватывали АТФ-связывающие сай-

ты киназ. Параметр, характеризующий полноту поиска (охват конформационного пространства), был задан равным 100 (<https://vina.scripps.edu>).

**Оценка аффинности связывания для комплексов лиганд/киназа.** Значения свободной энергии связывания лигандов с протеинкиназами рассчитывали с помощью классической оценочной функции (ОФ) AutoDock Vina (<https://vina.scripps.edu>) и двух функций машинного обучения – RF-Score-4 (<https://pjballester.wordpress.com/software/>) и NNScore 2.0 (<https://git.durrantlab.pitt.edu/jdurrant/nnscore2>). Затем для всех соединений определяли их ранги для каждой мишени согласно значению ОФ и на основе этих данных вычисляли величину экспоненциального консенсусного ранга (ECR) по формуле (1) [3]:

$$ECR = \sum_{sf} \frac{1}{\sigma_{sf}} * \exp \left\{ -\frac{rank_{sf}}{\sigma_{sf}} \right\} \quad (1)$$

где  $rank_{sf}$  – ранг соединения по данным ОФ  $sf$ ;  $\sigma_{sf}$  – параметр, контролирующий влияние ОФ на результаты консенсусного отбора (при расчетах ECR для всех рассматриваемых ОФ значение  $\sigma_{sf}$  задавали равным 10, предполагая, что их вклады в суммарную величину ECR одинаковы).

На заключительном шаге для всех лигандов рассчитывали перекрестный экспоненциальный консенсусный ранг (crossECR) по формуле (2):

$$crossECR(lig) = \sum_{prot} \frac{ECRrank_{prot}(lig)}{\max_{lig} \{ECRrank_{prot}(lig)\}} \quad (2)$$

где  $ECRrank_{prot}$  – групповой ранг лиганда  $i$  для  $k$ -ой мишени, рассчитанный с использованием величин ECR. Лиганды, имевшие более низкие по сравнению с контрольными соединениями значения crossECR, относили к группе перспективных кандидатов на роль мультитаргетных противоопухолевых соединений, способных эффективно блокировать АТФ-связывающие сайты протеинкиназ Vcr-Abl, Vcr-Abl<sup>T315I</sup>, mTOR и JAK2. В качестве контрольных соединений в расчетах использовали следующие ингибиторы: иматиниб и нилотиниб для Vcr-Abl киназы, понатиниб – для ее мутантной формы Vcr-Abl<sup>T315I</sup>, торкиниб (PP242) – для протенкиназы mTOR и федратиниб – для тирозинкиназы JAK2.

## 2. Результаты и их обсуждение

В результате проведенных расчетов были отобраны четыре соединения-лидера (рис. 1), которые проявляют высокую аффинность связывания с АТФ-связывающими сайтами Vcr-Abl, Vcr-Abl<sup>T315I</sup>, mTOR и JAK2 и, согласно данным перекрестного экспоненциального консенсусного ранжи-

рования, характеризуются более низкими величинами crossECR по сравнению с ингибиторами протеинкиназ, использованными в качестве контрольных соединений (табл. 1).

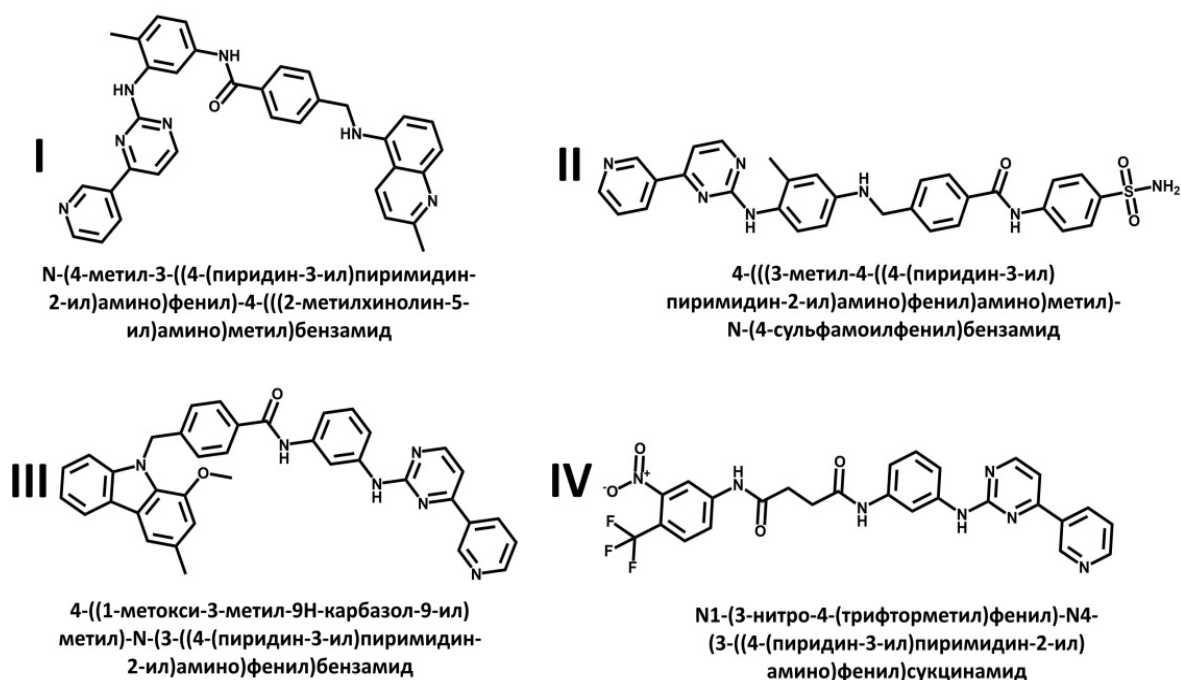


Рисунок 1 – Химические структуры четырех соединений, лучших по значению перекрестного экспоненциального консенсусного ранга. Приведены названия соединений в соответствии с систематической номенклатурой ИЮПАК

Анализ структурных комплексов лиганд/киназа свидетельствуют о том, что идентифицированные соединения характеризуются близким механизмом взаимодействия с АТФ-связывающими сайтами рассматриваемых протеинкиназ, основу которого формируют ван-дер-ваальсовы силы, водородные связи,  $\pi$ - $\pi$ -стэкинг и катион- $\pi$  взаимодействия. При этом доминирующую роль в стабилизации структурных комплексов играют многочисленные ван-дер-ваальсовы контакты, в которые вовлечены функционально важные остатки активных центров ферментов. В частности, лиганд I (рис. 1), характеризующийся во всех рассматриваемых случаях более низкими, по сравнению с контрольными ингибиторами, значениями свободной энергии связывания, формирует широкую сеть ван-дер-ваальсовых взаимодействий, а также водородные связи с остатками Asp-381 (Bcr-Abl киназа), Glu-286 (Bcr-Abl<sup>T315I</sup>), Val-865, (mTOR) и , His-994 (JAK2).



Таблица 1. Значения свободной энергии связывания  $\Delta G$ , рассчитанные для комплексов соединений I–IV с протеинкиназами Bcr-Abl (1), Bcr-Abl<sup>T315I</sup> (2), mTOR (3) и JAK2 (4) с помощью оценочных функций Vina, RFScore4 и NNScore 2.0, и соответствующие величины crossECR.

| Лиганд          | $\Delta G_{\text{VINA}}$ , ккал/моль |       |       |       | $\Delta G_{\text{RFScore4}}$ , ккал/моль |       |       |       | $\Delta G_{\text{NNScore2.0}}$ , ккал/моль |       |       |       | cross ECR   |
|-----------------|--------------------------------------|-------|-------|-------|--|-------|-------|-------|--|-------|-------|-------|-------------|
|                 | 1                                    | 2     | 3     | 4     | 1  | 2     | 3     | 4     | 1  | 2     | 3     | 4     |             |
| I               | -12,7                                | -11,8 | -10,0 | -12,1 | -11,5                                    | -11,5 | -11,6 | -10,4 | -12,6                                      | -11,4 | -10,7 | -13,3 | <b>0,41</b> |
| II              | -12,3                                | -10,6 | -9,2  | -10,2 | -11,5                                    | -11,3 | -11,1 | -11,1 | -13,1                                      | -11,7 | -11,4 | -12,4 | <b>0,44</b> |
| III             | -13,1                                | -11,0 | -10,0 | -11,5 | -11,4                                    | -11,6 | -11,1 | -10,5 | -10,3                                      | -10,8 | -10,6 | -12,6 | <b>0,44</b> |
| IV              | -11,5                                | -10,3 | -9,0  | -10,1 | -11,3                                    | -11,2 | -11,1 | -11,1 | -11,6                                      | -12,0 | -11,0 | -12,4 | <b>0,58</b> |
| понати-<br>ниб  | -12,0                                | -12,2 | -8,4  | -10,7 | -11,4                                    | -11,3 | -10,4 | -11,3 | -12,2                                      | -12,3 | -11,6 | -9,1  | <b>0,88</b> |
| федра-<br>тиниб | -10,3                                | -8,8  | -8,4  | -9,8  | -11,2                                    | -10,9 | -10,7 | -11,2 | -12,7                                      | -9,5  | -8,6  | -12,4 | <b>1,6</b>  |
| торки-<br>ниб   | -8,5                                 | -8,7  | -8,2  | -8,6  | -10,0                                    | -9,6  | -10,2 | -10,1 | -9,2                                       | -6,8  | -9,3  | -7,4  | <b>3,5</b>  |

Наряду с водородными связями, этот лиганд участвует в катион- $\pi$ -взаимодействии с остатком Lys-271 Bcr-Abl<sup>T315I</sup>, а также с остатками Lys-812 и His-965 mTOR. Кроме этого, соединение I образует  $\pi$ -стэкинг с  $\pi$ -сопряженными системами ароматических остатков Tyr-253 и Phe-359 Bcr-Abl, Phe-317 и His-361 Bcr-Abl<sup>T315I</sup>, Tyr-2225, Trp-2239 и His-2340 mTOR и Tyr-934 JAK2.

Таким образом, результаты молекулярного докинга (табл. 1) позволяют предположить, что соединения I–IV (рис. 1) могут быть потенциально активными по отношению к АТФ-связывающим сайтам протеинкиназ Bcr-Abl, Bcr-Abl<sup>T315I</sup>, mTOR и JAK2 и, поэтому, обладать мультикиназным профилем ингибиторной активности. Безусловно, при анализе результатов молекулярного докинга следует иметь в виду, что этот подход к моделированию структуры комплексов белков с лигандами и к оценке энергии межмолекулярных взаимодействий использует различные приближения. Тем не менее, сравнительный анализ данных об аффинности связывания комплексов лиганд/киназа, полученных с привлечением трех различных оценочных функций, показывает (табл. 1), что подход, использованный в настоящем исследовании, позволил избежать ложноположительных результатов и корректно оценить силу межмолекулярных взаимодействий. В связи с этим, идентифицированные соединения могут

представлять интерес для дальнейшего экспериментального анализа с целью подтверждения *in vitro* их *in silico* свойств.

### **Заключение**

Данные молекулярного моделирования показывают, что идентифицированные методами молекулярного моделирования производные 2-ариламинопиримидинового ряда (рис. 1) могут быть использованы в качестве перспективных базовых структур для разработки новых мульти-таргетных противоопухолевых препаратов, терапевтическое действие которых основано на совместной блокаде протеинкиназ Vcr-Abl, Vcr-Abl<sup>T315I</sup>, mTOR и JAK2, играющих важную роль в развитии ХМЛ.

Работа выполнена в рамках задания 3.4.1. «Разработка новых противоопухолевых и противовирусных органических соединений с использованием методов компьютерного моделирования, машинного обучения и химического синтеза» ГПНИ «Конвергенция-2025»

### **Библиографические ссылки**

1. Proschak E., Stark H., Merk A. Polypharmacology by Design: A Medicinal Chemist's Perspective on Multitargeting Compounds // J.Med Chem. 2019. № 62(2). P. 420–444.
2. Mogni L., Marzaro G., Redaelli S., Zamboni A. Dual Kinase Targeting in Leukemia // Cancers (Basel). 2021. № 13(1). P. 119. doi: 10.3390/cancers13010119.
3. Palacio-Rodriguez K., Lans I., Cavasotto C.N., Cossio P. Exponential consensus ranking improves the outcome in docking and receptor ensemble docking // Scientific Reports. 2019. № 9(1). P. 5142. doi: 10.1038/s41598-019-41594.

**IN SILICO ИДЕНТИФИКАЦИЯ ВЫСОКОАФФИННЫХ  
ЛИГАНДОВ БЕЛКА KasA МИКОБАКТЕРИИ M.TUBERCULOSIS –  
ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ИНГИБИТОРОВ ЛЕКАРСТВЕННО-  
УСТОЙЧИВЫХ ФОРМ ТУБЕРКУЛЕЗА**

**А.М. Андрианов<sup>1</sup>, К.В. Фурс<sup>2</sup>, А.М. Юшкевич<sup>2</sup>, А.В. Гончар<sup>2</sup>,  
А. Габриэлян<sup>3</sup>, А. Розенталь<sup>3</sup>, А.В. Тузиков<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*Институт биоорганической химии, Национальная академия наук Беларуси,  
ул. ак. Купревича, 5/2, 220141, г. Минск, Республика Беларусь,  
alexande.andriano@yandex.ru*

<sup>2</sup>*Объединенный институт проблем информатики, Национальная академия наук  
Беларуси, 220012, ул. Сурганова, 6, Минск, Республика Беларусь,  
tuzikov@newman.bas-net.by*

<sup>3</sup>*Управление киберинфраструктуры и вычислительной биологии, Национальный  
институт аллергии и инфекционных заболеваний, Национальные институты  
здравоохранения, Бетесда, Мэриленд, США*

Методами молекулярного моделирования осуществлен виртуальный скрининг потенциальных ингибиторов лекарственно-устойчивых форм туберкулеза, способных блокировать белок KasA – один из ключевых ферментов, участвующих в биосинтезе компонентов клеточной стенки микобактерии *M.tuberculosis*. Проведена *in silico* оценка эффективности связывания белка KasA с соединениями из баз данных DrugBank, ZINC15 и Selleck Chemicals. Идентифицированы шесть молекул, проявляющих высокую аффинность связывания с каталитическим сайтом фермента. Показано, что эти соединения формируют перспективные базовые структуры для разработки новых антибактериальных препаратов для лечения лекарственно-устойчивого туберкулеза.

**Ключевые слова.** Лекарственно-устойчивый туберкулез; белок KasA; ингибиторы *M.tuberculosis*; виртуальный скрининг; молекулярное моделирование; антибактериальные препараты.

**IN SILICO IDENTIFICATION OF HIGH AFFINITY LIGANDS  
OF THE KasA PROTEIN OF M.TUBERCULOSIS MYCOBACTERIA  
PRESENTING POTENTIAL INHIBITORS OF DRUG-RESISTANT  
TUBERCULOSIS FORMS**

**A.M. Andrianov<sup>a</sup>, K.V. Furs<sup>b</sup>, A.M., Yushkevich<sup>b</sup>, A.V. Gonchar<sup>b</sup>,  
A. Gabrielian<sup>c</sup>, A. Rosenthal<sup>c</sup>, A.V. Tuzikov<sup>b</sup>**

<sup>a</sup>*Institute of Bioorganic Chemistry, National Academy of Sciences of Belarus,  
ac. Kuprevich str., 5/2, Surganov str., Minsk, Republic of Belarus,  
alexande.andriano@yandex.ru*

<sup>b</sup>*United Institute of Informatics Problems, National Academy of Sciences of Belarus,  
Surganov str., 6, Minsk, Republic of Belarus*

<sup>c</sup>*Office of Cyber Infrastructure & Computational Biology, National Institute of Allergy  
and Infectious Disease, National Institutes of Health, Bethesda, MD, USA*

Using molecular modeling methods, a virtual screening of potential inhibitors of drug-resistant forms of tuberculosis able to block the KasA protein, one of the key enzymes involved in the biosynthesis of the components of the cell wall of mycobacterium *M.tuberculosis*, was carried out. An *in silico* assessment of the binding efficiency of the KasA protein to compounds from the databases DrugBank, ZINC15 and Selleck Chemicals was performed. Six molecules exhibiting a high binding affinity to the enzyme catalytic site have been identified. These compounds are shown to form good scaffolds for the development of novel antibacterial drugs for the treatment of drug-resistant tuberculosis.

**Keywords:** Drug-resistant tuberculosis; KasA protein; *M.tuberculosis* inhibitors; virtual screening; molecular modeling; antibacterial drugs.

## **Введение**

Согласно Докладу Всемирной организации здравоохранения о глобальной борьбе с туберкулезом в 2021 г., пандемия COVID-19 серьезно подорвала успехи, достигнутые в борьбе с этим заболеванием во всем мире: впервые за более чем десять лет показатели смертности от туберкулеза возросли. Так, в 2020 г. от туберкулеза скончались 1,5 млн. человек (включая 214 000 пациентов с ВИЧ) и, по модельным прогнозам ВОЗ, в 2021 и 2022 гг. число заболевших и умерших в результате инфицирования туберкулезом людей будет гораздо выше (WHO. 2021, Global Tuberculosis Report). Туберкулез по-прежнему входит в десятку основных причин смертей во всем мире и является основной причиной гибели пациентов с ВИЧ и сахарным диабетом, что в первую очередь связано с резистентностью к используемым в клинической практике противомикробным препаратам. Увеличение распространенности лекарственной устойчивости представляет серьезную проблему для эффективной борьбы с туберкулезом. В связи с этим, одним из ключевых вызовов, стоящих перед научным сообществом, является лечение туберкулеза с множественной и широкой лекарственной устойчивостью, что обуславливает актуальность, важность и практическую значимость исследований по разработке новых эффективных ингибиторов микобактерии *M.tuberculosis* – этиологического агента туберкулеза.

Целью работы является идентификация методами виртуального скрининга и молекулярного моделирования новых потенциальных ингибиторов лекарственно-устойчивых форм туберкулеза, терапевтическое действие которых основано на блокаде белка KasA – одного из ключевых

ферментов, участвующих в биосинтезе компонентов клеточной стенки микобактерии *M.tuberculosis*.

Задачи исследования:

1) Молекулярный докинг соединений из виртуальной молекулярной библиотеки, составленной их химических соединений баз данных DrugBank (<https://go.drugbank.com/>), ZINC15 (<https://zinc.docking.org/>) и Selleck Chemicals (<https://www.selleckchem.com/>), с каталитическим центром фермента KasA микобактерии *M.tuberculosis*;

2) оценка аффинности связывания комплексов лиганд/KasA с помощью трех разных оценочных функций;

3) расчеты экспоненциального консенсусного ранга (ECR) [1] для каждого соединения и выбор лигандов с лучшими значениями ECR для их дальнейшего анализа методами молекулярной динамики;

4) молекулярная динамика (МД) комплексов лиганд/KasA и отбор соединений, перспективных для тестирования на антибактериальную активность.

## 1. Материалы и методы

Для проведения виртуального скрининга потенциальных ингибиторов белка KasA микобактерии *M.tuberculosis* использовали виртуальную молекулярную библиотеку, которая содержала 28 860 химических соединений из баз данных DrugBank (<https://go.drugbank.com/>), ZINC15 (<https://zinc.docking.org/>) и Selleck Chemicals (<https://www.selleckchem.com/>). Молекулярный докинг этих соединений с активным центром фермента KasA проводили с помощью программы AutoDock Vina (<https://vina.scripps.edu>) в приближении жесткого рецептора и гибких лигандов. Структуру белка выделяли из его комплекса с ингибитором TLM5 [2] (ID PDB: 4C72). Ячейка для докинга включала область интерфейса TLM5/KasA и имела следующие параметры:  $\Delta X = 20,67 \text{ \AA}$ ,  $\Delta Y = 24,8 \text{ \AA}$ ,  $\Delta Z = 16,46 \text{ \AA}$  с центром при  $X = -7.24 \text{ \AA}$ ,  $Y = -19.9 \text{ \AA}$ ,  $Z = 6.75 \text{ \AA}$ . Параметр, характеризующий полноту поиска (охват конформационного пространства), был задан равным 100 (<https://vina.scripps.edu>). Значения свободной энергии образования комплексов лиганд/KasA рассчитывали с помощью оценочных функций AutoDock Vina RF-Score-4 (<https://pjballester.wordpress.com/software/>) и NNScore 2.0 NNScore 2.0 (<https://git.durrantlab.pitt.edu/jdurrant/nnscore2>), а затем для каждого соединения вычисляли величину ECR. Комплексы соединений с белком KasA, имеющих высокие значения ECR, исследовали методом молекулярной динамики.

Классическую динамику комплексов лиганд/KasA в воде выполняли с помощью программного пакета Amber18 с использованием силового поля Amber ff14SB (<https://ambermd.org/doc12/Amber18.pdf>). После настройки системы атомы остова белка фиксировали дополнительным гармоническим потенциалом с силовой константой  $2,0 \text{ ккал/моль/\text{Å}^2}$  и систему подвергали уравниванию с помощью модуля Sander программы Amber18 (<https://ambermd.org/doc12/Amber18.pdf>). Уравнивание проводили в четыре последовательных этапа: 1) минимизация энергии с использованием 5000 шагов алгоритма наискорейшего спуска, за которыми следовали 5000 шагов алгоритма сопряженных градиентов; 2) систему постепенно нагревали от 0 К до 300 К в течение 50 пс в ансамбле NVT с использованием термостата Ланжевена с частотой столкновений  $2,0 \text{ пс}^{-1}$ ; 3) уравнивание давления осуществляли в течение 50 пс при давлении 1,0 атм. в ансамбле NPT с привлечением баростата Берендсена с характерным временем 2,0 пс; 4) ограничения на комплекс снимали и систему вновь уравнивали при 300 К в течение 0,5 нс при постоянном давлении. После достижения равновесия проводили молекулярную динамику в течение 200 нс в ансамбле NPT при температуре  $T = 300 \text{ К}$  и давлении  $P = 1,0 \text{ атм}$ . Анализ молекулярно-динамических траекторий выполняли для последних 80 нс с помощью модуля CPPTRAJ программы Amber18 (<https://ambermd.org/doc12/Amber18.pdf>).

Во всех расчетах в качестве положительного контроля использовали аналог тиолактомицина (TLM) TLM5 – один из самых перспективных ингибиторов микобактерии *M.tuberculosis*, блокирующих каталитический сайт белка KasA [3].

## 2. Результаты и обсуждение

Анализ статических моделей комплексов лиганд/белок показывает, что 6 соединений с лучшими значениями ECR согласно данным молекулярного докинга проявляют высокое сродство к ферменту и характеризуются более низкими значениями свободной энергии связывания по сравнению с ингибитором TLM5. Кроме того, эти соединения образуют широкую сеть межмолекулярных контактов с функционально важными остатками каталитического сайта фермента KasA, которые обеспечиваются главным образом множественными ван-дер-ваальсовыми взаимодействиями, водородными связями,  $\pi$ - $\pi$ -стэкингом и солевыми мостиками. При этом основной вклад в энергетическую стабилизацию комплексов лиганд/KasA вносят ван-дер-ваальсовы взаимодействия.

Молекулярно-динамические расчеты подтверждают эти выводы: анализируемые комплексы стабильны на МД траекториях, о чем свиде-

тельствуют средние значения свободных энергий связывания и соответствующие значения стандартной ошибки среднего (рис. 1).

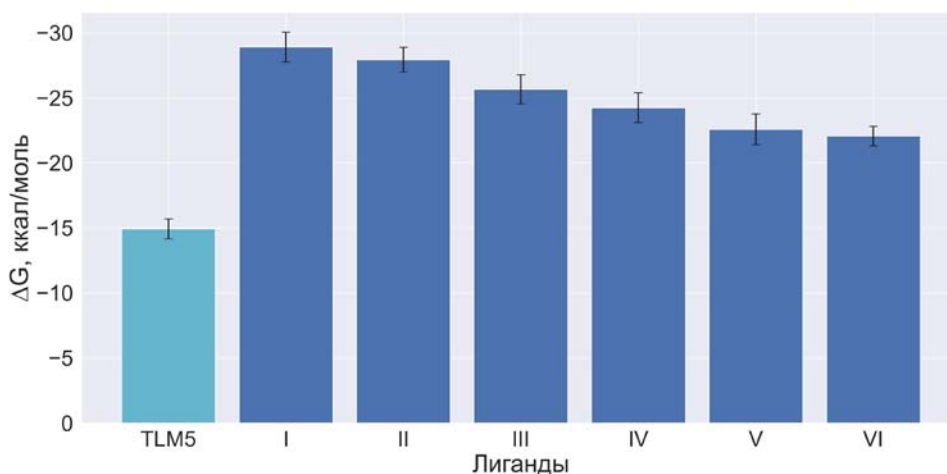


Рисунок 1 – Средние значения свободной энергии связывания  $\Delta G$ , рассчитанные для идентифицированных соединений и ингибитора TLM5, связанных с белком KasA. Значения стандартной ошибки среднего ( $\Delta G_{SEM}$ ) обозначены вертикальными линиями

Анализ рис. 1 показывает, что эти средние значения значительно ниже величины, полученной с использованием идентичного вычислительного протокола для ингибитора *M.tuberculosis* TLM5. Относительную стабильность комплексов лиганд/KasA подтверждают данные о временных зависимостях среднеквадратичных отклонений (RMSD, Root-Mean-Square Deviation) положений атомов между всеми МД структурами комплексов лиганд/KasA и их исходными моделями (рис. 2). Как видно из рисунка 2, анализируемые комплексы не претерпевают существенных структурных изменений на МД траекториях, что подтверждается средними значениями RMSD, рассчитанными для динамических моделей идентифицированных соединений, связанных с белком KasA. Эти средние значения, равные  $1,28 \pm 0,12 \text{ \AA}$  (соединение I),  $1,06 \pm 0,08 \text{ \AA}$  (соединение II),  $1,30 \pm 0,09 \text{ \AA}$  (соединение III),  $1,14 \pm 0,09 \text{ \AA}$  (соединение IV),  $1,11 \pm 0,07 \text{ \AA}$  (соединение V) и  $1,12 \pm 0,08 \text{ \AA}$  (соединение VI), очень близки к величине  $1,13 \pm 0,10 \text{ \AA}$ , рассчитанной для ингибитора TLM5 (рис. 2).

Расчет среднеквадратичных флуктуаций (RMSF, Root Mean Square Fluctuation) отдельных остатков KasA, указывающих на гибкость каждой аминокислоты во время МД моделирования, показывает, что большинство остатков фермента пространственно ограничены. Анализ величин RMSF указывает на небольшие структурные колебания остатков KasA как в комплексах с соответствующими соединениями, так и в несвязанной форме.

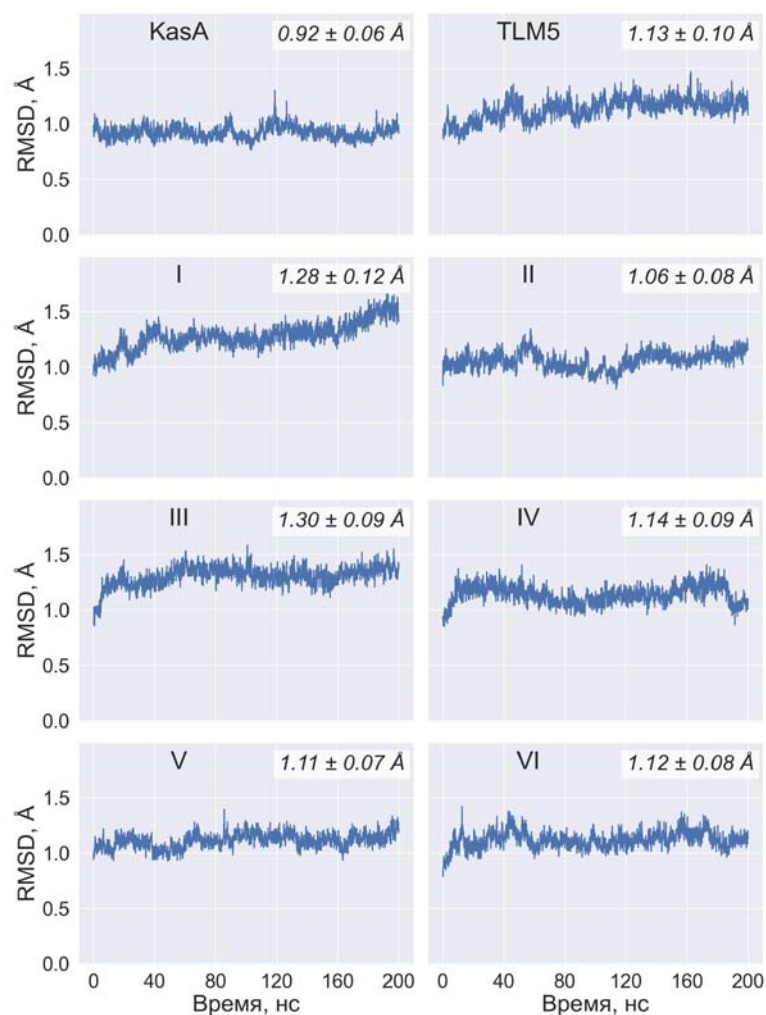


Рисунок 2 – Зависимость от времени значений RMSD (Å), рассчитанных между всеми структурами MD и исходными моделями комплексов лиганд/KasA. В расчетах использовались атомы основной цепи KasA. В правом верхнем углу указаны средние значения СКО и соответствующие стандартные отклонения

Основные флуктуации наблюдаются на сегментах, расположенных за пределами каталитического сайта белка KasA. Средние значения RMSF для комплексов лиганд/KasA и белка в свободном состоянии примерно одинаковы и находятся в диапазоне от 0,53 до 0,60 Å. Важно отметить, что аминокислотные остатки KasA, расположенные в активном центре фермента, также пространственно ограничены, включая аминокислоты, которые преобладают в интерфейсе лиганд/KasA. Для этих критически важных остатков значения RMSF не превышают 1,0 Å. Эти данные свидетельствуют о том, что ключевые остатки фермента демонстрируют небольшие внутренние движения, способствуя тому, чтобы рассматриваемые соединения могли блокировать каталитический сайт KasA.



## Заключение

Данные молекулярного моделирования показывают, что идентифицированные в результате виртуального скрининга соединения могут эффективно блокировать активный центр фермента KasA путем многочисленных ван-дер-ваальсовых контактов, водородных связей, специфических  $\pi$ - $\pi$ -взаимодействий и солевых мостиков. Эффективность межмолекулярных взаимодействий в комплексах лиганд/KasA подтверждают низкие значения свободной энергии связывания, что указывает на высокое сродство идентифицированных молекул с областью белка KasA, критически важной для биосинтеза компонентов клеточной стенки микобактерии *M.tuberculosis*. Таким образом, данные молекулярного моделирования свидетельствуют о том, что идентифицированные молекулы представляют значительный интерес для проведения дальнейших экспериментальных и теоретических исследований. Эти исследования включают химический синтез соединений, биомедицинские испытания *in vitro* и оптимизацию структуры соединения-лидера, направленную на получение его аналогов с улучшенной антибактериальной активностью и приемлемыми фармакологическими свойствами.

Работа выполнена при поддержке Консорциума и Программы по разработке портала по лекарственно устойчивому туберкулезу [4] (<https://tbportals.niaid.nih.gov>).

## Библиографические ссылки

1. Palacio-Rodríguez K., Lans I., Cavasotto C. N., Cossio P. Exponential Consensus Ranking Improves the Outcome in Docking and Receptor Ensemble Docking // *Sci. Rep.* 2019. № 9(1). Article 1.
2. Luckner S.R., Machutta C.A., Tonge P.J., Kisker C. Crystal Structures of Mycobacterium Tuberculosis KasA Show Mode of Action Within Cell Wall Biosynthesis and Its Inhibition by Thiolactomycin // *Structure*. 2009. № 17(7). P. 1004–1013.
3. Machutta C.A., Bommineni G.R., Luckner S.R. et al. Slow Onset Inhibition of Bacterial Beta-Ketoacyl-Acyl Carrier Protein Synthases by Thiolactomycin // *J. Biol. Chem.* 2010. № 285(9). P. 6161–6169.
4. Rosenthal A., Gabrielian A., Engle E, et. al. The TB Portals: an Open-Access, Web-Based Platform for Global Drug-Resistant-Tuberculosis Data Sharing and Analysis // *Journal of Clinical Microbiology*, 2017. № 77(1). P. 3261–3282. //doi.org/10.1128/JCM.01013-17.

**ВИРТУАЛЬНЫЙ СКРИНИНГ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ  
ИНГИБИТОРОВ КОРОНАВИРУСА SARS-CoV-2  
И ПРЕДСКАЗАНИЕ ИХ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ  
МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ**

**А.М. Андрианов<sup>1</sup>, К.В. Фурс<sup>2</sup>, А.М. Юшкевич<sup>2</sup>,  
А.В. Гончар<sup>2</sup>, А.В. Тузиков<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*Институт биоорганической химии, Национальная академия наук Беларуси,  
ул. ак. Купревича, 5/2, 220141, г. Минск, Республика Беларусь,  
alexande.andriano@yandex.ru*

<sup>2</sup>*Объединенный институт проблем информатики, Национальная академия наук  
Беларуси, 220012, ул. Сурганова, 6, Минск, Республика Беларусь,  
tuzikov@newman.bas-net.by*

С целью обнаружения потенциальных ингибиторов коронавируса SARS-CoV-2 сформирована виртуальная молекулярная библиотека, включающая 28 860 химических соединений из баз данных DrugBank, Zinc15 и Selleck Chemicals, которые находятся на разных стадиях биомедицинских испытаний или используются в клинической практике. Методами молекулярного моделирования проведена оценка аффинности связывания этих соединений с тримером HR1 S-белка SARS-CoV-2, который участвует в образовании 6-ти спирального пучка 6-НВ (six-helix bundle), инициирующего механизм слияния мембран вируса и клетки хозяина. В результате проведенных исследований идентифицированы 12 молекул, характеризующихся высоким химическим сродством к этому функционально важному участку оболочки вируса. Полученные данные свидетельствуют о перспективности использования этих соединений в работах по созданию новых противовирусных препаратов – ингибиторов слияния SARS-CoV-2, способных блокировать проникновение вируса в клетку хозяина.

**Ключевые слова:** SARS-CoV-2; белок S; тример HR1; ингибиторы слияния SARS-CoV-2; молекулярное моделирование; противовирусные препараты.

**VIRTUAL SCREENING OF POTENTIAL SARS-CoV-2 INHIBITORS  
AND PREDICTION OF THEIR BIOLOGICAL ACTIVITY  
BY MOLECULAR MODELING METHODS**

**A.M. Andrianov<sup>a</sup>, K.V. Furs<sup>b</sup>, A.M. Yushkevich<sup>b</sup>,  
A.V. Gonchar<sup>b</sup>, A.V. Tuzikov<sup>b</sup>**

<sup>a</sup>*Institute of Bioorganic Chemistry, National Academy of Sciences of Belarus, ac. Kuprevich  
str., 5/2, Surganov str., Minsk, Republic of Belarus*

<sup>b</sup>*United Institute of Informatics Problems, National Academy of Sciences of Belarus,  
Surganov str., 6, Minsk, Republic of Belarus*

To identify potential SARS-CoV-2 inhibitors, a virtual molecular library containing 28 860 chemical compounds from the DrugBank, Zinc15 and Selleck Chemicals databases that are at the stages of biomedical research or application in the clinic was formed. The binding affinity of these compounds to the HR1 trimer of the SARS-CoV-2 spike protein which is involved in the formation of the six-helix bundle (6-HB) critically important for the virus-cell membrane fusion was evaluated using molecular modeling tools. As a result, 12 molecules exhibiting a high binding affinity to this functionally important site of the viral envelope were identified. The data obtained indicate the promise of using these compounds in the development of novel antiviral drugs presenting the SARS-CoV-2 fusion inhibitors able to block the virus entry into the host cell.

**Keywords:** SARS-CoV-2; protein S; trimer HR1; SARS-CoV-2 fusion inhibitors; molecular modeling; antiviral drugs.

## **Введение**

Разработка ингибиторов коронавируса, блокирующих их репликацию на различных этапах жизненного цикла, зависит от выявления консервативных и функционально важных целевых сайтов, которые могут быть использованы в качестве перспективных мишеней для создания противовирусных препаратов широкого спектра действия. Шиповидный белок оболочки коронавируса человека SARS-CoV-2 – этиологического агента COVID-19 – является трансмембранным гликопротеином класса I и включает две субъединицы S1 и S2, играющие ключевую роль в распознавании рецепторов, связывании, слиянии мембран и последующем проникновении вирусного генома в клетку-мишень [1]. Взаимодействие рецептор-связывающего сайта в субъединице S1 с клеточным рецептором ACE2 (ангиотензинпревращающий фермент 2) вызывает структурные изменения в субъединице S2, приводящие к обнажению пептида слияния и его внедрению в клеточную мембрану. Затем три спирали HR1 связываются друг с другом, образуя внутренний тример с тремя открытыми гидрофобными бороздками. Взаимодействие тримера HR1 со спиралью домена HR2 приводит к формированию консервативного 6-ти спирального пучка 6-НВ (six-helix bundle), инициирующего сближение мембран вируса и клетки-мишени [1]. Необходимо отметить, что образование 6-НВ, главным образом опосредованное областями HR1 и HR2 субъединицы S2 белка S, является общим для всех известных коронавирусов, включая доминирующий в настоящее время “омикрон”-штамм SARS-CoV-2 [2]. В связи с этим, представляется крайне перспективной стратегия создания противовирусных агентов широкого спектра действия, способных предотвращать образование 6-ти спирального пучка 6-НВ, критического для слияния мембран и инфективности вируса.

В настоящей работе методами виртуального скрининга идентифицированы малые молекулы, потенциально активные по отношению к домену HR1 белка S коронавируса. Для этого были проведены исследования, которые включали: 1) формирование виртуальной молекулярной библиотеки, содержащей соединения, находящиеся на стадиях лабораторных исследований, клинических испытаний или использования в медицинской практике; 2) молекулярный докинг этих соединений с доменом HR1 белка S SARS-CoV-2; 3) оценку аффинности связывания комплексов лиганд/HR1 с использованием оценочных функций AutoDock Vina (<https://vina.scripps.edu>), RF-Score-4 (<https://pjballester.wordpress.com/software/>) и NNScore 2.0 (<https://git.durrantlab.pitt.edu/jdurrant/nnscore2>) с последующим расчетом экспоненциального консенсусного ранга [3]; 4) молекулярную динамику (МД) комплексов лиганд/HR1 и отбор соединений, перспективных для тестирования на противовирусную активность.

## 1. Материалы и методы

При формировании библиотеки биологически активных молекул учитывали следующие критерии: свободный академический доступ к данным, наличие структур соединений в формате файлов химических данных SDF (Structure Data File) (<https://www.fda.gov/media/151718/download>), активная поддержка баз данных и наличие информации о возможности синтеза и покупки молекулы. В соответствии с этими критериями были выбраны базы данных DrugBank (<https://go.drugbank.com/>), ZINC15 (<https://zinc.docking.org/>) и Selleck Chemicals (<https://www.selleckchem.com/>). В результате собранная виртуальная библиотека включала 28 806 соединений, потенциальную активность которых по отношению к домену HR1 SARS-CoV-2 оценивали методами молекулярного докинга.

Подготовку соединений для молекулярного докинга осуществляли с помощью программного пакета MGLTools (<https://ccsb.scripps.edu/mgltools/>). Докинг проводили с использованием программы AutoDock Vina (<https://vina.scripps.edu>) в приближении жесткого рецептора и гибких лигандов. Структуру домена HR1 выделяли из его комплекса с доменом HR2 белка S SARS-CoV-2 в кристалле (PDB ID: 6LXT). Ячейка для докинга охватывала область белка S, которая включала сайт связывания пептида EK1 с доменом HR1 и имела следующие параметры:  $\Delta X = 16,18 \text{ \AA}$ ,  $\Delta Y = 13,62 \text{ \AA}$ ,  $\Delta Z = 38,82 \text{ \AA}$  с центром в точках  $X = -3,97 \text{ \AA}$ ,  $Y = 1,81 \text{ \AA}$ ,  $Z = -25,89 \text{ \AA}$ . Параметр, характеризующий полноту

поиска (охват конформационного пространства), был задан равным 100 (<https://vina.scripps.edu>).

Молекулярную динамику комплексов лиганд/HR1 в воде выполняли в программном пакете Amber18 с использованием силовых полей Amber ff14SB (домен HR1) и GAFF (лиганды) (<https://ambermd.org/doc12/Amber18.pdf>). Для задания парциальных зарядов атомов (модель AM1-BCC) использовали модуль Antechamber программного пакета AmberTools18 (<https://ambermd.org/doc12/Amber18.pdf>). Атомы водорода добавляли с помощью программы tleap пакета AmberTools18. Комплексы помещали в кубическую коробку, заполняли растворителем (модель воды TIP3P; <https://ambermd.org/doc12/Amber18.pdf>) и добавляли ионы Na<sup>+</sup> и Cl<sup>-</sup> до значения ионной силы, равного 0,15 М. Систему минимизировали методами наискорейшего спуска (500 шагов) и сопряженных градиентов (500 шагов), нагревали от 0 К до 300 К в течение 50 *ps* в рамках статистического ансамбля NVT и термостата Ланжевена, а затем уравнивали в течение 50 *ps* и давлении 1,0 атм (ансамбль NPT, баростат Берендсена). На заключительном шаге систему уравнивали в течение 0,5 *ps* при постоянном объеме и проводили молекулярную динамику длительностью 150 *ns* в изобарно-изотермических условиях при температуре 300 К и давлении 1 атм.

## 2. Результаты и обсуждение

В результате анализа полученных данных были идентифицированы 12 соединений, лучших по значению экспоненциального консенсусного ранга и проявляющих высокое сродство к домену HR1 S-белка SARS-CoV-2. Поэтому эти соединения были отобраны в качестве наиболее перспективных кандидатов для разработки эффективных ингибиторов слияния коронавируса.

Исследование статических моделей комплексов лиганд/HR1 (рис.) показывает, что все идентифицированные соединения связываются с гидрофобной бороздкой между спиралью тримера и образуют широкую сеть межмолекулярных взаимодействий, включающую многочисленные ван-дер-ваальсовы контакты, водородные связи и катион-π взаимодействия. При этом доминирующую роль в стабилизации структурных комплексов домена HR1 SARS-CoV-2 с лигандами играют ван-дер-ваальсовы взаимодействия, в которые вовлечены остатки, важные для образования 6-ти спирального пучка 6-НВ. Эффективность межмолекулярных взаимодей-

ствий обнаруженных соединений с доменом HR1 SARS-CoV-2 подтверждают низкие значения свободной энергии связывания, свидетельствующие о высоком химическом сродстве этих лигандов к молекулярной мишени.

Данные молекулярной динамики согласуются с основными выводами, сделанными на основе анализа статических моделей комплексов лиганд/HR1. Эти комплексы относительно стабильны в течение МД расчетов, на что указывают средние значения свободной энергии связывания и соответствующие им стандартные отклонения (табл.). Вывод о стабильности динамических структур лиганд/HR1 подтверждают также данные о временных зависимостях свободной энергии связывания, свидетельствующие об отсутствии тенденции к увеличению значений  $\Delta G$  с течением времени. Более того, комплексы соединений I–IV и VIII с доменом HR1 демонстрируют снижение средних значений энергии связывания на заключительных участках МД траекторий длительностью 50 *нс*, что является дополнительным свидетельством их конформационной стабильности.

### **Заключение**

Таким образом, данные об аффинности связывания предсказанных соединений с тримером HR1, полученные с использованием разных оценочных функций, согласуются друг с другом, свидетельствуя о том, что вычислительный подход, примененный в данном исследовании, позволил избежать ложноположительных результатов и правильно оценить силу межмолекулярных взаимодействий.

В целом эти результаты обеспечивают убедительные доказательства того, что идентифицированные молекулы демонстрируют низкие значения свободной энергии связывания в комплексах с доменом HR1 и могут быть использованы в работах по созданию новых противовирусных препаратов – ингибиторов слияния SARS-CoV-2, блокирующих проникновение вируса в клетку хозяина.

Примечание:  $\langle \Delta H \rangle$  и  $\langle T\Delta S \rangle$  – соответственно средние значения энтальпийной и энтропийной составляющих свободной энергии;  $(\Delta H)_{STD}$  и  $(T\Delta S)_{STD}$  – соответствующие этим значениям стандартные отклонения.

Работа поддержана Белорусским республиканским фондом фундаментальных исследований (проект X21COVID-003).

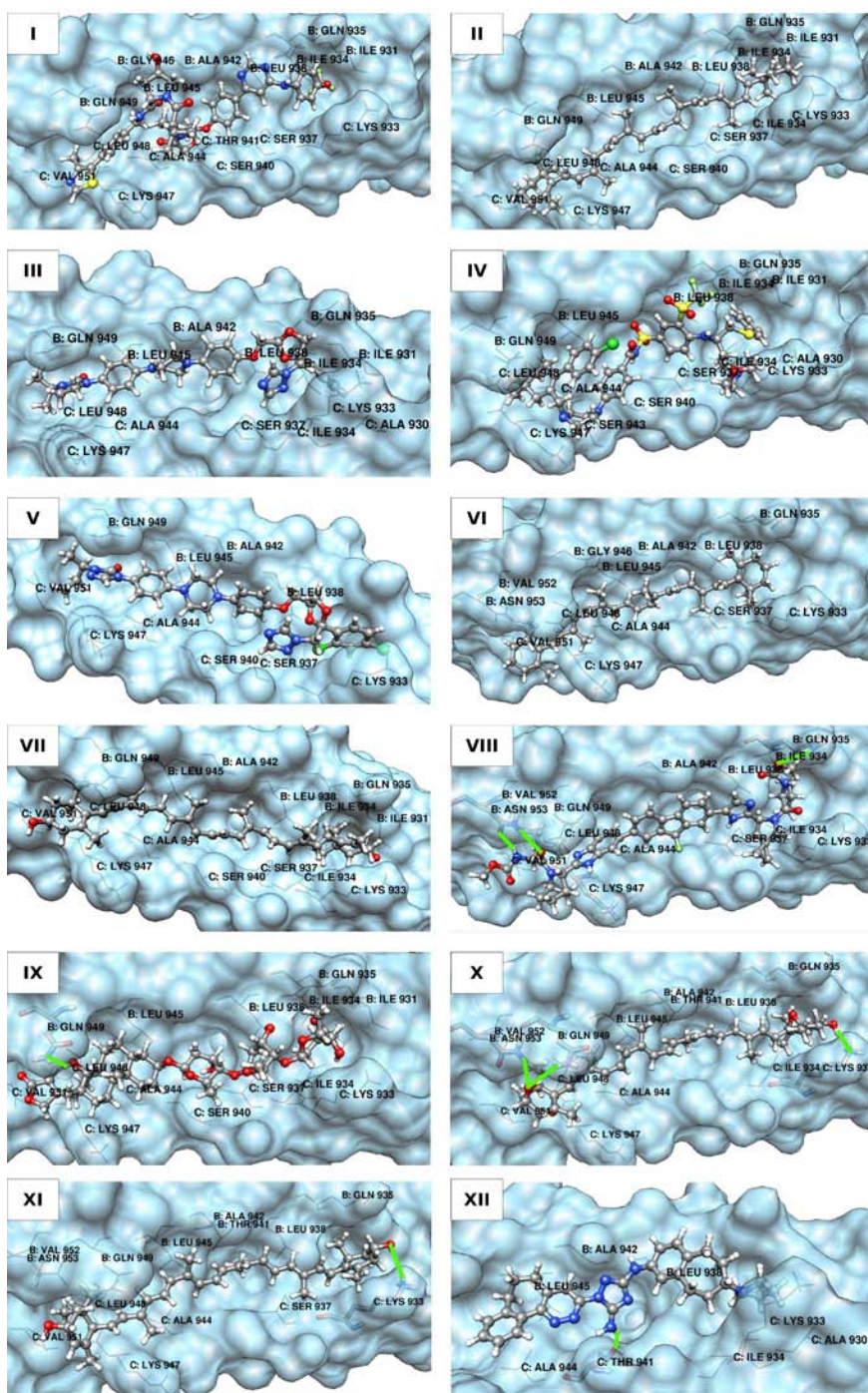


Рис. Структурные комплексы идентифицированных соединений с тримером HR1 S-белка SARS-CoV-2, построенные методом молекулярного докинга. Соединения представлены моделью “шарик-палочка”. Остатки HR1, образующие межатомные контакты с лигандами, указаны вместе с обозначениями соответствующих спиралей В и С в рентгеновской структуре тримера HR1 (PDB ID: 6LXT). Остатки HR1, участвующие в водородных связях, обозначены палочковой моделью. Водородные связи показаны сплошными зелеными линиями. Проволочная модель использована для обозначения остатков HR1, образующих ван-дер-ваальсовы контакты.

Таблица. Средние значения свободной энергии связывания  $\langle \Delta G \rangle$  и соответствующие им стандартные отклонения  $\Delta G_{\text{STD}}$ , рассчитанные для динамических моделей комплексов лиганд/HR1.

| Лиганд | $\langle \Delta H \rangle$ ,<br>ккал/моль | $\Delta H_{\text{STD}}$ ,<br>ккал/моль | $\langle T\Delta S \rangle$ ,<br>ккал/моль | $(T\Delta S)_{\text{STD}}$ ,<br>ккал/моль | $\langle \Delta G \rangle$ ,<br>ккал/моль | $\Delta G_{\text{STD}}$ ,<br>ккал/моль |
|--------|---|--|--|---|---|--|
| I      | -39,36                                    | 4,40                                   | -28,30                                     | 4,25                                      | -12,98                                    | 4,23                                   |
| II     | -42,42                                    | 3,35                                   | -28,93                                     | 2,74                                      | -13,61                                    | 4,15                                   |
| III    | -37,35                                    | 5,10                                   | -26,93                                     | 2,58                                      | -10,80                                    | 5,43                                   |
| IV     | -36,22                                    | 5,99                                   | -26,85                                     | 3,23                                      | -9,25                                     | 6,68                                   |
| V      | -41,40                                    | 4,26                                   | -28,42                                     | 2,83                                      | -12,95                                    | 4,55                                   |
| VI     | -42,00                                    | 3,47                                   | -29,65                                     | 3,34                                      | -12,37                                    | 4,48                                   |
| VII    | -43,45                                    | 3,79                                   | -30,73                                     | 3,21                                      | -12,76                                    | 4,11                                   |
| VIII   | -36,50                                    | 5,56                                   | -26,84                                     | 2,98                                      | -9,44                                     | 5,14                                   |
| IX     | -41,55                                    | 4,94                                   | -29,65                                     | 3,28                                      | -11,47                                    | 4,67                                   |
| X      | -41,64                                    | 4,35                                   | -30,47                                     | 3,19                                      | -10,21                                    | 5,09                                   |
| XI     | -42,26                                    | 3,59                                   | -30,75                                     | 3,14                                      | -11,75                                    | 4,69                                   |
| XII    | -33,65                                    | 3,36                                   | -23,88                                     | 2,72                                      | -9,49                                     | 4,24                                   |

### Библиографические ссылки

1. Wang X., Xia S., Zhu Y., Lu L., Jiang S. Pan-Coronavirus Fusion Inhibitors as the Hope for Today and Tomorrow // Protein Cell. 2021. № 12(2). P. 84–88.
2. Xia S., Chan J. F.-W., Wang L, Jiao F., Chik K. K.-H., Chu H., Lan Q., Xu W., Wang Q., Wang C., Yuen K.-Y., Lu L., Jiang S. Peptide-Based Pan-CoV Fusion Inhibitors Maintain High Potency Against SARS-CoV-2 Omicron Variant // Cell Res. 2022. P. 1–3. doi.org/10.1038/s41422-022-00617-x.
3. Palacio-Rodríguez K., Lans I., Cavasotto C. N., Cossio P. Exponential Consensus Ranking Improves the Outcome in Docking and Receptor Ensemble Docking // Sci. Rep. 2019. № 9 (1). P. 1–14.



## **БИОИНФОРМАТИЧЕСКИЙ ПАЙПЛАЙН ПО ИДЕНТИФИКАЦИИ ПЕПТИДОВ, ПРИГОДНЫХ ДЛЯ CAR-T ТЕРАПИИ ЛЕЙКОЗОВ**

**В.В. Гринев, И.Н. Ильюшёнко, В.А. Сучек, Е.В. Гузова**

*Белорусский государственный университет, Кафедра генетики, биологический факультет, пр. Независимости, д. 4, 220050, г. Минск, Беларусь, grinev\_vv@bsu.by*

Статья описывает разработку многокомпонентного пайплайна, нацеленного на идентификацию иммуногенных пептидов, пригодных для CAR-T терапии лейкозов человека. Принцип идентификации основан на реконструкции аномальных открытых рамок считывания мРНК из данных RNA-Seq. Поиск пептидов осуществляется либо через сборку транскриптома, либо на основе уже имеющегося эталонного набора транскриптов. Пайплайн сфокусирован на пептидах, которые образуются за счёт альтернативного сплайсинга нормальных генов, а не за счёт нарушения последовательности генов.

**Ключевые слова:** лейкозные клетки; биоинформатика; альтернативный сплайсинг РНК; иммуногенные пептиды; CAR-T терапия.

## **BIOINFORMATICS PIPELINE FOR IDENTIFICATION OF IMMUNOGENIC PEPTIDES SUITABLE FOR CAR-T THERAPY OF LEUKEMIA**

**V.V. Grinev, I.M. Ilyushonak, V.A. Suchok, K.V. Huzava**

*Department of Genetics, the Faculty of Biology, Belarusian State University, Nezavisimosti Avenue-4, 220050, Minsk, Belarus.*

Corresponding author: grinev\_vv@bsu.by

The work describes the development of a multicomponent pipeline aimed at identifying immunogenic peptides suitable for CAR-T therapy of human leukemia. A principle of identification is based on reconstruction of abnormal open reading frames in mRNAs, captured by RNA-Seq. Searching of peptides can be performed by transcriptome assembly or with using a reference set of known RNAs. Our approach focused on peptides, derived from alternatively spliced RNAs of normal genes, nor mutated sequences of genes.

**Keywords:** leukemic cells; bioinformatics; alternative RNA splicing; immunogenic peptides; CAR-T therapy.

### **Введение**

Экспертное сравнение новых методов лечения лейкозов, которые в настоящее время проходят клинические испытания или уже одобрены для применения, показывает, что одним из наиболее перспективных подходов считается CAR-T терапия. Инструментом такой терапии являются генети-

чески модифицированные аллогенные или аутологичные цитотоксические Т-лимфоциты, экспрессирующие химерные антигенные рецепторы (CAR, от англ. Chimeric Antigen Receptor) [1].

В качестве молекулярной мишени, присутствующей на поверхности лейкозных клеток, модифицированные Т-лимфоциты могут распознавать как опухоль-ассоциированные, так и опухоль-специфические антигены. Предпочтительным является второй класс антигенов, которые появляются в результате мутирования нормальных генов. Однако разнообразие таких антигенов, равно как и их иммуногенность, ограничены.

В то же время хорошо известно, что существенным источником разнообразия протеома клеток человека является альтернативный сплайсинг. Более того, известно, что протекание сплайсинга в лейкозных клетках нарушено, а также изменена функциональная активность систем контроля качества получаемых молекул РНК. По нашему мнению, все эти изменения в системах, обеспечивающих формирование транскрипта лейкозных клеток, могут приводить к появлению новых аминокислотных последовательностей, в том числе с высокой иммуногенностью. В связи с этим мы задались целью разработать биоинформатический пайплайн для идентификации потенциально иммуногенных пептидов, появляющихся в лейкозных клетках из-за изменений в работе системы сплайсинга РНК.

## 1. Методология исследования

Основные этапы пайплайна, нацеленного на идентификацию в клетках острого миелоидного лейкоза потенциально иммуногенных пептидов, представлены на рисунке 1. Пайплайн объединил два подхода в достижении поставленной цели. Первый подход предусматривает реконструкцию открытых рамок считывания (ORFs, от англ. Open Reading Frames) в транскриптах, подвергшихся альтернативному сплайсингу, на основе эталонных аннотаций транскриптома человека и информации о фазах кодонов в мультиэкзонных генах, кодирующих белки. В этом подходе учитываются все типы альтернативного сплайсинга, идентифицируемые в изучаемых лейкозных клетках, в том числе сохранение интронов.

Альтернативный подход основан на сборке транскриптома целевых клеток. Сборка ведется без опоры (*de novo*) и с опорой на эталонный геном. В каждом из этих случаев реконструированные молекулы РНК классифицируются на некодирующие и кодирующие, после чего в последних определяются координаты ORFs и их сиквенсы.

Из представленного описания и рисунка 1 видно, что конечным результатом применения любого из выше указанных подходов является список и сиквенсы ORFs, идентифицированных в транскриптом изучаемых

мых клеток. В дальнейшем сиквенсы этих ORFs подвергаются трансляции *in silico*, а полученные белки валидируются биоинформатически (относительно баз данных с известными белками человека) и экспериментально (по данным протеомного анализа). На последнем этапе каждый из идентифицированных белков проходит биоинформатическую проверку в качестве потенциального источника иммуногенных пептидов.

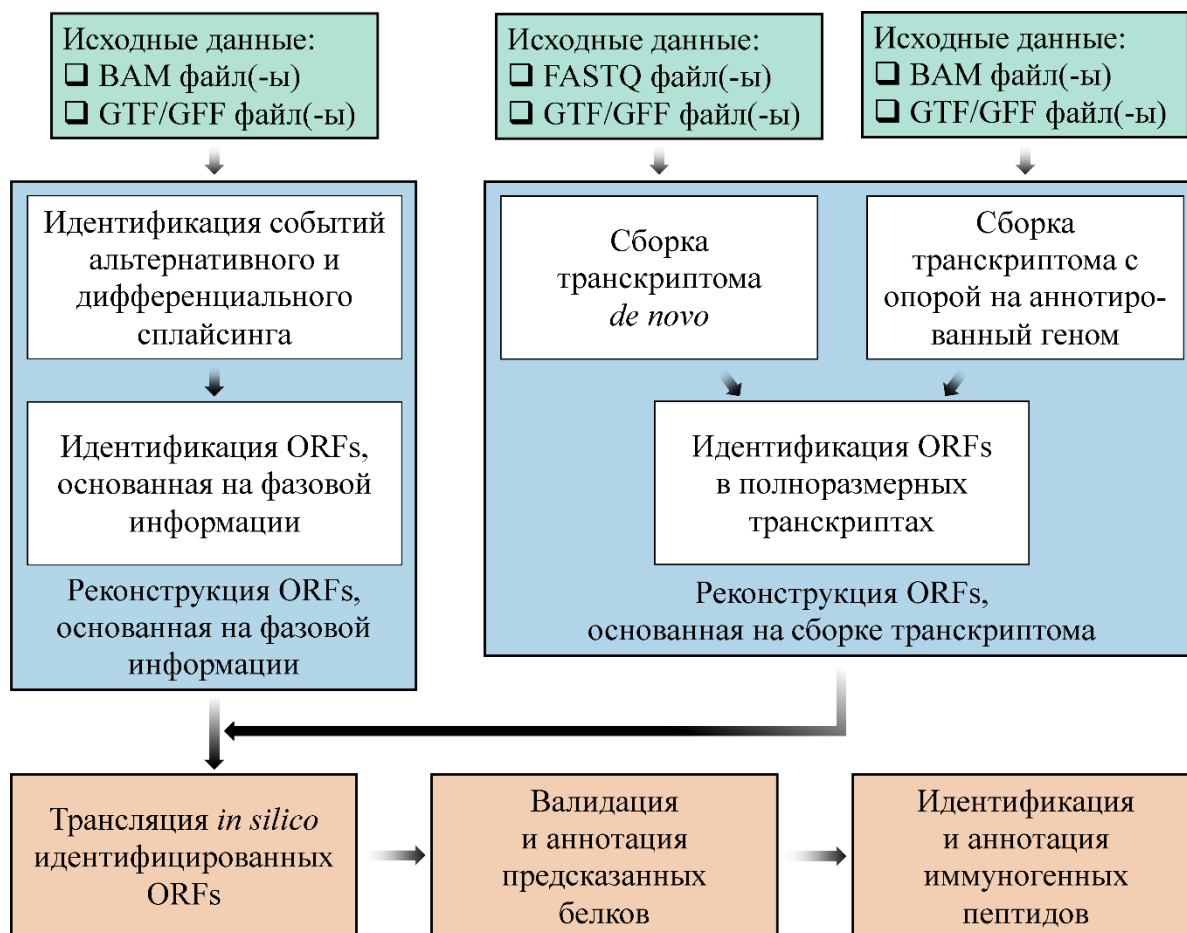


Рисунок 1 – Основные этапы пайплайна по идентификации иммуногенных пептидов лейкозных клеток человека

## 2. Результаты и их обсуждение

Ключевым компонентом нашего пайплайна является идентификация всех ORFs в транскриптоме изучаемых клеток. В контексте решения такой задачи прямой подход, основанный на использовании информации о фазах кодонов, имеет ряд преимуществ. Одно из таких преимуществ – высокая чувствительность детекции альтернативных событий сплайсинга. Так, опубликованная нами ранее [2] методология прямого обнаружения сохраняемых интронов в данных RNA-Seq на порядок чувствительнее,

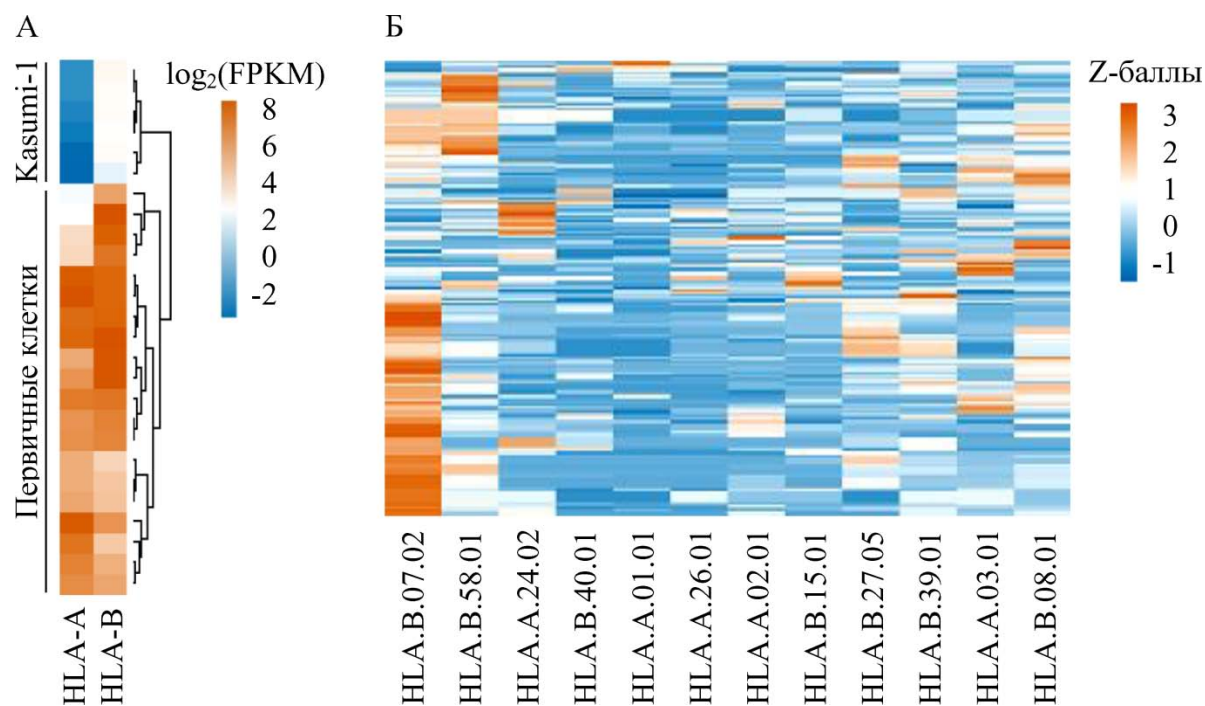
чем обнаружение таких же событий сплайсинга, но через сборку транскриптома. Дальнейшее «встраивание» интронов, классифицированных как сохраненные, в фазовый контекст аннотированных ORFs и позволяет реконструировать новые нуклеотидные последовательности, кодирующие белки. В то же время такой подход имеет и свои недостатки. В частности, текущий уровень наших знаний о детерминации сплайсинга не позволяет, основываясь только на эталонных аннотациях и информации об обнаруженном альтернативном событии сплайсинга, надежно реконструировать весь транскрипт. Следовательно, и реконструкция аминокислотной последовательности также будет носить локальный характер.

Второй подход в идентификации ORFs в лейкозных клетках основан на сборке всего транскриптома. Поскольку в постнатальный период иммуногенными могут быть только новые пептиды, то мы сосредоточились на тех транскриптомных сборщиках, которые позволяют собирать не только известные, но и новые транскрипты. Для этого мы воспользовались хорошо зарекомендовавшими себя сборщиками Cufflinks и StringTie. Оба сборщика работают с картированными ридами и эталонным геномом. Это, с одной стороны, повышает надежность сборки, но, с другой стороны, ограничивает репертуар обнаруживаемых новых транскриптов. Поэтому в качестве дальнейшей альтернативы мы рассматриваем использование сборщиков типа Trinity, которые реконструируют транскриптом *de novo*, напрямую из исходных некартированных ридов.

Помимо выбора сборщика транскриптома критически важным компонентом второго подхода является алгоритм классификации собранных транскриптов на некодирующие и кодирующие и обнаружения истинных ORFs в последнем классе транскриптов. Этому вопросу мы уделили особое внимание и разработали программный пакет ORFhunteR. Этот пакет использует векторизацию признаков транскриптов и мета-классификатор по типу случайного леса деревьев принятия решения для надежного определения координат ORFs в молекулах мРНК [4]. В настоящее время пакет ORFhunteR интегрирован с пайплайном по идентификации новых пептидов в лейкозных клетках.

На этапе валидации с помощью биоинформатического анализа проводился поиск тех белков (или их фрагментов), которые не имеют гомологии или же имеют низкую гомологию с известными белками человека. Этот анализ реализовывался с помощью стандартных инструментов выравнивания BLAST и белковых баз данных. Дальнейшая проверка реальной экспрессии белков в изучаемых клетках проводилась с помощью данных протеомного анализа. Количество обнаруживаемых нами таким способом белков варьировало в зависимости от типа изучаемых клеток и ме-

тогда реконструкции/обнаружения ORFs. Так, в клетках линии Kasumi-1 при сборке транскриптома с помощью Cufflinks обнаруживается 207 потенциально новых полипептидных последовательностей.



А) Экспрессия антигенов HLA класса I в положительных по транслокации t(8;21)(q22;q22) клетках модельной линии Kasumi-1, а также первичных клетках пациентов с острым миелоидным лейкозом.

Б) Теплокарта аффинности связывания пептидов новых белков с антигенами HLA класса I.

Рисунок 2 – Идентификация иммуногенных пептидов в протеоме лейкозных клеток человека.

Наконец, на последнем этапе проводилось моделирование взаимодействия пептидов, высвобождаемых из идентифицированных белков, с антигенами HLA класса I. Интересно, что эти антигены экспрессируются на разных уровнях в клетках перевиваемых лейкозных линий и первичных клетках, выделенных из красного костного мозга или периферической крови больных лейкозами (рисунок 2А). В нашем пайплайне аффинность связывания пептидов с антигенами HLA класса I рассчитывается с помощью алгоритма NetMHCpan. Этот алгоритм позволяет фрагментировать белок на пептиды длиной от 8 до 14 аминокислот и оценить их взаимодействие с 10386 аллелями антигенов HLA.A, HLA.B, HLA.C, HLA.D, HLA.E и HLA.G. Как видно на рисунке 2Б, часть из обнаруженных белков, не имеющих гомологии или же с низкой гомологией к известным

белкам человека, содержат пептиды, которые с высокой аффинностью связываются с некоторыми аллелями антигенов HLA класса I. Эти пептиды можно рассматривать как потенциально иммуногенные мишени для антигенных рецепторов CAR T-клеток.

Таким образом, нами разработан прототип биоинформатического пайплайна, нацеленного на поиск потенциально иммуногенных пептидов, пригодных для CAR-T терапии лейкозов человека. Инновационным в нашем пайплайне является поиск пептидов не среди мутантных белков, а среди белков, образующихся в результате aberrantного сплайсинга, в частности, идущего с включением в зрелые молекулы РНК интронов, кодирующих совершенно новые аминокислотные последовательности. Дальнейшее развитие этого пайплайна будет нацелено на включение дополнительных методов идентификации ORFs, а также биоинформатическую кросс-валидацию и экспериментальную валидацию иммуногенности обнаруживаемых пептидов.

### Библиографические ссылки

1. Larson R.C., Maus M.V. Recent advances and discoveries in the mechanisms and functions of CAR T cells // *Nature Reviews Cancer*. 2021. № 21(3). P. 145–161. DOI: 10.1038/s41568-020-00323-z.
2. Grinev V.V., Barneh F., Ilyushonak I.M., Nakjang S., Smink J., van Oort A., Clough R., Seyani M., McNeill H., Reza M., Martinez-Soria N., Assi S.A., Ramanouskaya T.V., Bonifer C., Heidenreich O. RUNX1/RUNX1T1 mediates alternative splicing and reorganises the transcriptional landscape in leukemia // *Nature Communications*. 2021. № 12(1). P. 520. DOI: 10.1038/s41467-020-20848-z.
3. Pertea M., Pertea G.M., Antonescu C.M., Chang T.C., Mendell J.T., Salzberg S.L. StringTie enables improved reconstruction of a transcriptome from RNA-seq reads // *Nature Biotechnology*. 2015. № 33(3). P. 290–295. DOI: 10.1038/nbt.3122.
4. Grinev V.V., Yatskou M.M., Skakun V.V., Chepeleva M.K., Nazarov P.V. ORFhunteR: an accurate approach for the automatic identification and annotation of open reading frames in human mRNA molecules // *Software Impacts*. 2022. № 12. P. 1–4. DOI: 10.1016/j.simpa.2022.100268.

**РАЗРАБОТКА ГЕНЕРАТИВНОЙ МОДЕЛИ ГЕТЕРОЭНКОДЕРА  
ДЛЯ КОМПЬЮТЕРНОГО ДИЗАЙНА НОВЫХ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ  
МУЛЬТИТАРГЕТНЫХ ИНГИБИТОРОВ BCR-ABL  
ТИРОЗИНАЗЫ**

**А.Д. Карпенко<sup>1</sup>, Т.Д. Войтко<sup>2</sup>, А.В. Тузиков<sup>1</sup>, А.М. Андрианов<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>*Объединенный институт проблем информатики, Национальная академия наук  
Беларуси, 220012, ул. Сурганова, 6, Минск, Республика Беларусь,  
tuzikov@newman.bas-net.by*

<sup>2</sup>*Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030,  
г. Минск, Республика Беларусь, timvaitko@gmail.com*

<sup>3</sup>*Институт биоорганической химии, Национальная академия наук Беларуси,  
ул. ак. Купревича, 5/2, 220141, г. Минск, Беларусь, alexande.andriano@yandex.ru*

Разработана генеративная модель гетероэнкодера для компьютерного дизайна потенциальных мультитаргетных ингибиторов Bcr-Abl тирозинкиназы – фермента, активность которого является патофизиологической причиной хронического миелоидного лейкоза. Проведено обучение и тестирование нейронной сети на наборе химических соединений, которые содержат 2-ариламинопиримидиновый фрагмент, присутствующий в качестве основного фармакофора в структурах многих низкомолекулярных ингибиторов протеинкиназ. Показано, что разработанная нейронная сеть позволяет генерировать новые химические соединения с заданной биологической активностью против Bcr-Abl тирозинкиназы и ее мутантной формы Bcr-Abl<sup>T315I</sup>.

**Ключевые слова:** Методы машинного обучения; глубокое обучение; генеративные нейронные сети; гетероэнкодеры; BCR-ABL тирозинкиназа; виртуальный скрининг; молекулярный докинг; противоопухолевые препараты; хронический миелоидный лейкоз.

**DEVELOPMENT OF A GENERATIVE HETEROENCODER MODEL  
FOR COMPUTER-AIDED DESIGN OF NOVEL POTENTIAL  
MULTI-TARGET BCR-ABL TYROSINE KINASE INHIBITORS**

**A.D. Karpenko<sup>a</sup>, T.D. Vaitko<sup>b</sup>, A.V. Tuzikov<sup>a</sup>, A.M. Andrianov<sup>c</sup>**

<sup>a</sup>*United Institute of Informatics Problems, National Academy of Sciences of Belarus,  
Surganov str., 6, Minsk, Republic of Belarus*

<sup>b</sup>*Belarussian State University, Minsk, Republic of Belarus, av. Nezavisimosti 4,  
Minsk, Republic of Belarus*

<sup>c</sup>*Institute of Bioorganic Chemistry, National Academy of Sciences of Belarus,  
ac. Kuprevich str., 5/2, Surganov str., Minsk, Republic of Belarus,  
alexande.andriano@yandex.ru*

A generative heteroencoder has been developed for computer-aided design of potential multitarget inhibitors of Bcr-Abl tyrosine kinase, an enzyme whose activity is the pathophysiological cause of chronic myeloid leukemia. The neural network was trained and tested on a set of chemical compounds that contain a 2-arylamino-pyrimidine fragment presenting as a main pharmacophore in the structures of many small-molecule protein kinase inhibitors. It has been shown that the developed neural network makes it possible to generate new chemical compounds with a given biological activity against the Bcr-Abl tyrosine kinase and its mutant form Bcr-Abl<sup>T315I</sup>.

**Keywords:** Machine learning methods; deep learning; generative neural networks; heteroencoders; BCR-ABL tyrosine kinase; virtual screening; molecular docking; antitumor drugs; chronic myeloid leukemia.

## Введение

В настоящее время методы машинного обучения получили существенное развитие и используются для решения многих задач, связанных с разными областями науки и техники. Применение этих методов в био- и хемоинформатике, а также в медицинской химии позволило ускорить процесс создания новых лекарственных препаратов и повысить эффективность программ фармацевтических исследований [1]. Разработка эффективных алгоритмов глубокого обучения дала толчок к развитию нового направления исследований, ориентированного на генерацию молекул с заданными фармакологическими свойствами [1]. На сегодняшний день предложено большое число генеративных моделей глубокого обучения с разными видами архитектур и типами входных данных. Однако их потенциал все ещё очень велик и его дальнейшее использование представляет большой научный и практический интерес.

Исследования фундаментальных молекулярных механизмов, лежащих в основе передачи сигналов опухолевых клеток, выяснили решающую роль протеинкиназ в канцерогенезе, поскольку в тех случаях, когда эти ферменты чрезмерно экспрессированы или активны, они способствуют пролиферации клеток [2]. Исследования мутаций генома киназ показали, что генетически наследуемые варианты специфических киназ причинно связаны с возникновением, развитием, прогрессированием и рецидивом рака [2]. Первый ингибитор протеинкиназ иматиниб специфически связывается с Bcr-Abl тирозинкиназой, активность которой является патологической причиной хронического миелоидного лейкоза (ХМЛ) [2]. Кроме иматиниба, в настоящее время для терапии ХМЛ используется несколько ингибиторов Bcr-Abl тирозинкиназы, среди которых следует в первую очередь отметить такие препараты, как нилотиниб, понатиниб, дазатиниб и бозутиниб [2]. Однако все эти соединения проявляют высокую токсичность. Кроме того, у большинства пациентов возникает резистент-



ность к применяемым препаратам, приобретаемая после длительной химиотерапии. В частности, резистентность к иматинибу, возникающая на поздних стадиях лечения ХМЛ, обусловлена мутацией T315I в гене Abl [2]. В связи с этим актуальным является поиск новых мультитаргетных ингибиторов Vcr-Abl тирозинкиназы, способных блокировать АТФ-связывающие сайты нативного и мутантного фермента, снижающих риск возможного возникновения резистентности к используемым препаратам и обладающих приемлемой токсичностью.

Цель исследования:

Разработать генеративную модель гетероэнкодера для конструирования новых потенциальных ингибиторов Vcr-Abl киназы и ее мутантной формы Vcr-Abl<sup>T315I</sup>, резистентной к ряду противоопухолевых препаратов, используемых в клинической практике для терапии ХМЛ.

Задачи исследования:

- 1) разработка архитектуры гетероэнкодера;
- 2) формирование обучающей библиотеки малых молекул, содержащих 2-ариламинопиримидиновый компонент, присутствующий в качестве основного фармакофора в структурах многих низкомолекулярных ингибиторов протеинкиназ;
- 3) обучение и тестирование нейронной сети на наборе соединений из сформированной молекулярной библиотеки;
- 4) оценка результатов работы гетероэнкодера.

## 1. Материалы и методы

**Модель гетероэнкодера.** Разработанная нейронная сеть базируется на классической архитектуре гетероэнкодера – автоэнкодера, предназначенного для решения задач, в которых входные данные представлены в нескольких разных форматах [3]. В настоящей работе нами реализована архитектура модели гетероэнкодера с тремя энкодерами и двумя декодерами, которая использует открытую библиотеку Keras (<https://keras.io>), обеспечивающую работу с искусственными нейронными сетями (рис. 1). В этой модели входные данные задаются в форматах SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry System), канонический SMILES и вектора характеристик молекулы (рис. 1). С учетом специфики входных данных были разработаны две подмодели: в качестве энкодеров для SMILES-формата и канонического SMILES была выбрана архитектура, состоящая из двух слоев LSTM (Long Short-Term Memory). Входные данные обрабатываются двумя слоями LSTM, и полученные эмбединги для строкового формата передаются на полносвязный слой (dense encoder) нейронной сети (рис. 1).

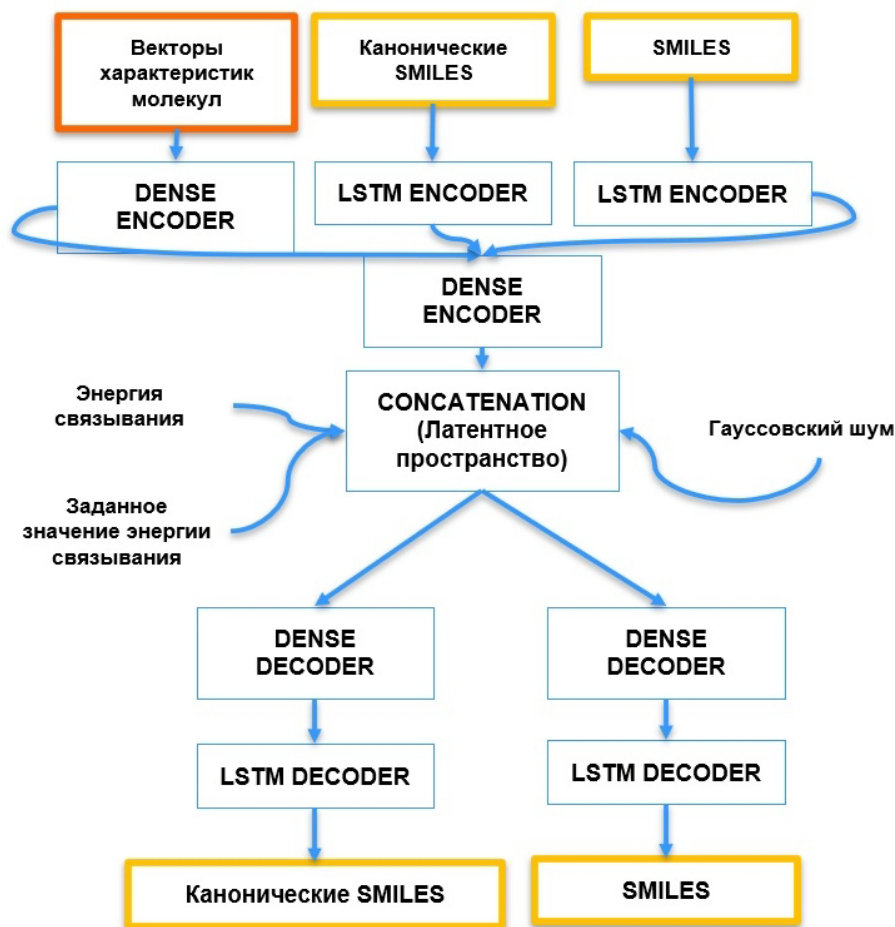


Рисунок 1 – Архитектура разработанной модели гетероэнкодера

Числовые характеристики молекул обрабатываются полносвязной нейронной сетью прямого распространения, состоящей из двух полносвязных слоев, слоя батч-нормализации и дополнительного полносвязного слоя, результаты работы которого являются эмбедингами для числовых признаков. Эти эмбединги попадают на конкатенирующий слой, где образуют один вектор, который нормализуется на слое батч-нормализации и передается на полносвязный слой, после чего задается желаемое значение энергии связывания молекулы с терапевтической мишенью. Результаты работы этого слоя, то есть обработанные эмбединги и величина энергии связывания, образуют латентное пространство (рис. 1). Полученные элементы латентного пространства подаются на декодеры, обрабатываются одним слоем декодера и одним слоем LSTM и поступают на полносвязные слои с функцией активации softmax, которая обрабатывает данные таким образом, чтобы получить на выходе вероятности следующих символов. Для всех остальных полносвязных

слоев используется функция активации ReLU, а для слоев LSTM – функция tanh.

**Подготовка входных данных.** Для формирования обучающей молекулярной библиотеки из базы данных DrugBank (<https://go.drugbank.com/>) были отобраны 120 000 соединений, содержащих ариламинопиримидиновый фрагмент. Химические структуры этих соединений преобразовывали в представления SMILES и канонический SMILES, и полученные молекулярные дескрипторы интегрировали в библиотеку для обучения гетероэнкодера. Затем методом молекулярного докинга (программа AutoDock Vina; <https://vina.scripps.edu>) генерировали комплексы соединений со структурой Vcr-Abl тирозинкиназы в кристалле (<https://www.rcsb.org>; PDB ID: 3OXZ) и рассчитывали значения свободной энергии связывания. Молекулярный докинг проводили в приближении жесткого рецептора и гибких лигандов. Ячейки для докинга охватывали АТФ-связывающий сайт Vcr-Abl тирозинкиназы. Значение параметра, характеризующего полноту поиска, задавали равным 100 (<https://vina.scripps.edu>). Подготовленная обучающая библиотека объемом в 120 000 соединений и соответствующие им значения свободной энергии связывания сформировали набор данных для обучения и тестирования нейронной сети.

Молекулярная библиотека была разделена на тренировочный и валидационный наборы в пропорции 80% и 20 % соответственно от общего числа соединений.

**Обучение гетероэнкодера.** Модель гетероэнкодера включала 784 537 параметров (весов), из которых 781 369 параметров использовали для ее обучения. В процессе обучения применяли дифференцируемую неотрицательную функцию ошибки – категориальную кросс-энтропию – и функцию CustomChemLoss(CCL), которая учитывала специфику входных данных. Эта функция налагала штрафы за отсутствие в декодированной молекуле 2-ариламинопиримидина и нарушения ее стереохимии. Обучение модели проводили на 25 эпохах с размером подвыборки, включавшей 256 соединений. В качестве оптимизатора использовали метод стохастической оптимизации градиентного спуска – метод Адама – с начальным значением скорости обучения 0,005.

**Генерация соединений и их анализ.** Разработанную модель гетероэнкодера использовали для генерации широкого набора высокоаффинных лигандов Vcr-Abl тирозинкиназы с целью последующей идентификации потенциальных мультитаргетных ингибиторов этого фермента методами молекулярного докинга. В результате работы гетероэнкодера были получены линейные представления SMILES и канонических SMILES для 1 117 молекул, которые очищали от дубликатов, проверяли на валидность,

интерпретируемость и содержание 2-ариламинопиримидина с помощью модуля RDKit (<http://www.rdkit.org/>) и преобразовывали из представлений SMILES в химические структуры. На заключительном этапе с помощью программы AutoDock Vina (<https://vina.scripps.edu>) проводили молекулярный докинг 1 083 успешно прошедших проверку соединений с рентгеновскими структурами Vcr-Abl тирозинкиназы (PDB ID: 3OXZ; <https://www.rcsb.org>) и ее мутантной формы Vcr-Abl<sup>T315I</sup> (PDB ID: 3OY3; <https://www.rcsb.org>). Молекулярный докинг выполняли с использованием вычислительного протокола, идентичного протоколу, использованному при формировании обучающего набора данных.

## 2. Результаты и обсуждение

После обучения гетерознкодера проводили оценку качества его работы с помощью функции потерь, графики которой для тренировочного и валидационного набора данных представлены на рисунке 2 с помощью оранжевой и голубой линий соответственно. Анализ приведенных на рисунке 2 данных свидетельствует о подобии графиков и их конечной сходимости, что позволяет сделать вывод об успешном обучении нейронной сети и отсутствии ее переобучения.

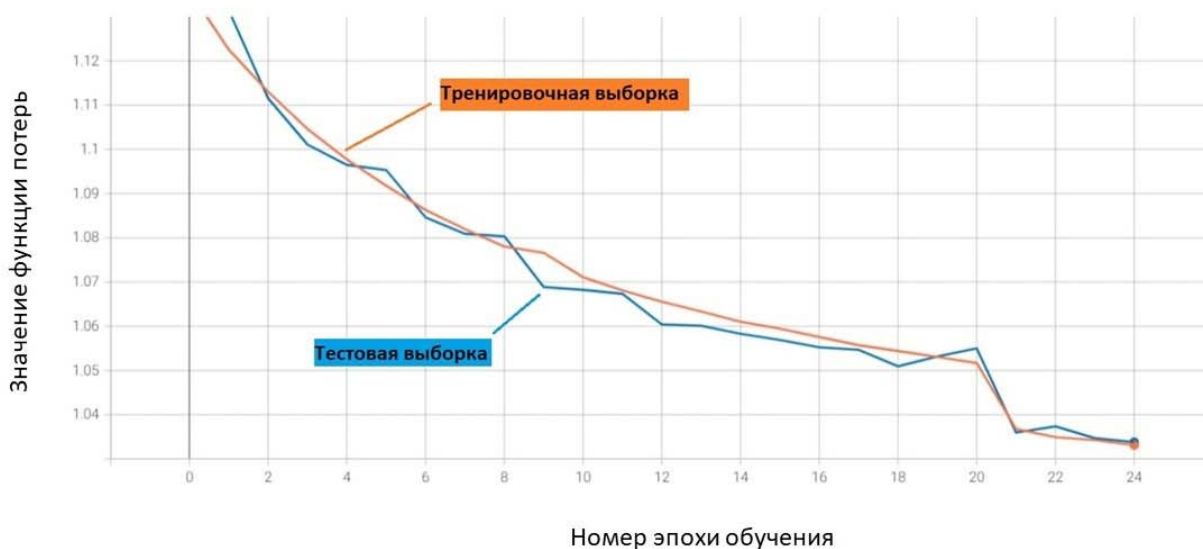


Рисунок 2 – Потери при обучении и валидации для разработанной модели гетерознкодера

Полученная выборка соединений после их ранжирования по значениям оценочной функции программы AutoDock Vina

(<https://vina.scripps.edu>) составила 569 молекул, проявляющих высокое сродство к АТФ-связывающим сайтам Vcr-Abl тирозинкиназы и ее мутантной формы Vcr-Abl<sup>T315I</sup>. Согласно данным молекулярного докинга, отобранные соединения имеют низкие значения энергии связывания, варьирующие от –9,0 ккал/моль до –13,8 ккал/моль. С учетом стандартной ошибки программы AutoDock Vina, составляющей 2,9 ккал/моль (<https://vina.scripps.edu>), эти значения сопоставимы с величинами, полученными с помощью идентичного вычислительного протокола для мощного противоопухолевого препарата понатиниба, широко применяемого в клинике для терапии ХМЛ. В таблице приведены значения энергии связывания для понатиниба и трех лучших по значениям энергии связывания соединений, сгенерированных нейронной сетью.

Таблица – Значения энергии связывания для понатиниба и трех сгенерированных нейронной сетью соединений (I–III) в комплексах с Vcr-Abl тирозинкиназой и ее мутантной формой Vcr-Abl<sup>T315I</sup>

| Соединение <sup>1</sup>  | Энергия связывания ΔG (ккал/моль) |   |
|--|-----------------------------------|---|
|  | Vcr-Abl<br>тирозинкиназа          | Vcr-Abl <sup>T315I</sup><br>тирозинкиназа |
| I (C <sub>29</sub> H <sub>2</sub> F <sub>3</sub> N <sub>6</sub> O)                 | –13,8                             | –11,3                                     |
| II (C <sub>27</sub> H <sub>2</sub> ClN <sub>4</sub> O)                             | –13,4                             | –11,4                                     |
| III (C <sub>27</sub> H <sub>3</sub> F <sub>3</sub> N <sub>5</sub> O <sub>2</sub> ) | –13,0                             | –11,0                                     |
| Понатиниб  | –12,0                             | –12,2                                     |

Примечание: <sup>1</sup> В скобках приведены молекулярные формулы соединений.

## Заключение

Разработана модель гетероэнкодера на основе рекуррентных и полносвязных нейронных сетей прямого распространения, которая способна генерировать новые потенциальные ингибиторы Vcr-Abl тирозинкиназы – фермента, играющего важную роль в развитии хронического миелоидного лейкоза. Показано, что совместное применение разработанной нейронной сети с методами молекулярного моделирования представляет собой эффективный вычислительный инструмент, позволяющий значительно сократить время и затраты, необходимые для разработки новых эффективных противоопухолевых агентов широкого спектра действия.

Работа выполнена в рамках задания 3.4.1. «Разработка новых противоопухолевых и противовирусных органических соединений с использо-

ванием методов компьютерного моделирования, машинного обучения и химического синтеза» ГПНИ «Конвергенция–2025».

### **Библиографические ссылки**

1. Lipinski C.F., Maltarollo V.G., Oliveira P.R., da Silva A.B.F., Honorio, K.M. Advances and Perspectives in Applying Deep Learning for Drug Design and Discovery // *Front. Robotics and AI*. 2019. № 6. P. 108.
2. Köstler W.J., Zielinski C.C. Targeting Receptor Tyrosine Kinases in Cancer. In: *Receptor Tyrosine Kinases: Structure, Functions and Role in Human Disease*. Eds.: Wheeler D.L., Yarden Y. New York: Springer Science & Business Media, 2015. P. 78–225.
3. Bjerrum E.J., Sattarov B. Improving Chemical Autoencoder Latent Space and Molecular De-novo Generation Diversity with Heteroencoders. 2018; arXiv:1806.09300v2.
4. Bjerrum E.J., Sattarov B. Improving Chemical Autoencoder Latent Space and Molecular De-novo Generation Diversity with Heteroencoders // *Biomolecules*. 2018. № 8(4). P. 131. <https://doi.org/10.3390/biom8040131>.

## ИДЕНТИФИКАЦИЯ ИНТРОНОВ, СОХРАНЯЕМЫХ В МОЛЕКУЛАХ РНК КЛЕТОК ЧЕЛОВЕКА, ПО ДАННЫМ ПОЛНОТРАНСКРИПТОМНОГО СЕКВЕНИРОВАНИЯ

**В.А. Сучёк, В.В. Гринев**

*Белорусский государственный университет, Кафедра генетики, биологический факультет, пр. Независимости, д. 4, 220050, г. Минск, Беларусь,  
valeria.suchek24@gmail.com*

В статье описывается оригинальный многоэтапный пайплайн по идентификации *in silico* интронных последовательностей, сохраняющихся в транскриптоме клеток человека, секвенированном по методу RNA-Seq.

**Ключевые слова:** сплайсинг РНК; сохранение интронов; идентификация; RNA-Seq.

## IDENTIFICATION OF RETAINED INTRONS IN HUMAN RNA MOLECULES SEQUENCED BY NGS

**V.A. Suchok, V.V. Grinev**

*Department of Genetics, the Faculty of Biology, Belarusian State University, Nezavisimosti Avenue-4, 220050, Minsk, Belarus.  
Corresponding author: valeria.suchek24@gmail.com*

The article describes an original multi-stage pipeline for identification *in silico* of retained introns in the human transcriptome sequenced using the RNA-Seq method.

**Keywords:** RNA-Seq, RNA splicing, intron retention, intron bin

### **Введение**

Сплайсинг РНК, будучи важнейшим молекулярным процессом, подразумевает удаление интронных последовательностей с последующим объединением экзонов в конечную молекулу РНК. Однако существует вариант сплайсинговых событий, при котором осуществляется сохранение интрона в составе зрелой молекулы РНК [1]. Такой феномен сохранения интронов сам по себе является неоспоримым, однако остаются вопросы касательно причин возникновения и уровня специфичности данного процесса. Более того, известны случаи, при которых сохранение того или иного интрона ассоциировано с развитием онкологических заболеваний [2]. Поскольку ключевым моментом в изучении таких интронов является их идентификация, целью настоящей работы стала разработка алгоритма

поиска интронных последовательностей, сохраняющихся в молекулах зрелых РНК.

## 1. Методология исследования

Наш алгоритм поиска *in silico* интронных последовательностей, сохраняющихся в зрелых молекулах РНК, включает шесть этапов. Самым первым этапом является создание списка геномных координат всех несохраняющихся интронов эталонного генома GRCh38.p7 человека. Из такого списка мы исключили геномные интервалы одноэкзонных генов и генов малых РНК, а оставшиеся интервалы были разбиты на интронные бины, сгруппированные по геной принадлежности. В данном случае под интронным бином подразумевается уникальный фрагмент интрона (либо весь интрон), не перекрывающийся с другими такими же уникальными интронными фрагментами.

Второй этап включает картирование коротких RNA-Seq ридов, полученных при секвенировании целевого транскриптома, относительно эталонного генома с помощью алгоритма *subjunc* [3]. Последующая суммаризация ридов осуществляется с помощью алгоритма *featureCounts* [4], причем учитываются только уникально картированные риды с минимальным перекрытием интронного бина на 5 нуклеотидов.

На третьем этапе рассчитывается нулевое (теоретически ожидаемое) распределение ридов по интронам гена. Теоретически ожидаемое распределение в данном случае – это гипотетическая ситуация, при которой все интронные риды гена случайным образом и с равной вероятностью распределяются по его интронам. В нашем случае деформация значений нулевого распределения сводится к минимуму за счет использования исходных данных по суммаризации ридов и не обязательной дискретизации значений нулевого распределения.

Четвертый этап анализа включает поиск статистически значимых различий между эмпирическими и нулевыми распределениями. Для этого эмпирические и теоретически ожидаемые значения объединяются в одну матрицу данных и с помощью линейного моделирования находятся различия между ними. В своих исследованиях мы используем простую линейную модель, допускающую, что эмпирические данные могут быть описаны с помощью распределения Гаусса, и обобщенную, базирующуюся на распределении Пуассона. Оба подхода имплементированы в библиотеках R-функций *edgeR/limma* [5, 6] и *DESeq2* [7], соответственно. На выходе любой из этих подходов выдает логарифмированную кратность различий ( $\log_2FC$ ) между эмпирическим и теоретически ожидаемым ко-



личеством интронных ридов, подтверждающих сохранение в молекулах зрелых РНК каждого из интронных бинов.

Наконец, на последнем этапе решается вопрос с уровнем подтверждения экспрессии сохраняемых интронов, а также с выбором пороговых значений для  $\log_2FC$  и уровнем значимости этого параметра. Первый вопрос был снят нами после изучения кривых распределения эмпирических значений уровней экспрессии интронов и выбора уровня экспрессии 40 FPKM как минимального. Пороговые значения для  $\log_2FC$  и уровня его статистической значимости рассчитываются на основе квантильных распределений этих показателей, причем в автоматическом режиме с помощью алгоритма elbow point [8]. Уровень же статистической значимости самих рассчитанных пороговых значений оценивается с помощью ROC-анализа и логистической регрессии с применением функционала R-пакетов ROCR [9] и stats.

## 2. Результаты и их обсуждение

Последний этап нашего пайплайна, описанный выше, является одним из критических. Очевидно, что завышенное значение порога экспрессии будет приводить к уменьшению количества детектируемых сохраняемых интронов, а заниженное – к увеличению ложноположительных событий. Такой вывод является справедливым и по отношению к двум другим параметрам –  $\log_2FC$  и уровню его статистической значимости.

Результаты наших исследований указывают на то, что одним из возможных решений проблемы выбора порогов для  $\log_2FC$  и уровню его статистической значимости может быть использование ROC-анализа. Однако прямое применение такого анализа к нашим количественным данным невозможно, так как для логистической регрессии на вход должны подаваться категориальные данные. Поэтому первоначально мы делили данные (например, весь ряд значений  $\log_2FC$ ) на два класса: до точки перегиба (рассчитанной по elbow point) и после нее.

В целом, используя выше описанный пайплайн можно идентифицировать множество интронов (в форме интронных бинов), сохраняющихся в молекулах зрелых РНК в транскриптом лейкозных и нормальных клеток крови человека. Максимальное разнообразие сохраняемых интронов детектируется в транскриптом лейкозных клеток. Так, в транскриптом клеток линии Kasumi-1 острого миелоидного лейкоза при созревании молекул РНК 1528 генов произошло 1903 события сохранения интронов, а в клетках больных лейкозом с инверсией *inv(16)* количество таких событий

достигало 2609 и затронуло сплайсинг молекул РНК, кодируемых 1898 генами. В тоже время в транскриптоме нормальных клеток красного костного мозга или периферической крови таких событий детектируется меньше.

Для валидации полученных результатов была проведена реконструкция транскриптомов изучаемых клеток с помощью алгоритма Cufflinks. Далее, воспользовавшись пакетом GenomicRanges, были идентифицированы те реконструированные транскрипты, которые содержат обнаруженные *in silico* интроны. На данном этапе исследования мы проверили соответствие между покрытием интронных последовательностей ридями и включением их при сборке полноразмерных молекул РНК. Примерно 90% интронных бинов, классифицированных согласно *in silico* анализу как сохраняющиеся в молекулах зрелых РНК, присутствует в транскриптах, реконструированных с помощью Cufflinks (рисунок 1).

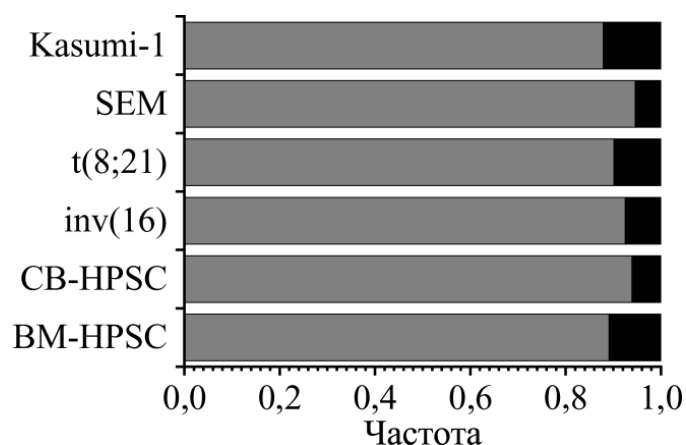


Рисунок 1 – Частота встречаемости интронов, определенных *in silico* как сохраняющиеся, в транскриптах, реконструированных с помощью Cufflinks. Область интронов, присутствующих в транскриптах, залита серым цветом, не присутствующих – черным цветом. Сокращения CB-HPSC и BM-HPSC обозначают CD34<sup>+</sup> гемопоэтические стволовые клетки, полученные из пуповинной крови или нормального костного мозга человека, соответственно

При этом длина транскриптов, содержащих интроны, возрастает (из-за вставки интрона), а экспрессия не отличается от таковой для транскриптов без интронов (рисунок 2). Такого рода результаты говорят о том, что транскрипты, содержащие интроны, скорее всего не являются шумом, появляющимся при работе системы сплайсинга, а, более вероятно, играют некую биологическую роль.

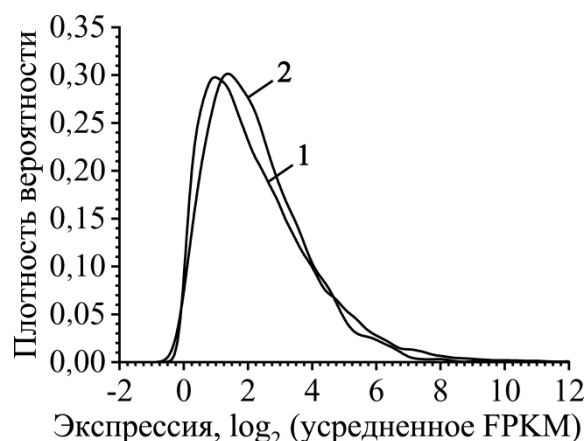


Рисунок 2 – Экспрессия транскриптов, не содержащих интроны (кривая 1), и транскриптов, в которых присутствуют интроны (кривая 2), в клетках линии Kasumi-1. Схожие результаты были получены для других типов клеток, вовлеченных в исследование

Таким образом, нами разработан многоэтапный пайплайн идентификации *in silico* интронных последовательностей, сохраняющихся в молекулах зрелых РНК человека. Данный алгоритм эффективен как при работе с оригинальными, так и с публичными транскриптомными данными. Кроме того, он позволяет идентифицировать сохранившиеся интроны в транскриптоме как лейкозных, так и нормальных клеток крови человека. При этом полученные результаты поиска *in silico* интронных последовательностей, сохраняющихся в молекулах зрелых РНК, хорошо согласуются с результатами независимой реконструкции полноразмерных молекул РНК с помощью алгоритма Cufflinks, проведенной с использованием тех же первичных RNA-Seq данных.

### Библиографические ссылки

1. Ramanouskaya T.V., Grinev V.V. The determinants of alternative RNA splicing in human cells // *Molecular Genetics and Genomics*. 2017. № 292(6). P. 1175–1195. DOI: 10.1007/s00438-017-1350-0.
2. Monteuuis G., Schmitz U., Petrova V., Kearney P.S., Rasko J.E.J. Holding on to junk bonds: Intron retention in cancer and therapy // *Cancer Research*. 2021. № 81(4). P. 779–789. DOI: 10.1158/0008-5472.CAN-20-1943.
3. Liao Y., Smyth G.K., Shi W. The R package Rsubread is easier, faster, cheaper and better for alignment and quantification of RNA sequencing reads // *Nucleic Acids Research*. 2019. № 47(8). P. e47. DOI: 10.1093/nar/gkz114.
4. Liao Y., Smyth G.K., Shi W. featureCounts: an efficient general purpose program for assigning sequence reads to genomic features // *Bioinformatics*. 2014. № 30(7). P. 923–930. DOI: 10.1093/bioinformatics/btt656.

5. Robinson M.D., McCarthy D.J., Smyth G.K. edgeR: a Bioconductor package for differential expression analysis of digital gene expression data // *Bioinformatics*. 2010. № 26(1). P. 139–40. doi: 10.1093/bioinformatics/btp616.
6. Ritchie M.E., Phipson B., Wu D., Hu Y., Law C.W., Shi W., Smyth G.K. limma powers differential expression analyses for RNA-sequencing and microarray studies // *Nucleic Acids Research*. 2015. № 43(7). P. e47. DOI: 10.1093/nar/gkv007.
7. Love M.I., Huber W., Anders S. Moderated estimation of fold change and dispersion for RNA-seq data with DESeq2 // *Genome Biology*. 2014. № 15(12). P. 550. DOI: 10.1186/s13059-014-0550-8.
8. Shi C., Wei B., Wei S., Wang W., Liu H., Liu J. |A quantitative discriminant method of elbow point for the optimal number of clusters in clustering algorithm // *Journal on Wireless Communications and Networking*. 2021. № 31. DOI: 10.1186/s13638-021-01910-w.
9. Janssens A.C.J.W., Martens F.K. Reflection on modern methods: Revisiting the area under the ROC curve // *International Journal of Epidemiology*. 2020. № 49(4). P. 1397–1403. DOI: 10.1093/ije/dyz274.

## СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ АЛГОРИТМОВ ОБНАРУЖЕНИЯ САЙТОВ ОДНОНУКЛЕОТИДНЫХ ВАРИАЦИЙ

Я.В. Шинкевич<sup>1</sup>, Н.Н. Яцков<sup>2</sup>, И.С. Трусов<sup>1</sup>, И.Н. Ильюшенко<sup>1</sup>,  
В.В. Скакун<sup>2</sup>, В.В. Гринеv<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Белорусский государственный университет, Кафедра генетики, пр. Независимости,  
д. 4, 220050, г. Минск, Беларусь, grinev\_vv@bsu.by

<sup>2</sup>Белорусский государственный университет, Кафедра системного анализа и компьютерного моделирования, пр. Независимости, д. 4, 220050, г. Минск, Беларусь

В работе апробировано применение нейронной сети по типу многослойного перцептрона для обнаружения сайтов однонуклеотидного полиморфизма у человека. Используемая нейронная сеть сравнима по результативности с точным тестом Фишера и превосходит биномиальный тест отношения правдоподобия по точности.

**Ключевые слова:** геномное секвенирование; однонуклеотидный полиморфизм; алгоритмы идентификации.

## COMPARATIVE ANALYSIS OF ALGORITHMS FOR DETECTION OF SINGLE NUCLEOTIDE VARIATIONS

Y.V. Shynkevich<sup>1</sup>, M.M. Yatskou<sup>2</sup>, I.S. Trusau<sup>1</sup>, I.M. Ilyushonak<sup>1</sup>,  
V.V. Skakun<sup>2</sup>, V.V. Grinev<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Department of Genetics, Belarusian State University, Nezavisimosti Avenue-4, 220050,  
Minsk, Belarus, grinev\_vv@bsu.by

<sup>2</sup>Department of System Analysis and Computer Modeling, Belarusian State University,  
Nezavisimosti Avenue-4, 220050, Minsk, Belarus.

Corresponding authors: grinev\_vv@bsu.by

In this work, we tested the applicability of perceptron-like neural network to detect sites of single nucleotide polymorphism in human genome. The used neural network is comparable in performance to Fisher's exact test and outperforms the binomial likelihood ratio test in precision.

**Keywords:** genomic sequencing; single nucleotide polymorphism; calling algorithms.

### Введение

Геном человека содержит множество изменчивых (полиморфных) однонуклеотидных сайтов, варианты которых встречаются в популяциях людей с частотой более 1% и именуются сайтами однонуклеотидных вариаций (SNVs, от англ. single nucleotide variations). Сюда также следует добавить точечные мутации, встречающиеся с частотой менее 1%, и мы получим очень высокую изменчивость нашего генома, влияющую на

транскрипцию генов, процессинг их первичных РНК и структуру кодируемых белков.

Поскольку для многих полиморфных сайтов нашего генома обнаружены ассоциации с фенотипом (физическими и умственными способностями человека, предрасположенностью к заболеваниям, характером ответа на лекарства, продолжительностью жизни и т.д.), то в настоящее время особое внимание уделяется идентификации таких сайтов в индивидуальных геномах по данным полногеномного, экзомного или прицельного секвенирования. Такого рода задача имеет ряд классических решений, основанных, например, на использовании точного теста Фишера. Однако, исходя из структуры геномных данных, вполне возможно применение и нетривиальных подходов, в частности, нейронных сетей, хотя такие подходы и не фигурируют в научной литературе. В связи с этим мы нацелились на проверку потенциала нейронных сетей в обнаружении SNVs и сравнение такого подхода с несколькими наиболее мощными классическими алгоритмами.

## 1. Методология исследования

В работе были использованы эталонные данные, полученные консорциумом GIAB [1]. Выбор именно этих данных был обусловлен тем, что на сегодняшний день это наиболее надежные бенчмарк-данные для решения любых задач, связанных с изучением геномного полиморфизма у человека (от разработки новых инструментальных методов «мокрой» биологии до сравнения алгоритмов обнаружения полиморфных сайтов).

Для достижения своей цели мы воспользовались результатами секвенирования генома HG001 – одного из семи геномов GIAB. В общей сложности 1268026804 ридов, полученных при секвенировании этого генома, были картированы относительно эталонной сборки GRCh38 генома человека и собраны в BAM файл объемом 101,42 Гбайт. Кроме того, для генома HG001 мы получили эталонные наборы SNVs, сгенерированные с помощью двух подходов (10X Genomics и benchmark) [1]. Эти наборы были использованы нами для оценки чувствительности и специфичности наших алгоритмов.

## 2. Результаты и их обсуждение

В данном исследовании мы провели сравнение трех алгоритмов идентификации сайтов SNVs по данным геномного секвенирования: точный тест Фишера, биномиальный тест и нейронная сеть. Сравнение проводилось по чувствительности (recall или sensitivity) и точности (precision), которые рассчитывались по следующим формулам:

$$\text{recall} = \text{SNVs}^{(\text{empir.true})} / \text{SNVs}^{(\text{ref})}, \quad (1)$$

$$\text{precision} = \text{SNVs}^{(\text{empir.true})} / \text{SNVs}^{(\text{empir.all})}, \quad (2)$$

где  $\text{SNVs}^{(\text{ref})}$  – это количество сайтов SNVs в эталонном наборе,  
 $\text{SNVs}^{(\text{empir.true})}$  – это количество истинных сайтов SNVs,  
 обнаруженных тестируемым алгоритмом,  
 $\text{SNVs}^{(\text{empir.all})}$  – это количество всех сайтов SNVs (как истинных, так  
 и ложных), обнаруженных тестируемым алгоритмом.

Точный тест Фишера, как известно, работает с таблицами сопряженности признаков. Построение таких таблиц для идентификации сайтов SNVs имеет свои особенности. Первая пара сопряженных значений получается путем подсчета количества ридов, подтверждающих полиморфизм, и общего количества ридов, покрывающих данный сайт. Вторая же пара сопряженных значений отражает локальный шум, возникающий при секвенировании, главными источниками которого являются инструментальные ошибки самого секвенирования и ошибки картирования. Она получается путем подсчета количества нуклеотидов, не совпадающих с эталонной последовательностью, и количества нуклеотидов, полностью тождественных эталону, среди ридов, картированных в геномном окне размером 100 нуклеотидов.

| Эталонный набор | Чувствительность | Точность |
|-----------------|------------------|----------|
| 10X Genomics    | 0,762            | 0,888    |
| benchmark       | 0,896            | 0,796    |

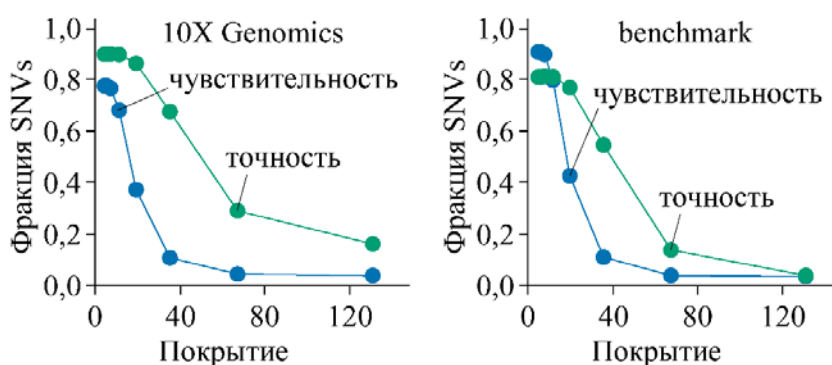


Рисунок 1 – Идентификация SNVs с помощью точного теста Фишера

В своих исследованиях мы воспользовались функцией `exactSNP()` из пакета `Rsubread` [2], где имплементирован быстрый алгоритм поиска сайтов SNVs с помощью точного теста Фишера. Как видно на рисунке 1, минимальная чувствительность этого алгоритма равна 76,2% (при сравнении с эталонным набором 10X Genomics), а минимальная точность – 79,6% (с

эталонным набором benchmark).

Однако очевидна также зависимость результатов этого теста от глубины секвенирования (покрытия эталонной последовательности ридами): чем выше порог покрытия, тем ниже чувствительность и точность. И если падение чувствительности является ожидаемым, то падение точности, по видимому, обусловлено искусственным изменением локального шума из-за фильтрации геномных данных.

Вторым алгоритмом был биномиальный тест отношения правдоподобия. Для постановки этого теста мы воспользовались функционалом двух R-пакетов VariantTools [3] и gmapR [4]. Результаты, полученные нами с помощью биномиального теста для двух эталонных наборов данных, неоднозначны. Как видно из таблицы 1, чувствительность этого теста может достигать почти 98%, что является самым высоким значением среди всех изученных алгоритмов. Однако специфичность данного теста не превышает 30%, что является самым низким показателем среди всех алгоритмов. При этом следует отметить, что применение многокомпонентных правил фильтрации (частота ошибок секвенирования, глубина покрытия ридами, частота альтернативной аллели и т.д.) как исходных данных, так и обнаруженных первичных сайтов SNVs не улучшают ситуацию, а наоборот, только снижают целевые показатели.

Наконец, для идентификации сайтов SNVs нами также был апробирован подход, основанный на нейронных сетях. Мы использовали сети по типу многослойного персептрона с тремя последовательными слоями (входной, скрытый, выходной) размерностями 9, 300 и 100, соответственно, между которыми находились слои Batch Normalization, а функцией активации выходного слоя была функция sigmoid.

Таблица 1 – Результативность применения биномиального теста для идентификации сайтов SNVs.

| Эталонный набор | Чувствительность | Точность |
|-----------------|------------------|----------|
| 10X Genomics    | 0,874            | 0,296    |
| benchmark       | 0,979            | 0,262    |

Исходные данные, представленные матрицей частот нуклеотидов по каждой из позиций эталонного генома, были разделены на обучающую и тестовую выборку в соотношении 80 к 20, соответственно, и трансформи-



рованы согласно специфике подачи данных в нейросеть. Кроме того, так как исходные данные имеют сильный дисбаланс классов (с явным преобладанием сайтов, не являющихся SNVs), то к обучающей выборке был применен upsampling, а в функции ошибки был использован эквивалентный пенализирующий коэффициент weight decay.

Как видно из таблицы 2, полученной для эталонного набора 10X Genomics, с повышением количества сайтов SNVs в обучающей выборке модель работает все с большей точностью, но падает чувствительность. Компромисными вариантами являются коэффициенты upsampling и weight decay, равные 0,05 и 0,1: чувствительность в этом случае достигает 92%, а точность 83%. Аналогичные результаты были получены и для эталонного набора benchmark.

Таблица 2 – Результативность применения нейронной сети для идентификации сайтов SNVs.

| Пенализирующий коэффициент | Чувствительность | Точность |
|----------------------------|------------------|----------|
| 0,01                       | 0,95             | 0,72     |
| 0,05                       | 0,92             | 0,81     |
| 0,10                       | 0,88             | 0,83     |
| 0,15                       | 0,84             | 0,84     |
| 0,20                       | 0,74             | 0,85     |
| 0,30                       | 0,59             | 0,86     |

Таким образом, все три алгоритма обнаружения SNVs, прошедшие испытание в представленном исследовании, дают схожие результаты по чувствительности, но различаются по точности с минимумом для биномиального теста. Существенно, что использованная нами нейронная сеть сравнима по результативности с точным тестом Фишера и превосходит биномиальный тест отношения правдоподобия по точности. Следовательно, наши результаты открывают перспективу для дальнейшего развития алгоритмов анализа геномного полиморфизма человека с использованием нейронных сетей, в частности, повышения их чувствительности и точности.

## Библиографические ссылки

1. Zook J.M., McDaniel J., Olson N.D., Wagner J., Parikh H., Heaton H., Irvine S.A., Trigg L., Truty R., McLean C.Y., De La Vega F.M., Xiao C., Sherry S., Salit M. An open resource for accurately benchmarking small variant and reference calls // *Nature Biotechnology*. 2019. № 37(5). P. 561–566. DOI: 10.1038/s41587-019-0074-6.
2. Liao Y., Smyth G.K., Shi W. The R package Rsubread is easier, faster, cheaper and better for alignment and quantification of RNA sequencing reads // *Nucleic Acids Research*. 2019. № 47(8). P. e47. DOI: 10.1093/nar/gkz114.
3. Lawrence M., Degenhardt J., Gentleman R. VariantTools: Tools for exploratory analysis of variant calls. R package version 1.38.0.
4. Barr C., Wu T., Lawrence M. gmapR: An R interface to the GMAP/GSNAP/GSTRUCT suite. R package version 1.38.0.

## ГЕНЕРАТИВНЫЕ МОДЕЛИ ГЛУБОКОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ РАЗРАБОТКИ НОВЫХ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ ПРОТИВ КОРОНАВИРУСА SARS-CoV-2

Н.А. Шульдов<sup>1</sup>, А.М. Юшкевич<sup>1</sup>, К.В. Фурс<sup>1</sup>,  
А.В. Тузиков<sup>1</sup>, А.М. Андрианов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Объединенный институт проблем информатики, Национальная академия наук  
Беларуси, 220012, ул. Сурганова, 6, Минск, Республика Беларусь,  
tuzikov@newman.bas-net.by*

<sup>2</sup>*Институт биоорганической химии, Национальная академия наук Беларуси,  
ул. ак. Купревича, 5/2, 220141, г. Минск, Республика Беларусь,  
alexande.andriano@yandex.ru*

Разработана генеративная нейронная сеть глубокого обучения для компьютерного конструирования потенциальных ингибиторов основной протеазы SARS-CoV-2, играющей важную роль в репликации и транскрипции коронавируса. Проведено обучение и тестирование нейронной сети на наборе химических соединений, содержащих функциональные группы, способные обеспечить эффективные взаимодействия этих молекул с молекулярной мишенью. Показано, что использование нейронной сети совместно с методами молекулярного моделирования формирует продуктивную платформу для генерации новых молекул с заданными фармакологическими свойствами, перспективных для создания эффективных противовирусных препаратов.

**Ключевые слова:** Методы машинного обучения; глубокое обучение; генеративные нейронные сети; коронавирус SARS-CoV-2; основная протеаза; виртуальный скрининг; молекулярный докинг; противовирусные препараты.

## GENERATIVE DEEP LEARNING MODELS FOR THE DEVELOPMENT OF NOVEL POTENTIAL DRUGS AGAINST SARS-CoV-2 CORONAVIRUS

N.A. Shuldau<sup>a</sup>, A.M. Yushkevich<sup>a</sup>, K.V. Furs<sup>a</sup>,  
A.V. Tuzikov<sup>a</sup>, A.M. Andrianov<sup>b</sup>

<sup>a</sup>*United Institute of Informatics Problems, National Academy of Sciences of Belarus,  
Surganov str., 6, Minsk, Republic of Belarus*

<sup>b</sup>*Institute of Bioorganic Chemistry, National Academy of Sciences of Belarus, ac. Kuprevich  
str., 5/2, Surganov str., Minsk, Republic of Belarus, alexande.andriano@yandex.ru*

A generative deep learning neural network has been developed for the computer-aided design of potential inhibitors of the SARS-CoV-2 main protease, which plays an important role in coronavirus replication and transcription. The neural network was trained and tested on a set of chemical compounds containing functional groups capable of providing effective

interactions of these molecules with the molecular target. The use of the neural network in conjunction with molecular modeling methods was shown to form a productive platform for the generation of novel molecules with desired pharmacological properties that are promising for the design of effective antiviral drugs.

**Keywords:** Machine learning methods; deep learning; generative neural networks; coronavirus SARS-CoV-2; main protease; antiviral drugs.

## Введение

В последние годы генеративные модели глубокого обучения нашли широкое применение в исследованиях по разработке лекарств *de novo* [1]. Благодаря огромному прогрессу методов глубокого обучения в настоящее время разработаны генеративные модели с различной архитектурой и разными методами обучения, использующие разные типы и структуры данных. Применение генеративных моделей глубокого обучения уже показало их способность генерировать молекулы, которые могут быть синтезированы, активны *in vitro*, стабильны и проявляют активность *in vivo* в моделях, связанных с различными заболеваниями [1]. Однако, несмотря на то что генеративные модели глубокого обучения становятся все более распространенными в био- и хемоинформатике, их потенциал в этой области еще не раскрыт в полном объеме. В связи с этим разработка и применение генеративных методов глубокого обучения для компьютерного конструирования потенциальных лекарственных препаратов имеют большое научное и практическое значение.

Цель исследования: Разработать генеративные модели глубокого обучения для рационального дизайна новых потенциальных ингибиторов основной протеазы ( $M^{\text{Pro}}$ ; Main Protease) SARS-CoV-2 – фермента, критически важного для репликации и транскрипции вируса и, поэтому, представляющего перспективную мишень для конструирования эффективных противовирусных препаратов [2].

Для решения поставленной задачи были выполнены исследования, включающие:

- 1) разработку и реализацию архитектуры генеративных моделей глубокого обучения, позволяющих генерировать новые высокоаффинные ингибиторы  $M^{\text{Pro}}$  SARS-CoV-2;
- 2) формирование обучающей библиотеки малых молекул, содержащих элементы структуры, способные обеспечить специфические и эффективные взаимодействия потенциальных лигандов с каталитическим сайтом  $M^{\text{Pro}}$  SARS-CoV-2;
- 3) обучение и тестирование нейронной сети на соединениях из сформированной обучающей библиотеки;

4) оценку результатов обучения и работы нейронной сети в двух разных режимах генерации.

## 1. Материалы и методы

**Архитектура нейронных сетей.** В результате проведенных исследований были разработаны две генеративные модели глубокого обучения: 1) автоэнкодер, основанный на SMILES-представлениях молекул, который обучали без учителя с использованием ячеек долгой краткосрочной памяти (LSTM; Long Shot-Term Memory); 2) автоэнкодер, основанный на описаниях SMILES, который обучали с частичным привлечением учителя с использованием технологии LSTM. Во второй модели значение свободной энергии связывания химических соединений с молекулярной мишенью использовали как дополнительный параметр в латентном слое для обучения на основе результатов докинга соединений из тренировочного набора и как желаемое значение аффинности их связывания с  $M^{Pro}$  в режиме генерации новых соединений. Первая (эмбединговая) модель состоит из энкодера, латентного слоя, также являющегося входным слоем для гауссовского шума, и декодера. Эта модель получает на входной слой векторизованную матрицу описаний SMILES, которая проходит через слой LSTM, имеющий выходную размерность 64 нейрона. Особенность этой модели определяется тем, что сами выходные данные из ячеек LSTM энкодера не используются, а вместо этого берутся скрытые векторы и векторы состояний ячеек. Эти векторы конкатенируются вместе, образуя 128-ми элементные векторы, которые пропускаются через полносвязный слой с выходной размерностью 32 нейрона. Данные на выходе из полносвязного слоя попадают на латентный слой, состоящий из 32 нейронов, и являются эмбедингами SMILES в контексте автоэнкодера. Далее эмбединги подаются параллельно на два полносвязных слоя с выходной размерностью 64 нейрона каждый, создавая начальные скрытые векторы и векторы состояния ячеек для слоя LSTM в декодере, имеющего такую же размерность, как и LSTM слой в энкодере. Существует также входной слой для декодера, используемый в качестве входных данных для LSTM, который в режиме обучения получает ту же векторизованную матрицу SMILES, что и вход энкодера, и, как обычная генеративная модель LSTM, предсказывает следующий символ. В режиме генерации на вход декодера подается символ начала строки “!”, запуская процесс посимвольной генерации новой строки SMILES. В этом режиме эмбединги используются для прогнозирования начальных состояний декодера LSTM, и они определяют, какая строка SMILES будет сгенерирована. Во всех полносвязных

слоях (кроме последнего слоя) используется функция активации ReLu, а для последнего слоя – функция активации softmax.

**Подготовка обучающего набора данных.** Для формирования обучающего набора данных методами фармакофорного моделирования, виртуального скрининга и молекулярного докинга идентифицировали набор из 342 102 молекул, способных имитировать структурно-функциональные свойства известных ингибиторов основной протеазы коронавируса SARS-CoV-2 и генетически родственного ему вируса атипичной пневмонии SARS-CoV. Химические структуры этих соединений преобразовывали в представления SMILES, каждое из которых было векторизовано в матрицу в соответствии с максимальной длиной и размером словаря SMILES-символов с добавленными символами начала и конца SMILES-строки. Обнаруженные в результате виртуального скрининга химические соединения интегрировали в молекулярную библиотеку для обучения разработанной генеративной нейронной сети. Подготовленная обучающая молекулярная библиотека объемом в 342 102 соединения и соответствующие им значения свободной энергии связывания с M<sup>Pro</sup> SARS-CoV-2 сформировали набор данных для обучения и тестирования нейронной сети. Молекулярная библиотека была разделена на тренировочный, валидационный и тестовый наборы, включавшие соответственно 70%, 15% и 15% от общего числа содержащихся в ней соединений.

**Обучение моделей.** Обе разработанные модели были составлены слой за слоем с использованием высокоуровневого интерфейса пакета TensorFlow 2.1 (<https://www.tensorflow.org/>). Модели прошли 150 эпох обучения с дополнительным использованием функций обратного вызова "Уменьшить скорость обучения на плато" и "Ранняя остановка", чтобы помочь им сойтись к лучшему локальному минимуму, а также избежать переобучения. В качестве оптимизатора использовали метод стохастической оптимизации градиентного спуска – метод Адама – с начальным значением скорости обучения 0,005; при этом была выбрана категориальная функция потерь кросс-энтропии.

**Генерация соединений и их анализ.** В проведенном исследовании были рассмотрены два режима генерации соединений. В первом режиме генерацию выполняли из случайных чисел, взятых из нормального распределения с параметрами, полученными с помощью распределения тестовых данных на латентном слое для каждой компоненты вектора. Для этого режима процесс генерации в случае энергетической модели предполагал задание априорного значения свободной энергии связывания для аппроксимации генерируемых молекул. При этом были проведены вычислительные эксперименты для различных пороговых значений энергии.

Основная идея второго режима генерации заключалась в использовании выборки лучших лигандов из тестового набора с целью добавления шума к их эмбединговым представлениям. Этот подход должен был изменить модифицированный лиганд и, в случае энергетической модели, также увеличить аффинность связывания молекулы к целевому белку, вынуждая автоэнкодер генерировать более перспективные соединения.

## 2. Результаты и обсуждение

Обе модели были протестированы с использованием каждого из двух режимов генерации. Полученные результаты оценивали на основе значений свободной энергии связывания, предсказанных методом молекулярного докинга, а также путем их сравнения с величинами, рассчитанными для 34 152 эталонных соединений, взятых из тестового набора данных. Эти соединения использовали в вычислительных экспериментах в качестве положительного контроля при оценке способности нейронной сети генерировать из этих молекул более перспективные соединения. Эталонные соединения выбирали случайным образом из тестового набора данных в различных режимах генерации.

**Сравнение моделей и режимов генерации.** Для визуализации результатов эффективности работы двух разработанных моделей в двух режимах генерации, для каждой их комбинации было построено кумулятивное распределение свободной энергии связывания (рис.). Этот метод сравнения позволяет наблюдать общее качество сгенерированных экспериментальных выборок и проводить анализ распределения в целом без учета их количества. Из-за небольшого числа генерируемых соединений, демонстрирующих значения свободной энергии связывания  $< -6$  ккал/моль (менее 2,8% от всех генерируемых соединений), результаты генерации были отфильтрованы согласно этой пороговой величине, использованной ранее для получения обучающего набора данных. Для наглядности представления результатов сравнительного анализа для каждого эксперимента выбирали определенные подмножества. В случае эмбединговой модели были отобраны все соединения, сгенерированные из гауссовского шума (эксперимент I), и все соединения, сгенерированные с использованием эталонных соединений, которые были изменены с его помощью (эксперимент II). Последний режим генерации включал лишь эталонные соединения со значениями свободной энергии связывания  $< -9$  ккал/моль. Для энергетической модели были выбраны три вычислительных эксперимента. Первый эксперимент (эксперимент III) генерировал соединения из гауссовского шума с использованием передаваемых в «энергетический» нейрон пороговых значений свободной энергии связывания, заданных в

интервале от  $-9$  ккал/моль до  $-11$  ккал/моль с шагом  $1$  ккал/моль. Во втором эксперименте (эксперимент IV) использовали эталонные соединения, у которых соответствующие эмбединги изменяли путем добавления гауссовского шума, а пороговые значения энергии связывания понижали с шагом  $0,5$  ккал/моль и  $1,0$  ккал/моль относительно величин, полученных в результате докинга соответствующих эталонных соединений.

Наконец, последний эксперимент (эксперимент V) также включал эталонные соединения, однако в этом случае изменение эмбедингов путем добавления шума не применяли, при этом в «энергетический» нейрон передавали улучшенное значение энергии.

Как видно из графика кумулятивного распределения свободной энергии связывания (рис.), модели из экспериментов II, IV и V генерировали больше соединений с более низкими значениями энергии, поскольку соответствующие им линии на графике расположены ниже, чем в других экспериментах. Сдвиг кумулятивной кривой вправо относительно других линий для каждой доли фиксированного набора данных  $f$  означает, что оставшая часть набора данных  $1-f$  для кривой, сдвинутой вправо, содержит больше соединений с более низкими значениями энергии. Например, при  $f = 0,8$ , можно наблюдать, что для экспериментов I и III лучшие 20% сгенерированных соединений демонстрируют значения свободной энергии связывания выше  $-8,0$  ккал/моль, а для экспериментов II и IV соответствующие значения немного ниже  $-8,0$  ккал/моль. В то же время результаты эксперимента V значительно ближе к величине  $-8,5$  ккал/моль.

Таким образом, сравнение моделей показало, что попытка генерировать новые соединения на основе уже существующих лигандов дает лучшие результаты по сравнению с их генерацией из гауссовского шума (рис.). Кроме того, энергетической модели автоэнкодера удалось использовать введенный в латентный слой «энергетический» нейрон и получить больше соединений с более низкими значениями свободной энергии связывания с целевым белком, чем эмбединговой модели (рис.). При этом добавление гауссовского шума уменьшает преимущества использования «энергетических» нейронов. Обобщая все полученные данные, можно сделать вывод, что архитектура модели автоэнкодера, использованная в эксперименте V, является наиболее перспективной из всех рассмотренных вариантов.



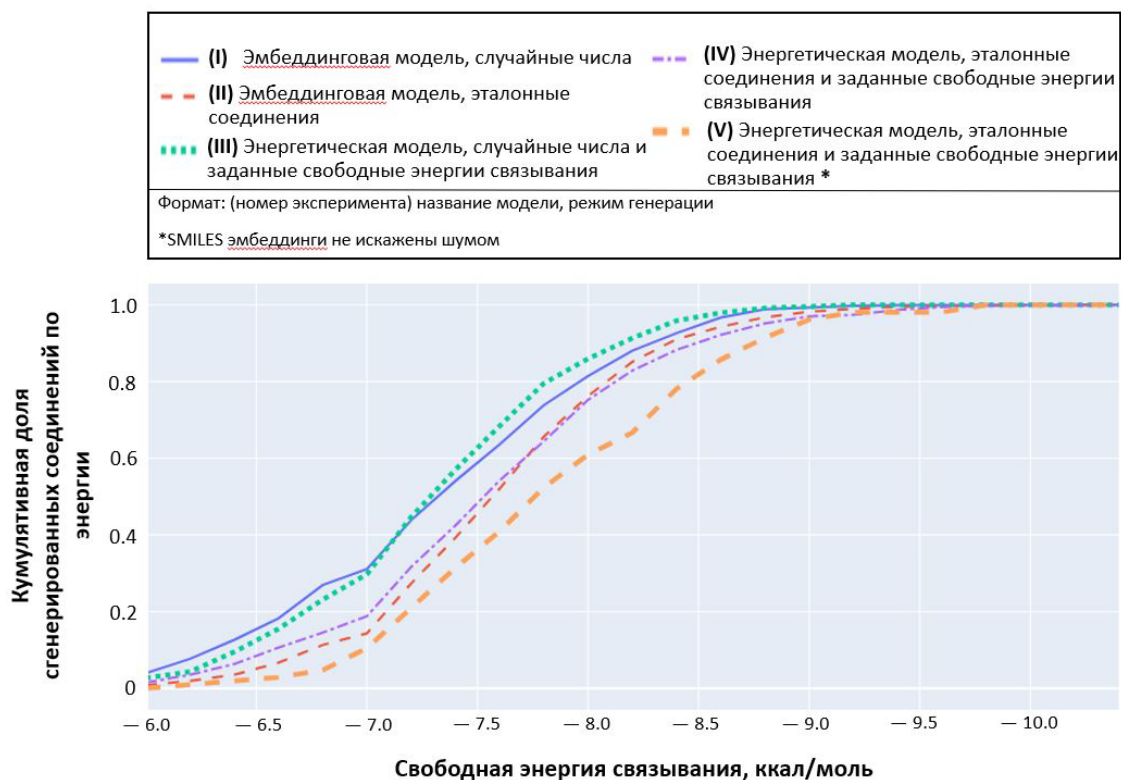


Рис. – Кумулятивные распределения свободной энергии связывания

## Заключение

С помощью технологий глубокого обучения разработана генеративная нейронная сеть для компьютерного дизайна новых потенциальных ингибиторов, способных блокировать  $M^{Pro}$  SARS-CoV-2. Использование разработанной нейронной сети совместно с методом молекулярного докинга продемонстрировало ее значительный потенциал для заполнения неисследованных областей химического пространства новыми молекулами с заданными свойствами, что подтверждается полученными результатами, согласно которым из 4805 сгенерированных соединений только одно присутствовало в исходном наборе данных. Разработанные модели глубокого обучения в сочетании с традиционными методами молекулярного моделирования могут стать продуктивной основой для идентификации новых перспективных соединений против COVID-19, терапевтическое действие которых основано на блокаде основной протеазы SARS-CoV-2, критически важной для репликации и транскрипции вируса [2].

Работа поддержана Белорусским республиканским фондом фундаментальных исследований (проекты Ф21КОВИД-002, X21COVID-003,

Ф21АРМГ-001) и Союзом международных научных организаций ANSO (ANSO-CR-PP-2021-04).

### **Библиографические ссылки**

1. Lipinski C.F., Maltarollo V.G., Oliveira P.R., da Silva A.B.F., Honorio, K.M. Advances and Perspectives in Applying Deep Learning for Drug Design and Discovery // *Front. Robotics and AI*. 2019. № 6. P. 108.
2. Pillaiyar T., Manickam M., Namasivayam V., Hayashi Y., Jung S.H. An overview of Severe Acute Respiratory Syndrome-Coronavirus (SARS-CoV) 3CL protease inhibitors: peptidomimetics and small molecule chemotherapy // *J. Med.Chem.* 2016. № 59(14). P. 6595–6628. doi: 10.1021/acs.jmedchem.5b01461.

МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ,  
КОМПЬЮТЕРНОЕ ЗРЕНИЕ  
И ГРАФИКА

## MULTI-OBJECT TRACKING BY USING STRONG SORT TRACKER AND YOLOV7 NETWORK

Hongxu Quan, Sergey Ablameyko

*Belarusian State University*  
*Nezavisimosti av.4, Minsk, Belarus*  
qhx2smm@gmail.com, ablameyko@bsu.by

Multi-object tracking is a very popular research area in computer vision, and detection-based tracking is one of the commonly used methods. In this paper, we analyze tracking of pedestrians by using the current well-performing Strong SORT tracker with different YOLO detectors and compare them. The results show that Strong SORT with YOLOv7, has better IDF1, MOTA and MTR compared to using other YOLO detectors under the MOT20 evaluation benchmark.

**Keywords:** YOLO; Object detection; Multi-object tracking; Strong SORT; Tracking by detection.

### Introduction

Deep learning neural network algorithms have achieved a wide range of applications and breakthroughs in image and video recognition tasks. From the object detection problem to the pedestrian re-identification problem, neural networks have shown great advantages. Closely related to the pedestrian re-identification problem is the multi-object tracking problem (MOT) for pedestrians. The main problem to be solved in multi-object tracking is to find the object to be tracked in a sequence of images and to correspond the objects in different frames one by one. And multi-object tracking faces problems such as aggregation, occlusion, distortion, similarity, etc.

At present, the common MOT schemes are divided into two kinds: tracking based on detection and tracking without detection. Among them, the common detection-based tracking models are SORT, FairMOT, BytrTrack, etc., whose performance is affected by both trackers and detectors. Common algorithms for trackers include Hungarian algorithm, Kalman filter, embedding method, ReID, etc., while detectors include YOLO, SSD, Faster RCNN, Masker RCNN, etc [1].

Strong SORT [2] is one of the detection-based tracking models, developed from the SORT model, designed with an appearance-free link model and using Gaussian smooth interpolation to compensate for lost detection, i.e., AFLink and GSI, to achieve more accurate tracking and localization. the YOLO family of models is one of the very popular target detection models, which has been

continuously improved since the model was proposed. Recently, Jian-Yao Wang et al. proposed YOLOv7[3], and they achieved significant improvements in speed and accuracy by using new network modules such as E-ELAN. Recently Feng Yang et al. suggested to use YOLOv7 in DeepSORT tracker [4].

In this paper, we develop this idea. We detaily consider combining the latest StrongSORT with YOLOv7, compare it with YOLOV6 and YOLOv5 detectors and test it by using all the most famous evaluation parameters. We show this combination of DeepSort with YOLOv7 allows to get better results in MOT task.

## 1. Methodology

The main principle of Strong SORT as shown in Figure 1, a multi-object tracking algorithm, is to predict the trajectory of the current frame from the trajectory, after Kalman filtering algorithm, and make a judgment whether to confirm it or not, then detect the current frame, correlate the data between the detection result and the predicted trajectory, and update it after matching is completed, then continue to predict the current frame, observe the next frame, and update it, and so on cycle. If the track does not match, it will be deleted after exceeding the maximum age, and if the detection does not match, a new track is created and the prediction is continued by Kalman filtering and repeated. Overall, it can be divided into two parts, the motion branch and the appearance branch.

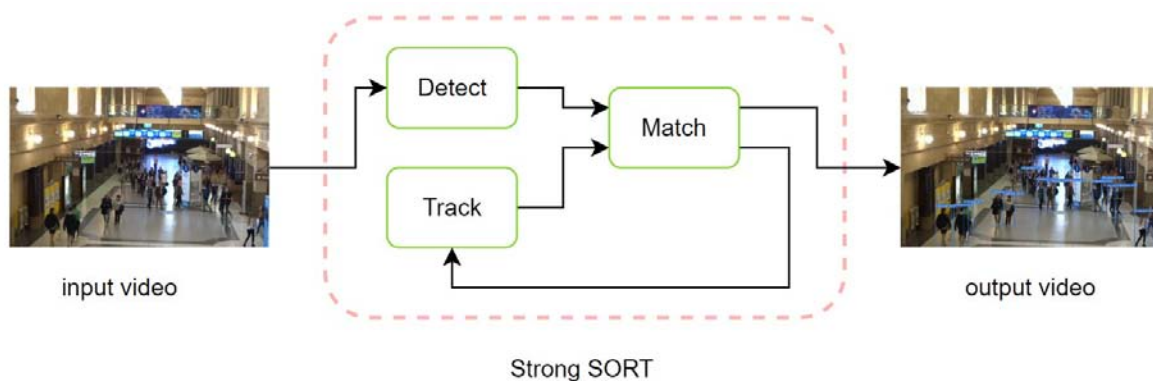


Figure 1 – Brief flow chart of multi-object tracking

We know from the principle that improving the detector performance may improve the performance of the tracking model. So, we replaced the detector module in code.

We selected the following parameters for our experiments, strong-sort-weights for "osnet\_ain\_x1\_0\_imagenet.pth" and yolo-weights for YOLOv5m,

YOLOv5l, YOLOv5x, YOLOv6s, YOLOv7, YOLOv7x, image size is 640, CONF threshold is 0.5, and IOU threshold is 0.5.

MOT20 [5] was used as the evaluation benchmark, in the benchmark “gt.txt” file, we removed the data with class names 6, 11 and 13 and included the data with class 7 in the data with class 1. In the trace results file, change class -1 to 1.

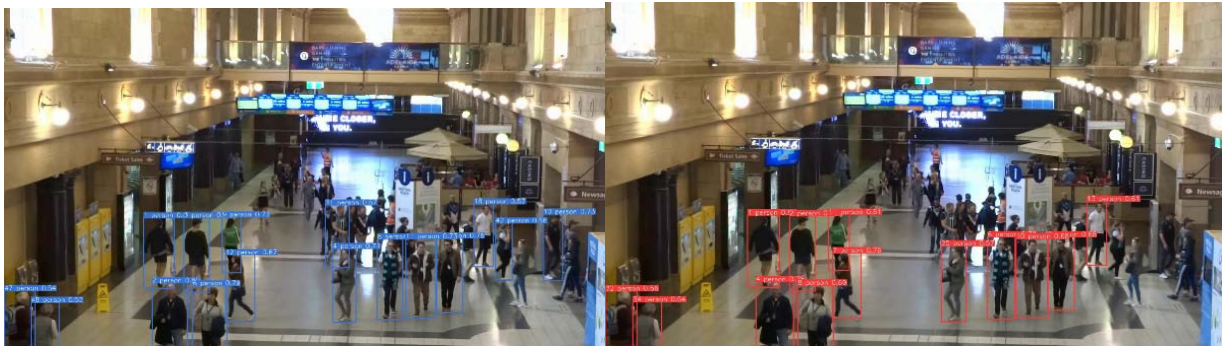
We choose IDF1 of Identity [6] and CLR\_FN, CLR\_FP, IDSW, MLR, MTR, MOTA, MOTP of CLEARMOT [7] as evaluation metrics.

## 2. Results and discussion

The experiments were done on the Google colab platform with a Tesla P100 GPU. Tracking uses an image size of 640. The experimental results are shown in the Table below, and an example of a tracking video is shown in Figure 2.

Table - Comparison results using the MOT20 training set as an evaluation benchmark.

| Detector | CLR_FN↓ | CLR_FP↓ | IDSW↓ | MLR↓  | MTR↑ | MOTA↑ | MOTP↑ | IDF1↑ |
|----------|---------|---------|-------|-------|------|-------|-------|-------|
| YOLOv5m  | 1066687 | 5935    | 1307  | 89.07 | 1.26 | 5.35  | 79.59 | 8.02  |
| YOLOv5l  | 1072963 | 5931    | 1083  | 89.75 | 1.31 | 4.82  | 80.33 | 7.54  |
| YOLOv5x  | 1064968 | 7372    | 1210  | 88.89 | 1.26 | 5.38  | 80.24 | 8.53  |
| YOLOv6s  | 1073731 | 4089    | 862   | 90.25 | 1.04 | 4.93  | 77.93 | 8.65  |
| YOLOv7   | 1053323 | 6797    | 1657  | 87.54 | 1.35 | 6.42  | 79.87 | 9.60  |
| YOLOv7x  | 1060314 | 7667    | 1363  | 88.22 | 1.40 | 5.75  | 79.94 | 8.91  |



(a) The results of YOLOv5x.

(b) The results of YOLOv7x.

Figure 2 – Example of tracking results extracted from frame 160 of MOT20-01 video clip

The experiments show that better results are obtained for six metrics such as IDF1, MOTA and MTR for pedestrian multi-object tracking using YOLOv7 as a detector in Strong SORT.

In addition, the poor performance of IDSW of YOLOv7 in the experimental results may be due to the improved performance of the detector

without a corresponding improvement in matching performance or elevated false detection, which will be our next step to explore.

## References

1. A. Milan, L. Leal-Taixé, I. Reid, S. Roth, and K. Schindler, “MOT16: A Benchmark for Multi-Object Tracking,” arXiv: Computer Vision and Pattern Recognition, Mar. 2016.
2. Yunhao Du, Yang Song, Bo Yang, Yanyun Zhao. StrongSORT: Make DeepSORT Great Again. ArXiv. 2022.
3. Chien-Yao Wang, Alexey Bochkovskiy, H. Liao. YOLOv7: Trainable bag-of-freebies sets new state-of-the-art for real-time object detectors. ArXiv. 2022.
4. Fengxia Yang, Xing Zhang, Boqi Liu. Video object tracking based on YOLOv7 and DeepSORT. ArXiv. 2022.
5. Dendorfer P, Rezatofighi H, Milan A, Shi J, Cremers D, Reid I, et al. MOT20: A benchmark for multi object tracking in crowded scenes. arXiv: Computer Vision and Pattern Recognition. 2020 Mar 19;
6. Ristani E, Solera F, Zou RS, Cucchiara R, Tomasi C. Performance Measures and a Data Set for Multi-Target, Multi-Camera Tracking. arXiv: Computer Vision and Pattern Recognition. 2016 Sep 6;
7. Bernardin K, Stiefelwagen R. Evaluating multiple object tracking performance: the CLEAR MOT metrics // Eurasip Journal on Image and Video Processing. 2008. № 1. P. 1–10.

# A YOLOv7 BASED VISUAL DETECTION OF WASTE

**Zhuda Yang**

*Belarusian State University, 4, Nezavisimosti av., Minsk, 220050, Belarus,  
judayeung@gmail.com*

With the popularization of environmental awareness, how to correctly and efficiently classify the increasing domestic waste is attracting attention. In this study, the recently released YOLOv7 was used to detect and realize the classification of waste. Use the YOLOv7 model to train the waste data set collected in reality. As the experimental result, the experiment proves that the YOLOv7 model is better than other object detection models.

**Keyword:** Object Detection; Image-based waste detection; Waste classification; YOLOv7.

## **Introduce**

With the rapid development of the economy and the increase of the population, the domestic garbage in the city is increasing day by day, and garbage classification is the best solution to deal with the pollution of garbage [1]. At present, the way of waste disposal in waste treatment plants is still mainly manual sorting, which has problems such as low efficiency and harsh environment.

In recent years, many researchers have used traditional methods for garbage classification and identification. A hierarchical classification method for the identification of low-density (LDPE) and high-density polyethylene (HDPE) in mixed plastic waste based on short-wave infrared (SWIR) hyperspectral imaging was proposed by Bonifazi et al [2]. Gundupalli et al. proposed a thermal imaging-based recyclable material identification method based on garbage, which successfully classified iron, plastic, paper, aluminum, stainless steel, and wood, among others [3].

With the rapid development of artificial intelligence technology, more and more scholars conduct research in the field of pattern recognition. There are many object detection methods developed. These detection algorithms can be roughly divided into two types. The first is the Two-Stage object detection algorithm. First, the selection network is used to select and suggest the part of the image that may be the target object, and then the detection algorithm is used. The



network identifies and classifies objects. Such as R-CNN [4] model, Faster R-CNN [5] model, Mask R-CNN [6] model. The second is the One-stage object detection algorithm, which has a simple structure, strong scalability and wider application range. Such as YOLO [7] model, SSD [8] model.

So far, the most commonly studied and used models by researchers are the YOLO series models, such as YOLOv3, YOLOv4, and YOLOv5. YOLOv7 [9] is the latest work of the YOLO series, in this study, the purpose is to achieve waste classification by using image features of various household waste, so we study the YOLOv7 model and compare the results with experiments with different models.

### 1. YOLOv7

YOLOv7 further improves detection speed and accuracy on the basis of previous versions, while balancing speed and accuracy. The main optimization directions of current target detection: faster and stronger network architecture; more effective feature integration method; more accurate detection method; more accurate loss function; more effective label assignment method; more effective training method.

YOLOv7 is similar to YOLOv5 as a whole, mainly in the replacement of internal components of the network structure, auxiliary training heads, and label assignment ideas. First, YOLOv7 extends the efficient long-range attention network, called Extended-ELAN (E-ELAN for short). In large-scale ELANs, the network can reach a steady state regardless of the gradient path length and the number of blocks. E-ELAN expands, shuffles, and merges cardinality to the cardinality, which can improve the learning ability of the network without destroying the original gradient path. In terms of structure, as shown in the figure 1, E-ELAN only changes the architecture in the computing block, and does not change the architecture of the transition layer.

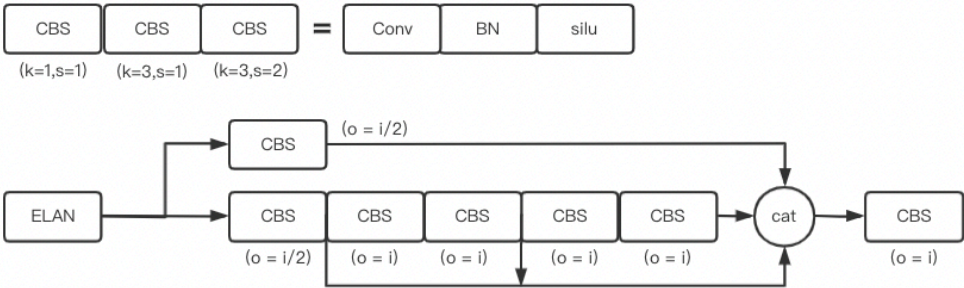


Figure 1. ELAN structure

In the past, in the training of deep networks, label assignments usually refer directly to the ground truth and generate hard labels (without softmax) according to given rules. However, in recent years, taking object detection as an example, researchers often use the quality distribution predicted by the network to combine ground truth, and use some computational and optimization methods to generate reliable soft labels. For example, YOLO uses bounding box predictions and ground truth IoU as soft labels.

In the label assignment mechanism of YOLOv7, the network prediction results and the benchmark are considered at the same time, and then the soft labels (the labels after comprehensive consideration and optimization) are assigned to the "label assigner" mechanism. This new label assignment method generates coarse-to-fine hierarchical labels based on lead head prediction, which are used for the learning of lead head and auxiliary head, respectively. The specific method is shown in the following figure. In figure 2, by letting the shallow auxiliary head directly learn the information that the guide head has learned, the guide head can focus more on the residual information that has not yet been learned. Figure 3 The Coarse-to-fine guide head uses its own prediction and ground truth to generate soft labels and guide labels for assignment.

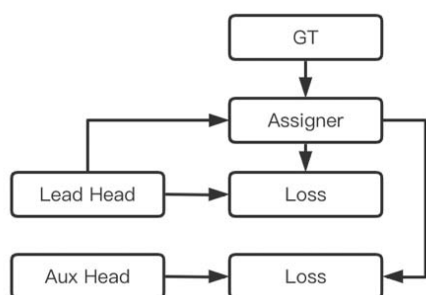


Figure 2. Lead guided assigner

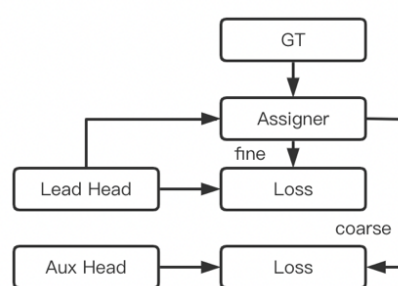


Figure 3. Coarse-to-fine lead guided assign

## 2. Experimental results

In this study, the YOLOv7 model was used to detect and classify domestic waste. To this end, this study takes common household waste as an example to conduct algorithm research, and collects common waste data, including peels, batteries, bottles, cigarettes, glass, tiles, etc. The dataset consists of 2400 pieces of data with different shooting angles, different scenes, different degrees of decay, etc., of which 70% are used for training and 30% are used for testing. The test output plot of the YOLOv7 model is shown in Figure 4.



Figure 4. Test result of YOLOv7 on waste dataset

Figure 5 gives the mean precision (mAP), precision, and recall values of the YOLOv7. model.

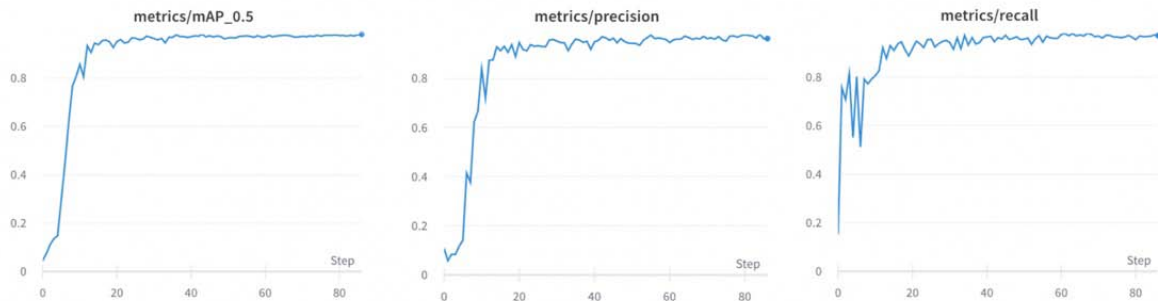


Figure 5. mAP, Precision, Recall values of the YOLOv7 model

In the literature, YOLOv7 based methods have not been used for waste detection. The mAPs of YOLOv7 and other models in this experiment are shown in Figure 6.

As can be seen from the figure, the YOLOv7 model gives better results compared to. other models. The effect of YOLOv7 model on waste recognition is shown in the Figure 7.

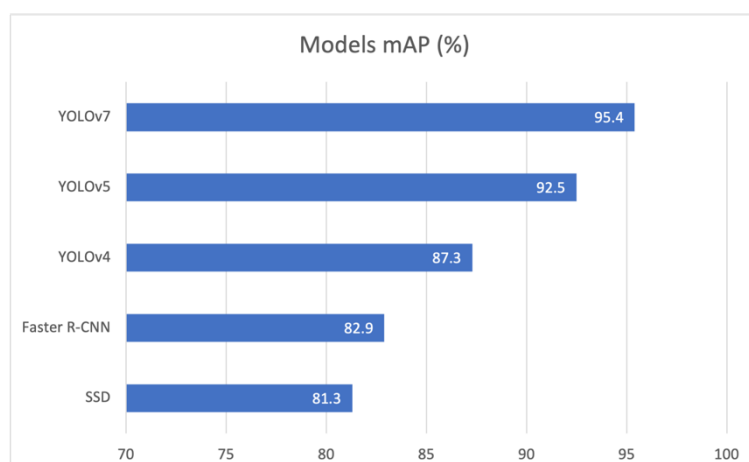


Figure 6. mAP of Models

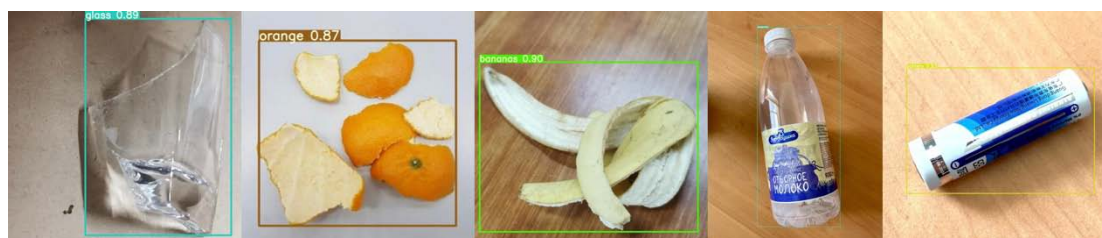


Figure 7. Model recognition effect

## Conclusion

This paper studies a visual detection system based on the YOLOv7 model for domestic waste classification, predicts the input image, and completes the classification of domestic waste at high speed and accurately. The experimental results show that the system can basically meet the actual needs.

## References

1. Wei Xiaoxiao, Wang Xiaoming, Li Lei, et al. Temporal and spatial characteristics of municipal solid waste generation and treatment in China from 1979 to 2016[J] // China Environmental Science. 2018. № 38(10). P. 3833–3843.
2. Bonifazi G., Capobianco G., Serranti S. A hierarchical classification approach for recognition of low-density (LDPE) and high-density polyethylene (HDPE) in mixed plastic waste based on short-wave infrared (SWIR) hyperspectral imaging[J]. SpeRWC Mochimica Acta Part A Molecular & Biomolecular SpeRWC Moscopy, 2018: S1386142518301975.
3. A S P G , B S H , A A T . Multi-material classification of dry recyclables from municipal solid waste based on thermal imaging[J] // Waste Management. 2017. № 70. P. 13–21.
4. Girshick, R., Donahue, J., Darrell, T., & Malik, J. Rich feature hierarchies for accurate

- object detection and semantic segmentation // Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition. 2014. P. 580–587.
5. Ren S, He K, Girshick R, et al. Faster R-CNN: Towards Real-Time Object Detection with Region Proposal Networks[J] // IEEE Transactions on Pattern Analysis & Machine Intelligence, 2017. № 39(6). P. 1137–1149.
  6. He, K., Gkioxari, G., Dollár, P., & Girshick, R. Mask r-cnn // In Proceedings of the IEEE international conference on computer vision. 2017. P. 2961–2969.
  7. Redmon, J., Divvala, S., Girshick, R., & Farhadi, A. You only look once: Unified, real-time object detection // In Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition. 2016. P. 779–788.
  8. Liu, W., Anguelov, D., Erhan, D., Szegedy, C., Reed, S., Fu, C. Y., & Berg, A. C. (2016, October). Ssd: Single shot multibox detector. In European conference on computer vision (p. 21–37). Springer, Cham.
  9. Wang, Chien-Yao, Alexey Bochkovskiy, and Hong-Yuan Mark Liao. "YOLOv7: Trainable bag-of-freebies sets new state-of-the-art for real-time object detectors". 2022, arXiv preprint arXiv:2207.02696.

# SMALL OBJECT DETECTION ALGORITHM BASED ON YOLOV5 AND ATTENTION MODEL

Yuandong Yao<sup>1</sup>, Sergey Ablameyko<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Belarusian State University, 4, Nezavisimosti av., Minsk, 220050, Belarus,  
farawayeast@qq.com*

<sup>2</sup>*United Institute of Informatics Problems of the National Academy of Sciences of  
Belarus, 6, Surganova str., Minsk, 220012, Belarus, ablameyko@bsu.by*

In order to solve the problems of small object and dense object in complex environment in object detection, such as low amount of object feature information, difficult positioning, false detection and missed detection, this paper proposes a YOLOv5 detection method with optimizes clustering and introduces CBAM attention mechanism. It improves the object feature extraction ability of the algorithm backbone network and captures small object features more accurately. The self-built helmet dataset is used for training and comparison experiments. The experimental results show that the algorithm has improved accuracy and speed, and has strong real-time performance.

**Keyword:** small object detection; clustering algorithm; attention mechanism.

## Introduction

Small object detection is a difficult problem for a long time, which aims to accurately detect small objects with few visible features in images. In real scenarios, due to the large number of small objects, small object detection has broad application prospects and plays an important role in many fields such as autonomous driving, smart medical care, defect detection, and aerial image analysis. Relative to regular-sized objects, small objects usually lack sufficient appearance information, making it difficult to distinguish them from background or similar objects.

Convolution neural networks are widely used for small object detection. CNN-based detectors mostly adopt two architectures: one-stage architecture represented by SSD and YOLO series and two-stage architecture represented by the faster RCNN series and its improved version. In the object-detection tasks with a high requirement for reasoning performance but a low requirement for detection performance, the one-stage detector architecture is preferred [1].

On the object detection public dataset MS COCO [2], there is a significant gap between the detection performance of small objects and large objects. It can be seen that small object detection is still full of challenges, such as few available features,

high positioning accuracy requirements, small proportion of small objects in existing dataset, and small object aggregation.

This paper is intended to extend possibilities of one-stage architecture and we selected YOLOv5 [3] as the basic CNN. We improved the YOLOv5 detection algorithm to achieve better results in small object and dense object detection. Compared with traditional detection methods, the algorithm has improved accuracy and speed, and has strong real-time performance, but there are still shortcomings in the detection of small objects and dense objects.

## **1. Dataset**

This paper collected a total of 12,314 images by autonomous collection. It includes large-scale objects (object pixel area exceeds  $96\times 96$ ), medium-scale objects (object pixel area is between  $32\times 32$  to  $96\times 96$ ), small-scale objects (object pixel area is less than  $32\times 32$ ) and dense helmets image of object (including objects at multiple scales). There are about 6800 images with helmet and about 5200 images without helmet, and the number of objects exceeds 80,000.

## **2. YOLOv5 and attention model**

YOLOv5 algorithm uses Mosaic data augmentation at the input to optimize the dataset. Four original pictures in dataset are read each time, pictures are randomly scaled, flipped, changed color gamut and other operations, and then the changed pictures are joined together in four directions respectively. The backbone network of YOLOv5 model adopts Focus+CSP structure. Before picture enters the Backbone, it needs to go through the Focus structure to slice the picture. The slicing operation is shown in Fig.1, An image of size  $4\times 4\times 3$  is sliced into a  $2\times 2\times 12$  feature map.

In the YOLOv5s model, the size of the original graph was  $608\times 608\times 3$ , which became  $304\times 304\times 12$  after the slicing operation. After through a convolution with a 32 convolution kernel, the size of the feature graph became  $304\times 304\times 32$ . After adding the SPP module to the CSP module, the multi-scale maximum pooling layer greatly improves the receptive field, reduces the possibility of information loss caused by directly scaling the image, and improves the model accuracy. The network structure of YOLOv5 draws on the design idea of CSPNet [4], add the CSP structure to the network. The backbone network uses CSP1\_X structure, and Neck uses CSP2\_X structure.

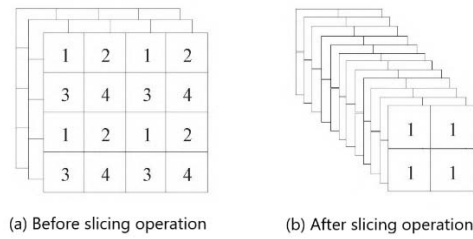


Fig.1. – Slicing operation

The Attention Model [5], first introduced in 2015 for machine translation, has become a predominant topic in the literature on neural networks. Attention models have become extremely popular in the artificial intelligence community as an important component of neural architectures for a large number of computer vision applications [6].

Attention models are methods of processing input data of neural networks that allow the network to focus one at a time on each of the parts of complex inputs until the entire dataset is categorized. The goal is to break down complex tasks into smaller areas of attention, which are processed sequentially, just as the human mind solves a new problem by dividing it into simpler tasks and solving them one by one. The mechanism of the attention model is trained during network training and should help the network focus on the key elements of the image. Architecture of Convolution Block Attention Module is shown in Fig. 2.

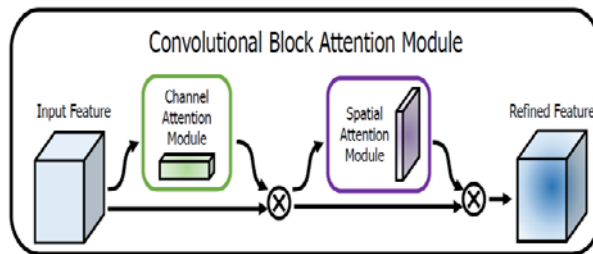


Fig.2. – CBAM structure

### 3. The proposed algorithm

Based on the YOLOv5 we propose the following algorithm to detect small objects. The object box is optimized by the improved DPC density peak clustering algorithm and introduce CBAM attention mechanism.

Rodrigunz et al. [7] proposed a clustering algorithm DPC based on fast search and find of density peaks, which can effectively solve the problem of K-means clustering algorithm. Xue Xiaona et al. [8] proposed the IDPCA clustering algorithm in view of the shortcomings of the DPC algorithm. When the density



difference of the dataset is large, the local density  $\rho$  and the minimum distance  $\delta$  between this point and other points with higher density in the DPC algorithm cannot cope with complex density differences. DPC algorithm has a domino effect on the allocation strategy of the remaining points, which will lead to error propagation. In this experiment, IDPCA density peak clustering algorithm is used to cluster object boxes. IDPCA clustering selects cluster centers according to the following steps:

(1) Calculate the local density  $\rho_i$  of each point  $x_i$  and the minimum distance  $\delta_i$  between this point and other points with higher density, the formula is

$$\rho_i = \sum_j e^{-\frac{1}{r}(\frac{d_{ij}}{\sigma})^2} \quad (1)$$

$$\delta_i = \min_{j:\rho_j>\rho_i} d_{ij} \quad (2)$$

in equation (1) (2):  $\sigma$  is 2% of the amount of data;  $d_{ij}$  is the distance between point  $x_i$  and point  $x_j$ ;  $r$  is the similarity coefficient, if the value is larger, points that are closer to point  $x_i$  have more weight  $\rho_i$ .

(2) Obtain  $m$  cluster centers through the  $\gamma$  decision diagram, where  $\gamma = \rho\delta$ ;

(3) Extract the core points, and use the global search allocation strategy to classify the classification points. The way to extract the core points is to calculate the average distance  $u_m$  between all points in the local class  $C_m$  and the class center  $cen_m$ , The calculation formula of  $u_m$  is shown in equation (3). If  $x_i \in C_m$  is in the  $\epsilon u_m$  neighborhood of  $cen_m$ , then  $x_i$  is the core point, separation threshold  $\epsilon = N\%$ ,  $N$  is the number of datasets;

$$u_m = \frac{1}{|C_m|} \sum_{i=1}^{|C_m|} d_{im}^{cen_m} \quad (3)$$

(4) Using statistical learning strategy to assign the remaining points;

(5) The last unprocessed point can be regarded as a noise point, which is classified into to the class of its nearest neighbor.

The IDPCA clustering algorithm analyzes the bounding box of the marked helmet, and generates multiple a priori box sizes of different sizes, so that the matching degree between the a priori box and the actual box is higher, thereby improving the accuracy of object detection. The size of the prior frame based on IDPCA clustering algorithm used in experiment is shown in Table 1, the size of the

prior frame based on the K-means clustering algorithm is shown in Table 2.

Table 1 Prior box size based on IDPCA clustering algorithm

| object type   | priori box size        |
|---------------|------------------------|
| small object  | 55,23,33,46,80,36      |
| medium object | 62,70,147,59,137,91    |
| big object    | 92,170,250,103,167,165 |

Table 2 Prior box size based on K-means clustering algorithm

| object type   | priori box size        |
|---------------|------------------------|
| small object  | 54,23,32,42,78,35      |
| medium object | 58,69,152,60,135,90    |
| big object    | 80,202,158,166,175,100 |

The architecture of the channel attention module is shown in Fig.3, at input of the input feature map  $F$  ( $F \in R^{C \times H \times W}$ ), after average pooling and max pooling, the feature map of size  $C \times H \times W$  become  $C \times 1 \times 1$ , and then send them into the neural network MLP. The number of neurons in the first layer is  $C/r$ ,  $r$  is the decline rate, the activation function is Relu, the number of neurons in the second layer is  $C$ , add the results after completion, and then through a Sigmoid function to get the weight coefficient  $M_c$ , calculation method of the weight coefficient is shown in equation (4), and then multiplied by the original input, the new feature after scaling can be obtained.

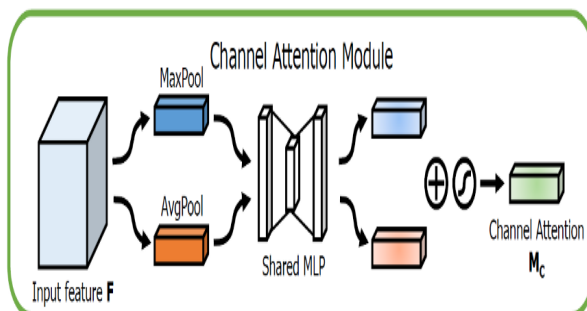


Fig.3. – Channel attention module structure

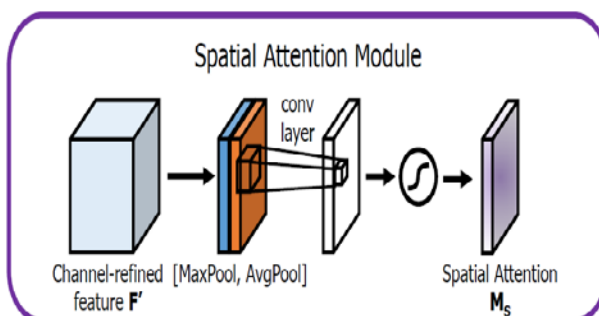


Fig.4. – Spatial attention module structure

$$M_c(F) = \sigma[W_1(W_0(F_{avg}^C)) + W_1(W_0(F_{max}^C))] \quad (4)$$

in equation (4):  $\sigma$  represents the Sigmoid function; avg represents the global average pooling; max represents the maximum pooling;  $W_0 \in R^{C \times \frac{C}{r}; F_{avg}^C}$  represents the average pooling feature of size  $1 \times 1 \times C$ ;  $F_{max}^C$  represents a max-pooled feature of size  $1 \times 1 \times C$ .

The architecture of the spatial attention module is shown in Fig.4. The results obtained in the previous step are divided into two channel descriptions with a size of  $1 \times H \times W$  through maximum pooling and average pooling, and then the tensors are stacked together through the connection operation, get the weight coefficient  $M_s$  through the convolution operation and a Sigmoid. The calculation method of the weight coefficient is shown in equation (5). Finally, multiply the input of the previous step by the weight coefficient to obtain the new feature after scaling, and complete the spatial attention operation.

$$M_s(F) = \sigma(f^{7*7}([F_{avg}^S; F_{max}^S])) \quad (5)$$

in equation (5): avg represents global average pooling; max represents maximum pooling,  $f^{7*7}$  represents a 7\*7 convolution,  $\sigma$  represents sigmoid function,  $F_{avg}^S$  represents average pooling feature, size is  $1 \times H \times W$ ,  $F_{max}^S$  represents Max pooling features, size is  $1 \times H \times W$ .

The attention mechanism of CBAM is mainly added to the backbone network. In the new version of YOLOv5s model, the BottleneckCSP module is converted into a C3 module. Therefore, we chose to combine the C3 module in Backbone with the attention mechanism and improve it into CBAMC3 module.

Our algorithm is YOLOv5+CBAM+IDPCA. The advantage of the IDPCA algorithm is that it provides a local density calculation method suitable for any dataset, as well as two different residual point allocation strategies, which not only reduces the error propagation, but also effectively improves the clustering efficiency. The advantage of the CBAM attention module is that it can be used with any CNN structure without adding extra consumption and achieves end-to-end training.

#### 4. Experimental results

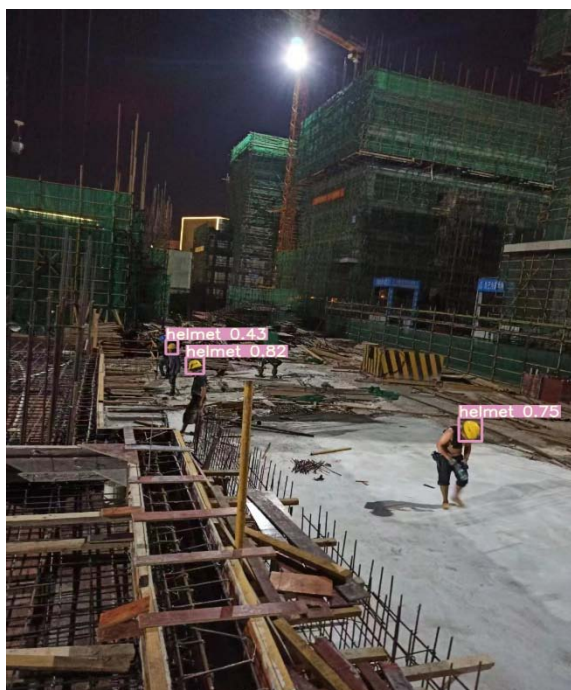
In this experiment, epochs = 200, batch\_size = 32, use Warmup method to warm up the learning rate. In the Warmup stage, one-dimensional linear interpolation is used to update the learning rate of each iteration, and after the Warmup stage, the cosine annealing algorithm is used to update the learning rate.

The performance changes caused by network structure changes are gradually verified through ablation experiments. The ablation experiments are divided into test parts such as YOLOv5 + CBAM, YOLOv5 + IDPCA, YOLOv5, and our algorithm. The evaluation indicators P, R, mAP@0.5, mAP@0.5:0.95. The experimental data are shown in Table 3.

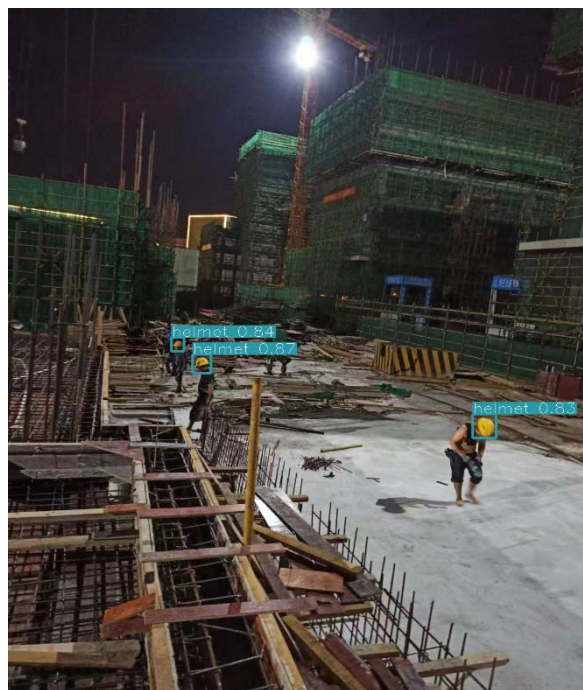
Table 3 Analysis of experimental results

| Model         | Precision | Recall   | mAP@0.5  | mAP@0.5:0.95 |
|---------------|-----------|----------|----------|--------------|
| YOLOv5        | 96.50%    | 94.21%   | 96.05%   | 73.42%       |
| YOLOv5+I      | 96.91%    | 95.35%   | 96.65%   | 75.09%       |
| DPCA          | (+0.41%)  | (+1.14%) | (+0.60%) | (+1.67%)     |
| YOLOv5+C      | 96.70%    | 94.86%   | 96.50%   | 74.91%       |
| BAM           | (+0.20%)  | (+0.65%) | (+0.45)  | (+1.49%)     |
| Our algorithm | 98.14%    | 95.80%   | 97.56%   | 76.68%       |
|               | (+1.64%)  | (+1.59%) | (+1.51%) | (+3.26%)     |

The comparison of detection accuracy between our algorithm and YOLOv5 is shown in Fig.6. The experiment proves that the improved model has greatly improved the detection accuracy of small objects such as helmets. In some scenes where the environment is complex and the object is not easy to find, the improvement effect is particularly obvious, which basically meets the speed and accuracy requirements of helmet detection in the construction area.



(a) YOLOv5



(b) Our algorithm

Fig.6.– Detection accuracy comparison

## Conclusion

Aiming the problems of small objects occupying a small number of pixels, inconspicuous features, and difficulty in distinguishing from the background in object detection, this paper proposes a modified YOLOv5 detection algorithm that optimizes clustering and introduces CBAM. The improved DPC density peak clustering algorithm is used to optimize the size of the prior frame, so that the matching degree between the prior frame and the actual frame size is higher, thereby improving the accuracy of object detection. In addition, the C3 module in the backbone network is combined with the CBAM attention mechanism to improve the model's ability to capture object features and solve the problem that the YOLOv5 algorithm is not good for small object detection.

## References

1. Fu Y, Li X, Hu Z. Small-Target Complex-Scene Detection Method Based on Information Interworking High-Resolution Network. *Sensors (Basel)*. 2021 Jul 28. № 21(15). P. 5103. doi: 10.3390/s21155103. PMID: 34372339; PMCID: PMC8348926.
2. Lin T Y, Maire M, Belongie S, et al. Microsoft coco: Common objects in context[C] // *European conference on computer vision*. Springer, Cham, 2014. P. 740–755.
3. Ultralytics.YOLOv5[EB/OL]. (2020–05–18)[2021–08–12].<https://github.com/ultralytics/yolov5>.
4. Wang C Y, Liao H Y M, Wu Y H, et al. CSPNet: A new backbone that can enhance learning capability of CNN[C] // *Proceedings of the IEEE/CVF conference on computer vision and pattern recognition workshops*. 2020. P. 390–391.
5. Woo S, Park J, Lee J Y, et al. Cbam: Convolutional block attention module[C] // *Proceedings of the European conference on computer vision (ECCV)*. 2018. P. 3–19.
6. Feng Wang and David MJ Tax. 2016. Survey on the attention based RNN model and its applications in computer vision. arXiv preprint arXiv:1601.06823.
7. Rodriguez A, Laio A. Clustering by fast search and find of density peaks [J] // *Science*, 2014. № 344(6191). P. 1492–1496.
8. Xie X N, Gao S P, Wu H H. Improved density peak clustering algorithm combining K-nearest neighbors [J][J] // *Computer Engineering and Applications*, 2018. № 54(7). P. 36–43.

## ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ПЕРФОРАЦИЙ КОРОНАРНЫХ АРТЕРИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

М.С. Абрамович<sup>1</sup>, В.И. Стельмашок<sup>2</sup>, Г.С. Дорофеев<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Научно-исследовательский институт прикладных проблем математики и информатики, Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь, [abramovichms@bsu.by](mailto:abramovichms@bsu.by)

<sup>2</sup>Республиканский научно-практический центр «Кардиология», ул. Розы Люксембург, 110Б, 220036, г. Минск, Беларусь, [stelval@yandex.by](mailto:stelval@yandex.by)

Рассматривается проблема прогнозирования перфорации коронарных артерий при рентгенэндоваскулярных операциях. На обучающей выборке, состоящей из групп пациентов успешно прооперированных и прооперированных с перфорациями коронарных артерий, с использованием точного критерия Фишера отобраны два набора информативных признаков. Предложена процедура устранения дисбаланса классов обучающей выборки. В качестве классификаторов использовались алгоритмы машинного обучения и ансамбли алгоритмов.

**Ключевые слова:** Коронарная артерия; перфорация; критерий Фишера; дисбаланс классов; машинное обучение; ROC-анализ.

## PREDICTION OF CORONARY ARTERY PERFORATIONS USING MACHINE LEARNING METHODS

M.S. Abramovich<sup>1</sup>, V.I. Stelmashok<sup>2</sup>, G.S. Dorofeev<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Research Institute for Applied Problems of Mathematics and Informatics, Belarusian State University, 4 Niezalieznasci Avenue, Minsk, 220030, Belarus

<sup>2</sup>Republican Scientific and Practical Center «Cardiology», st. Rozy Luksemburg, 110B, Minsk, 220036, Belarus.

Corresponding author: [abramovichms@bsu.by](mailto:abramovichms@bsu.by)

In this work we study the problem of predicting whether coronary artery perforation will take place as a result of rentgen-endovascular surgery. The training set consists of the patients who were successfully operated on and the patients who ended up having coronary artery perforation. We used Fisher's exact test to select two sets of informative features. We proposed a procedure for handling class imbalance problem. Machine learning algorithms and ensemble methods were used as classifiers.

**Keywords:** Coronary artery; perforation; Fisher's exact test; class imbalance; machine learning; ROC-analysis.

## **Введение**

Успешное восстановление кровотока в хронически окклюзированной коронарной артерии рентгенэндоваскулярными способами позволяет улучшить качество жизни и прогноз у оперируемых пациентов [1]. Вместе с тем проведение подобных вмешательств нередко ассоциируется с развитием осложнений, наиболее тяжелым из которых является перфорация стенки коронарного сосуда. В связи с этим представляется целесообразным разработать систему прогнозирования риска развития перфораций в ходе выполнения оперативного вмешательства. Это позволит предотвратить данные осложнения.

Отметим что при этом количество пациентов с перфорацией коронарных артерий существенно меньше, чем без перфорации. Поэтому проводилось устранение дисбаланса классов обучающей выборки с использованием методов увеличения класса меньшего объема (oversampling) и уменьшения класса большего объема (undersampling).

Прогнозирование (классификация) перфораций коронарных артерий пациентов проводилась с использованием следующих методов машинного обучения: логистической регрессии, метода опорных векторов, метода  $k$  - ближайших соседей, случайного леса и градиентного бустинга. Проводился также подбор гиперпараметров алгоритмов классификации, обеспечивающих максимальную точность классификации пациентов.

### **1. Методология исследования / теоретические основы**

В ходе детального ретроспективного изучения ангиограмм включенных в исследование пациентов выполнялась оценка развития перфорации стенки коронарной артерии в соответствии с критериями, предложенными в работе [2]. В зависимости от наличия, либо отсутствия возникновения отмеченного осложнения в ходе антеградного проведения коронарного проводника через зону хронического окклюзионного поражения, все пациенты были разделены на 2 группы: лица у которых была зарегистрирована перфорация – 28 пациентов (миноритарный класс), у которых не было отмечено данного осложнения – 369 пациентов (мажоритарный класс).

Последующий этап анализа включал определение перечня потенциальных предикторов, влияющих на развитие перфорации коронарной артерии в ходе процедуры реканализации хронических тотальных окклюзий антеградным доступом. К таким были отнесены клинικο-демографические показатели, рентгенанатомические и рентгенморфологические показатели, характеризующие пораженную артерию, а также процедурные аспекты выполняемой операции.

Отбор информативных признаков проводился с использованием фильтрационного теста – точного критерия Фишера [3]. Выбор данного теста бы обусловлен фактом наличия ожидаемой частоты значений хотя бы в одной из ячеек таблицы 22 менее 10% (что нередко встречается в малых выборках). Таким образом, для всех бинарных признаков сравнивались частоты групп с возникшей и не возникшей перфорацией в ходе реканализации хронических тотальных окклюзий. Было сформировано два набора информативных признаков. В первый набор включались те показатели, которые имели существенное различие на уровне значимости не менее чем 0.05, а во второй набор – на уровне значимости не менее чем 0.2. В первом наборе оказалось 10 показателей, во втором – 37.

Для обучения и тестирования модели был использован метод скользящего экзамена (leave one out). Модель обучается на всех наблюдениях, кроме одного, и выдает предсказание для этого наблюдения. Учитывая наличие истинных меток пациентов, можно вычислять различные метрики машинного обучения, такие как точность, полнота и f1-мера [4]. При этом каждый раз обучение происходит почти на всей выборке, а оценка эффективности модели на тесте более надежна, чем в случае одинарного разбиения на обучающую и тестовую выборки. Если используется метод oversampling, то необходимо убедиться в том, что на кросс-валидации синтетические объекты ни разу не попадут в тестовую выборку. Иначе полученная оценка может быть завышенной. Таким образом, кросс-валидация проводится только на оригинальных объектах.

Далее для устранения дисбаланса классов применялся метод undersampling в комбинации с методом oversampling. В качестве метода oversampling был применен алгоритм SMOTE [5]. В качестве метода undersampling использовался алгоритм Edited Near Neighbors [6]. Его суть заключается в следующем: для каждого объекта алгоритм  $k$ -ближайших соседей (KNN) пытается определить метку класса. Если объект принадлежит мажоритарному классу, а алгоритм KNN ошибается и присваивает метку миноритарного, то объект удаляется из выборки. Если объект принадлежит миноритарному классу и алгоритм KNN ошибается, то удаляются наблюдения мажоритарного класса, являющиеся соседями объекта. После этой процедуры для первого набора информативных признаков из 369 объектов мажоритарного класса осталось 273. После применения алгоритма SMOTE количество объектов миноритарного класса тоже стало 273. Кросс-валидация по отдельным объектам проводилась только для оригинальных объектов (273 мажоритарного класса и 28 миноритарного).

Кроме этого проводилась кросс-валидация для подбора параметров модели, обеспечивающих наибольшую точность классификации.



## Результаты и их обсуждение

В таблице 1 представлены метрики точности классификации на кросс-валидации по отдельным объектам для первого набора информативных признаков.

Таблица 1 – Метрики точности классификации для первого набора информативных признаков

| Метод машинного обучения     | Точность | Полнота | F1-мера | Показатель ROC-AUC |
|------------------------------|----------|---------|---------|--------------------|
| Случайный лес                | 0.34     | 0.79    | 0.48    | 0.92               |
| Логистическая регрессия      | 0.30     | 0.75    | 0.43    | 0.87               |
| Метод $k$ -ближайших соседей | 0.67     | 0.71    | 0.69    | 0.83               |
| Метод опорных векторов       | 0.73     | 0.79    | 0.70    | 0.93               |
| Градиентный бустинг          | 0.42     | 0.79    | 0.55    | 0.91               |

Как следует из таблицы 1, наибольшая точность классификации была достигнута методом опорных векторов.

При отборе признаков с помощью точного критерия Фишера, изменение уровня значимости влияет на количество признаков, которое будет отобрано для обучения и чем больше уровень значимости, тем больше признаков будет отобрано. Необходимо найти баланс между недообучением модели с одной стороны и переобучением с другой.

Так как набор данных небольшой, то необходимо, чтобы при применении метода *undersampling*, из выборки удалялось минимальное количество наблюдений. Если это требование удовлетворяется, а метрики качества становятся лучше, то предполагается, что удаленные наблюдения были шумовыми, и их удаление поспособствовало лучшей классификации. Для второго набора информативных признаков лучшей оказалась следующая конфигурация: алгоритм *undersampling*, количество ближайших соседей равно 2, алгоритм *oversampling SMOTE*, количество наблюдений мажоритарного класса равно 286.

В таблице 2 представлены метрики точности классификации на кросс-валидации по отдельным объектам для второго набора информативных признаков.

Таблица 2 – Метрики точности классификации для второго набора информативных признаков

| Метод машинного обучения     | Точность | Полнота | F1-мера | Показатель ROC-AUC |
|------------------------------|----------|---------|---------|--------------------|
| Случайный лес                | 0.57     | 0.86    | 0.69    | 0.94               |
| Логистическая регрессия      | 0.34     | 0.46    | 0.39    | 0.86               |
| Метод $k$ -ближайших соседей | 0.87     | 0.93    | 0.90    | 0.96               |
| Метод опорных векторов       | 0.79     | 0.79    | 0.79    | 0.96               |
| Градиентный бустинг          | 0.75     | 0.86    | 0.80    | 0.93               |

Как следует из таблицы 2, метод  $k$ -ближайших соседей показал наибольшую точность классификации.

Таким образом, полученные результаты показывают, что даже в условиях существенного дисбаланса классов обучающей выборки, удалось для некоторых алгоритмов добиться большой точности прогнозирования риска развития перфораций в ходе выполнения оперативного вмешательства на коронарных артериях.

### **Библиографические ссылки**

1. Patel Y., Depta J., De Martini T. Complications of chronic total occlusion percutaneous coronary intervention // *Intervention Cardiology*. 2013. Vol. 5, № 5. P. 567–575.
2. Ellis S. G. Increased coronary perforation in new device era. Incidence, classification, management and outcome // *Circulation*. 1994. Vol. 90, № 6. P. 2725–2730.
3. Afifi A. A., Azen S. P. *Statistical analysis: A Computer Oriented Approach*, 2nded. New York: Academic Press, 1979. 442 p.
4. Harrington P. *Machine Learning in Action*. New York: Manning. 2012. 382 p.
5. Chawla N., Bowyer K., Hall L., Kegelmeyer W. SMOTE: Synthetic Minority Over-sampling Technique // *Journal of Artificial Intelligence Research*. 2002. № 16. P. 341–378.
6. Wilson L. Asymptotic Properties of Nearest Neighbor Rules Using Edited Data // *IEEE Transactions on Systems*. 1992. Vol. SMC-2, № 3. P. 34–42.

## ПОСТРОЕНИЕ ТРЁХМЕРНЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ РАСПОЗНАВАНИЯ КЛЮЧЕВЫХ ТОЧЕК

**Н.А. Аксёнова, А.В. Воруев, О.М. Демиденко**

*Гомельский государственный университет имени Ф. Скорины  
ул. Советская 104, Гомель, Беларусь  
nataliaksen@gmail.com, varuyeu@gmail.com, demidenko@gsu.by*

В статье описывается способ построения трехмерных структур с использованием технологии компьютерного зрения, позволяющий автоматизировать процесс 3D-моделирования объектов. На основе распознанных ключевых точек архитектурных планов двумерное изображение реконструируется в соответствующую ему трехмерную структуру. Разработан модуль предварительной обработки изображений и нахождения особых точек углов на языке программирования Python. Приведена апробация работы модуля.

**Ключевые слова:** распознавание образов; 3D-моделирование; особые точки; компьютерное зрение; Blender; Python; OpenCV.

## CONSTRUCTION OF THREE-DIMENSIONAL STRUCTURES BASED ON KEY POINT RECOGNITION

**N. A. Aksionova, A.V. Varuyeu, O.M. Demidenko**

*F. Skorina Gomel State University, Sovetskaya str, 104, Gomel, Belarus  
nataliaksen@gmail.com, varuyeu@gmail.com, demidenko@gsu.by*

The article describes a method for constructing three-dimensional structures using computer vision technology, which makes it possible to automate the process of three-dimensional modeling of objects. Based on the recognized key points of the architectural plans, the 2D image is reconstructed into the corresponding 3D structure. A module for pre-processing images and finding singular points of corners in the Python programming language has been developed. The module is tested.

**Keywords:** pattern recognition; 3D modeling; feature points; computer vision; Blender; Python; OpenCV.

### **Введение**

Современный уровень развития программного обеспечения и информационных технологий позволяют представить окружающую нас действительность в формате 3D-моделирования. Технология дополненной реальности позволяет накладывать на объекты действительности цифровые прототипы в режиме реального времени. Одной из наиболее востребованных сфер развития технологии дополненной реальности

является сфера дизайна и архитектуры. Анализ международного опыта по архитектурной визуализации показал, что в большей степени системы дополненной реальности ориентированы на описание и отображение 3D-моделей зданий, сооружений и объектов строительства. В тоже время вопрос о необходимости автоматизации процесса 3D-моделирования остаётся дискуссионным.

Приложения с технологией дополненной реальности создаются для каждого проекта путём включения существующих 3D-моделей с использованием стандартных форматов файлов, таких как fbx, 3ds, obj. Цифровые 3D-объекты отображаются в реальном времени, однако их подготовка и реализация в редакторах 3D-графики занимает немало времени. Таким образом, поиск методов по автоматизации процесса построения трёхмерных структур с применением элементов машинного зрения является актуальным для решения основной проблемы 3D-моделирования.

Blender представляет собой программный комплекс для трёхмерного моделирования объектов с открытым исходным кодом. На уровень полноценного средства моделирования, сопоставимого по возможностям с MathLab и ему подобными, Blender выводит поддержка интерпретируемого им языка программирования Python. Blender API (Application Programming Interface) Python упрощает процесс создания дополнительных модулей, позволяющих расширить функциональность среды.

Таким образом, благодаря вышеприведённому набору характеристик Blender может быть использован в качестве универсальной программной среды для моделирования объектов и процессов естественно-научных исследований.

В статье предложен авторский вариант построения трёхмерных структур в Blender с использованием элементов машинного зрения. Приводится визуализация построенных моделей.

## **1. Методология исследования**

Для реализации системы дополненной реальности для архитектурных проектов был выбран метод определения характерных черт для входных изображений. Поскольку входная информация представляет собой план-схемы квартир, домов, зданий и т.п., то в качестве особенностей были выбраны изолированные точки, представляющие углы строений. Для обнаружения ключевых точек необходимо реализовать алгоритм компьютерного зрения. В качестве основных алгоритмов машинного зрения используются алгоритмы

обнаружения углов. В статье [1] данного исследования описана разработка детекторов углов Ши-Томази и Харриса на Python с использованием OpenCV, был представлен математический аппарат данных алгоритмов, проводился сравнительный анализ и тестирование (апробация) разработанных программных модулей. Проведенный сравнительный анализ детекторов углов в статье показал более эффективные результаты работы детектора Ши-Томази. Общая структура проекта была ранее представлена в статье [3].

Разработанный программный модуль «modelling-assistance» представляет собой надстройку для программного обеспечения для 3D-моделирования. Аддоны не могут быть запущены сами по себе, их необходимо импортировать в программу, поэтому этот модуль не содержит директории с бинарными файлами.

На входе – цифровое изображение заданного размера. Импорт изображения в Blender осуществляется после предварительной обработки. Для использования данного изображения рекомендуется удалить все текстовые обозначения, стрелки и условные обозначения. Наличие данной избыточной информации усложняет процесс распознавания.

Пусть  $x$  и  $y$  входные координаты изображения. Для преобразования точки отсчета необходимо преобразовать массив координат. Для этого необходимо знать размер  $S$  эталонного изображения. Следует также учесть, что эталонное изображение смещено относительно своего исходного положения на 50% по высоте и на 50% по ширине. Таким образом, точка отсчета автоматически располагается в центре изображения. Формула преобразований будет иметь вид:

$$f(x) = \frac{\left(\frac{x}{d_x} + O_x\right) \cdot S \cdot d_x}{\max(d_x, d_y)},$$

$$f(y) = \frac{\left(\frac{y}{d_y} + O_y\right) \cdot S \cdot d_y}{\max(d_x, d_y)},$$

где  $d_x$  и  $d_y$  размеры изображения в пикселях,  $O_x$  и  $O_y$  смещение изображения в процентах,  $S$  – размер эталонного изображения.[2]

При сопоставлении точки из 2D в 3D-пространство необходимо исключить значения, полученные функцией определения особых точек углов и сопоставить им нулевые координаты по  $Z$ . Таким образом будут получены координаты маркеров углов. Полученные координаты являются локальными. Следовательно, такие преобразования как перемещение, вращение или масштабирование будут не доступны. Данная проблема

может быть решена с помощью включения созданного объекта в родительский.

Этап 3D-моделирования должен завершиться экспортом файла 3D-модели в формате OBJ. Данный формат представляет собой текстовый файл со списком вершин и их координат, списком граней и ребер, соединяемых этими вершинами

На рисунке 1 представлена диаграмма последовательности действий для прецедента «Создание 3D-модели».

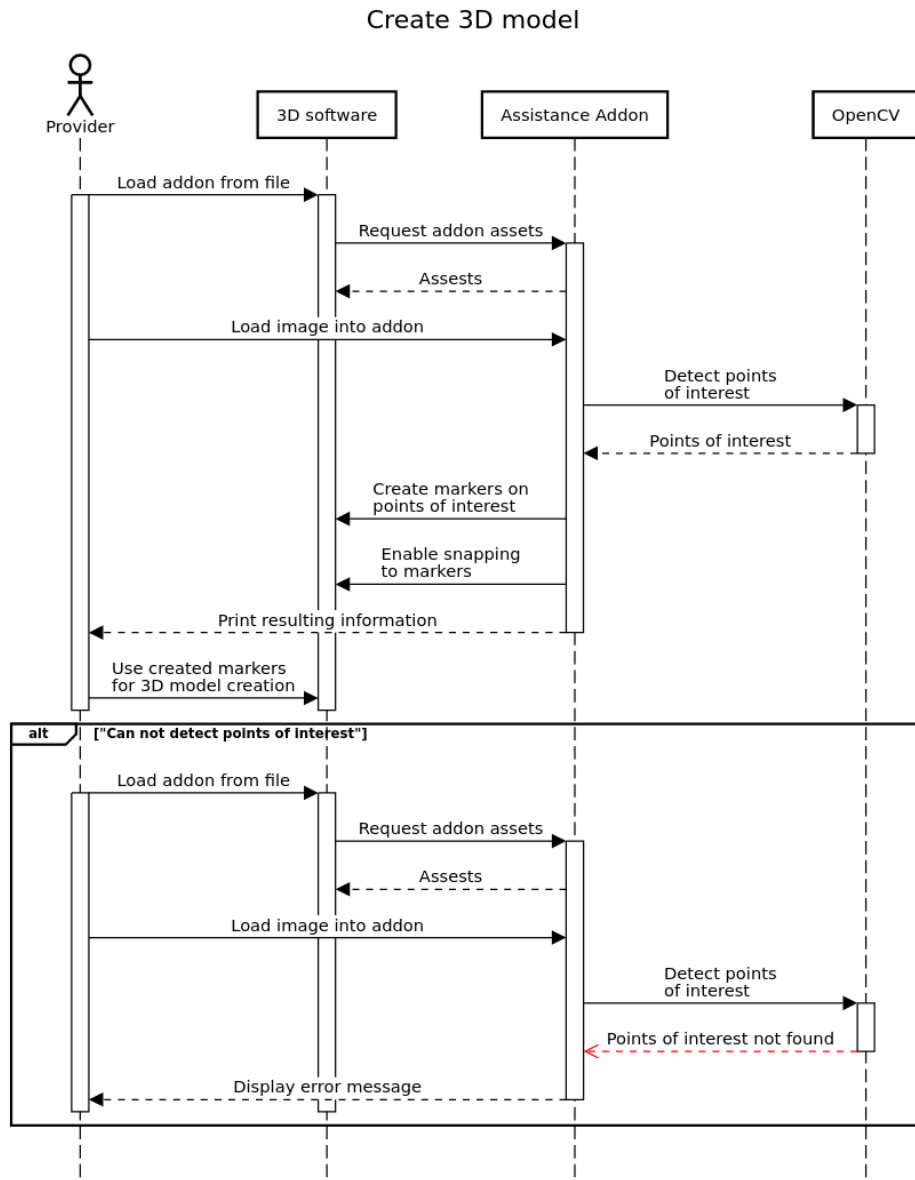


Рисунок 1 – Схема последовательности для прецедента «Создание 3D-модели»

## 2. Апробация работы модуля распознавания

Перед использованием дополнительного модуля необходимо проверить правильность настроек сцены в редакторе Blender. Запуск модуля предполагает, что сцена содержит импортированное эталонное изображение и данное изображение является активным.

Процесс инициализации программного модуля завершается отображением углов в виде точек поверх выбранного изображения, а также в нижней части экрана появляется диалоговое окно настройки параметров для распознавания (рисунок 2).

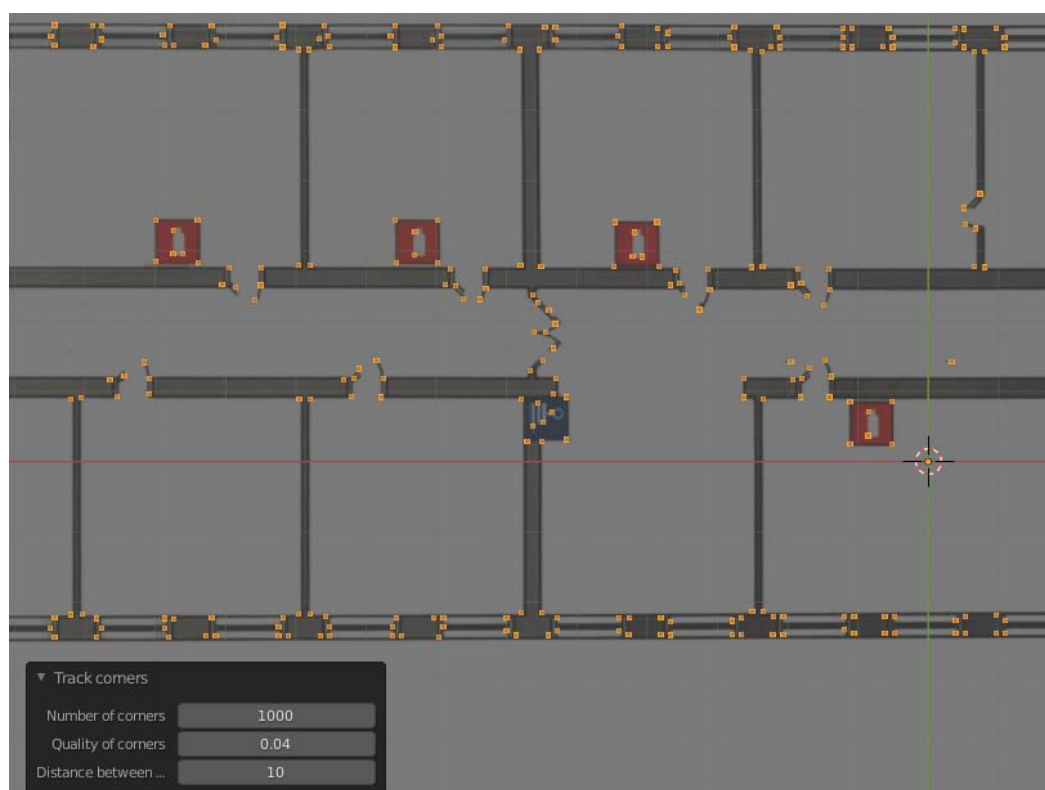


Рисунок 2 – Обнаруженные ключевые точки углов

Чтобы построить модель поверх набора обнаруженных точек, необходимо включить привязку вершин. Привязка вершин используется для облегчения экструзии вершин. Контур здания создается путем соединения углов. Это можно сделать, выбрав вершину, соответствующую углу, и выдавливая ее в другой угол. Если пользователь правильно выполнил все инструкции, результатом этих действий является контур здания (рисунок 3).

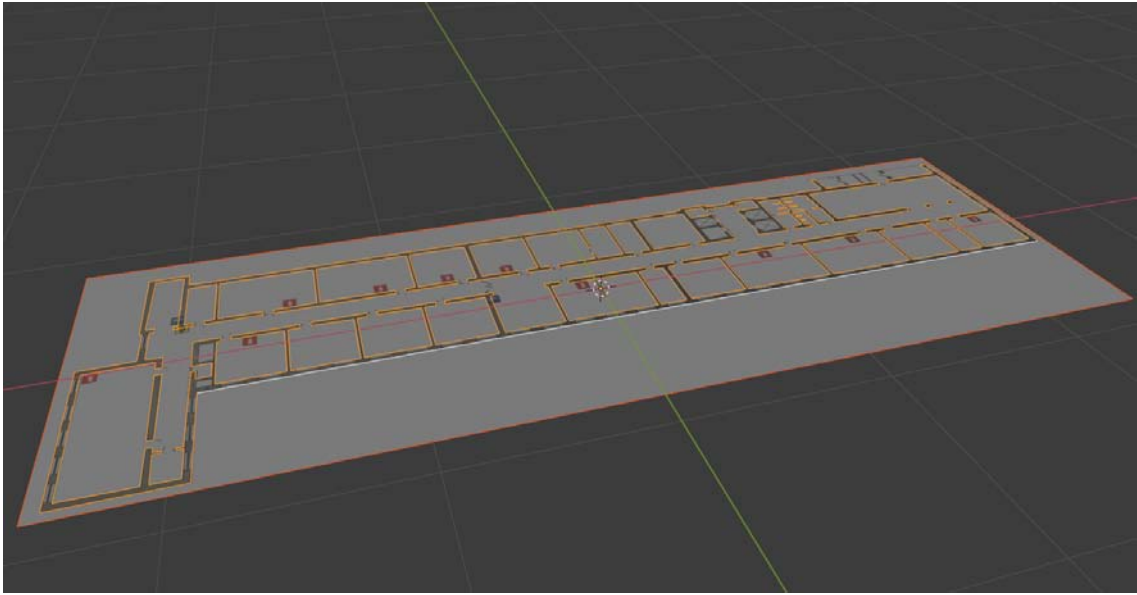


Рисунок 3 – Создание контура на основе ключевых точек

Следующим этапом необходимо использовать автоматическую триангуляцию, чтобы заполнить внутреннее пространство. Заполненный контур можно выдавить вверх, чтобы придать стене объем (рисунок 4).

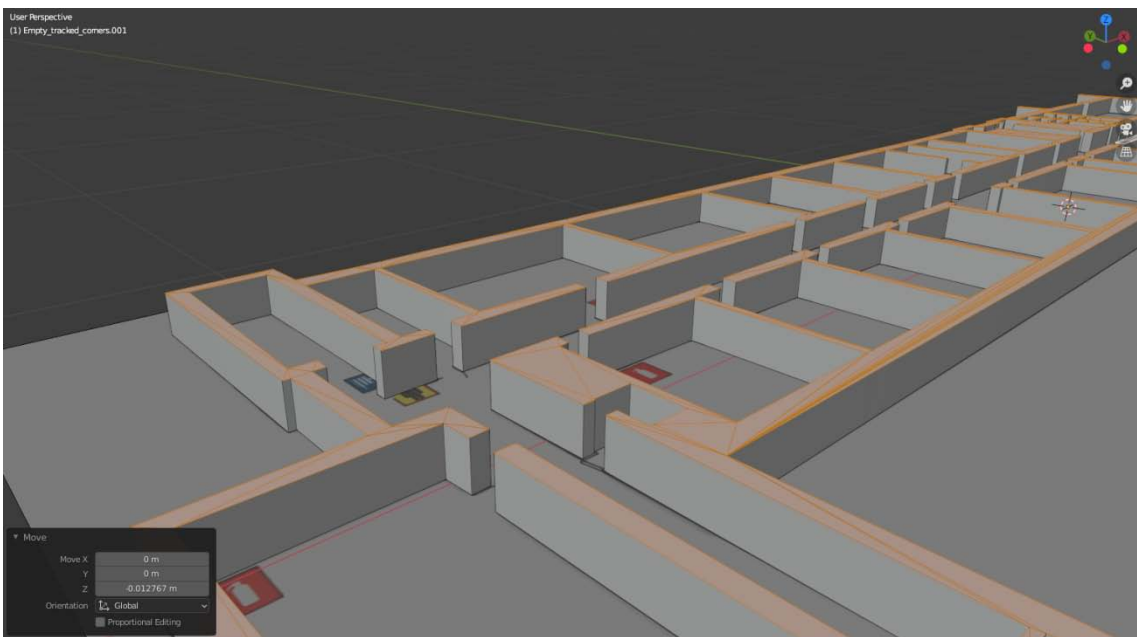


Рисунок 4 – Результат построения трехмерной структуры

## Заключение

В ходе разработки методов моделирования объектов в среде открытой программной платформы Blender была продемонстрирована её состоятельность в качестве инструмента, пригодного для решения задач моделирования трехмерных пространств с применением элементов



компьютерного зрения. При помощи программного модуля на Python с использованием Blender API был выполнен ряд типичных задач по автоматизированному поиску ключевых точек на изображениях архитектурных планов и построены 3D-модели объектов дополненной реальности. Полученные таким образом 3D-модели будут использованы при реализации информационной системы дополненной реальности.

### **Библиографические ссылки**

1. Demidenko O.M., Aksionova N.A. Development of a Machine Vision System for Image Recognition of Design Estimates // *Nonlinear Phenomena in Complex Systems*. Vol. 25, №. 2 (2022). P. 159–167. DOI: 10.33581/1561-4085-2022-25-2-159-167.
2. Demidenko O.M., Aksionova N.A., Varuyeu A.V., Kucharav A.I. 3D-modeling of Augmented Reality objects using Shi-Tomasi corner detection algorithms // *J. Phys. CS*. 2091, 2021. P. 012058. DOI:10.1088/1742-6596/2091/1/012058.
3. Аксёнова Н.А., Кучеров А.И. Разработка SDK для мобильного приложения с применением технологии дополненной реальности // *Известия Гомельского государственного университета имени Ф. Скорины*, 2021; № 3(126). С. 81–84.

## РАСПОЗНАВАНИЕ ЖЕСТОВЫХ КОМАНД НА ОСНОВЕ ИНСТРУМЕНТА MEDIAPIPE И НЕЙРОСЕТИ LSTM

Б. А. Ассанович<sup>1</sup>, Н. Н. Бич<sup>2</sup>, А.К. Пушкина<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Гродненский государственный университет имени Я Купалы, Ожешко, 22,  
230000, г. Гродно, Беларусь, bas@grsu.by

<sup>2</sup>Гродненский государственный университет имени Я Купалы, Ожешко, 22,  
230000, г. Гродно, Беларусь, [nadaliya@mail.ru](mailto:nadaliya@mail.ru)

<sup>3</sup>Гродненский государственный университет имени Я Купалы, Ожешко, 22,  
230000, г. Гродно, Беларусь, nadaliya@mail.ru

Представлена методика реализации распознавания жестовых команд в видеопотоке, основанная на выделении ключевых точек кистей рук с использованием инструмента MediaPipe и распознавании жестов за счет обучения и классификации на основе рекуррентной нейронной сети LSTM и позволившая достичь обученной модели около 90% на собственных данных.

**Ключевые слова:** Жестовые команды; ключевые точки; MediaPipe; LSTM.

## RECOGNITION OF GESTURE COMMANDS BASED ON MEDIAPIPE INSTRUMENT AND LSTM NEURAL NETWORK

B. B. Assanovich<sup>a</sup>, N.N. Bich<sup>b</sup>, A.K. Pushkina<sup>c</sup>

<sup>a</sup> Grodno State University named after Ya Kupala, Ozheshko, 22,  
230000, Grodno, Belarus, bas@grsu.by

<sup>b</sup> Grodno State University named after Ya Kupala, Ozheshko, 22,  
230000, Grodno, Belarus, nadaliya@mail.ru

<sup>c</sup> Grodno State University named after Ya Kupala, Ozheshko, 22,  
230000, Grodno, Belarus

Corresponding author: nadaliya@mail.ru

A technique for implementing the recognition of gesture commands in a video stream is presented, based on the selection of key points of the hands using the MediaPipe tool and gesture recognition through training and classification based on the LSTM recurrent neural network, which made it possible to achieve a trained model of about 90% on its own data.

**Keywords:** Gesture commands; key points; MediaPipe; LSTM.

### Введение

Жестовые команды находят широкое применение в системах управления. Существует ряд методик детектирование статических и динамических жестов на основе цветовых моделей. Однако, при изменении освеще-

щения возникают как пропуски фиксации жестов, так и неверная их идентификация.

Обзор литературных источников [1–11] по теме исследования показал, что программные алгоритмы, умеющие распознавать в видеопотоке человеческую ладонь с жестами и координировать ими, в настоящее время активны, но нуждаются в узконаправленном аппаратном обеспечении (мощных графических процессорах) или сложны в реализации как интерактивные программы для мобильных систем из-за ограничений платформ.

Целью данного исследования является разработка программного интерфейса НМІ (от англ. Human-Machine interface – интерфейс Человек-Машина) для распознавания жестов в видеопотоке для выполнения команд, согласно распознанному жесту.

Для достижения данной цели решались следующие задачи:

- изучение алгоритмов распознавания жестов, основанных на методах машинного обучения с использованием ключевых точек для распознавания кистей рук на изображении или с использованием самого изображения;

- разработка и реализация алгоритма и программного обеспечения для распознавания жестовых команд на основе следующих программных компонентов: Google Mediapipe Hands, numpy, pandas, matplotlib, seaborn, opencv2; Python; tensorflow/Keras и sklearn, рекуррентная нейронная сеть LSTM.

Новизна исследования заключается в использовании совокупности специализированных программных инструментов и библиотек для сбора данных и создании своего датасета жестов, использования интерполяции при пропусках жестов в кадрах, создание модели на основе нейросети, обучения ее и получения точности распознавания 89% на тестовой выборке.

## **1. Методология исследования / теоретические основы**

Алгоритм лежащий в основе инструмента Mediapipe выполняет обработку видеок кадров с найденными ключевыми точками кисти путем пересчета 2D координат проекции ладони руки в 3D координаты на основе предположения о виртуальной камере, в которой плоскость расположена на расстоянии  $Z=f$

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ 1 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} f & 0 & 0 & 0 \\ 0 & f & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где  $x, y$  координаты элементов плоского изображения, а  $X, Y, Z$  абсолютные 3D координаты камеры.

При известной матрице преобразования камеры вычисляются как значения координат ключевых точек, так и их тепловые карты, содержащие вероятности смещения этих значений относительно координат центра теплового облака  $x_c, y_c$

$$H_k(x, y) = \exp\left(-\left(\frac{(x - x_c)^2}{2\sigma^2} + \frac{(y - y_c)^2}{2\sigma^2}\right)\right),$$

Далее была разработана программная реализация системы согласно структурной схеме (рисунок 1).

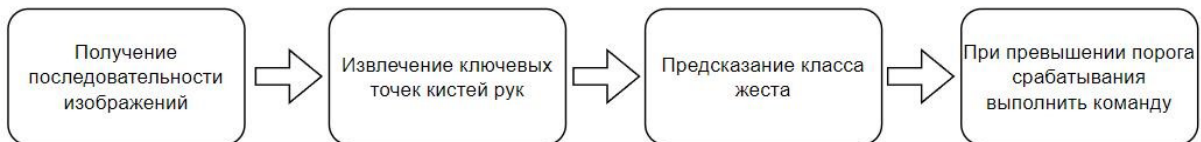


Рисунок 1 – Структурная схема системы

Для извлечения ключевых точек кистей рук реализована функция, на вход которой принимаются: объекты классов Hands (фреймворка MediaPipe), Drawing, DrawingStyles из MediaPipe, набор жестов, количество записей и их размер, путь сохранения файлов, минимальная граница детектирования (по умолчанию 0.5 или 50%), флаг установки статического режима (по умолчанию False).

В случае отсутствия ключевых точек кистей руки на изображении массив координат заменяется массивом, наполненным нулями.

В начале сбора из библиотеки cv2 получается объект, указанный на этапе конфигурации камеры. Далее начинается итерация по указанным жестам. Для каждого жеста итерируется запись, для каждой записи итерируется кадр указанное количество раз.

В каждой итерации кадра проверяется успешность получения изображения с камеры. В случае неудачи, попытка повторяется. Далее происходит вычисление времени с получения предыдущего кадра и вычисляется количество кадров в секунду (FPS).

На основе полученных данных ключевые точки кистей рук и связи между ними отображаются на изображении. Также на изображении выводится информация о текущем жесте, номере записи.

По окончании итераций окна закрываются, и работа функции завершается.

Также, для «холостой» работы алгоритма, разработана функция, работающая аналогично, за исключением сохранения результата. Эту функцию можно назвать демонстрирующей.

Благодаря инструменту QtDesigner и библиотеке PyQt5 сбор данных имеет следующий интерфейс (рисунок 2).



Рисунок 2 – Окно сбора данных приложения

Собранные данные представляют собой набор из 6 жестов (Вверх, Вниз, Влево, Вправо, Назад, ОК), по 30 записей, по 40 кадров, в сумме 7200 .пру файлов (Библиотеки Numpy для Python), который состоит из 126 чисел с плавающей точкой, описывающих 3D-координаты двух рук по 21 ключевой точке.

Коллекция обнаруженных/отслеженных рук, где каждая рука представлена в виде списка из 21 ориентира руки, и каждый ориентир состоит из  $x$ ,  $y$ ,  $z$ . Где  $x$  и  $y$  нормализуются от 0.0 до 1.0 по ширине и высоте изображения соответственно. А  $z$  представляет глубину ориентира, причем глубина на запястье является началом координат, и чем меньше значение, тем ближе ориентир к камере. Величина  $z$  вычисляется примерно того же масштаба,  $x$  что и  $y$ .

Далее происходит разделение данных по координатам на наборы  $X$ ,  $Y$  и  $Z$  соответственно. Для визуализации реализована функция, принимающая координаты ключевых точек кисти руки, связи ключевых точек, флаги сохранения фиксированного масштаба координатных осей (`fixed_axes`) и динамического изменения точки зрения (`dynamic_view`). В зависимости от значения флага `save` результат сохраняется. В конечном

итоге с помощью библиотеки Matplotlib получаем визуализацию каждого отдельного кадра.

Исходя из объёма и формата имеющихся данных (6 жестов, по 30 записей, по 40 кадров каждая) была сконфигурирована модель рекуррентной нейронной сети LSTM. На протяжении всей структуры модели основными функциями активации являются так называемая функция ReLU и функция Softmax, выполняющая активацию в суммирующем финальном слое.

Реализованное приложение имеет следующий интерфейс (рисунок 3):

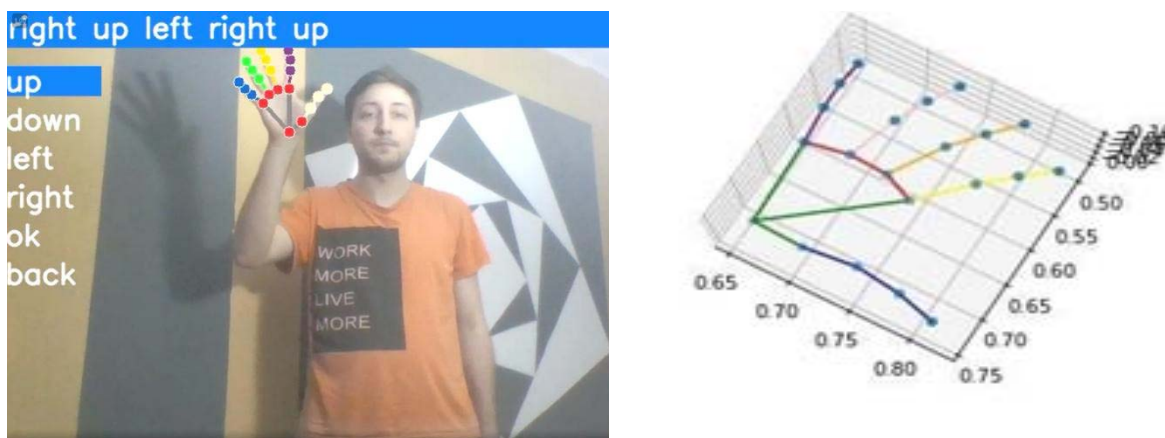


Рисунок 3 - Пример выполнения жестовых команд

## 2. Результаты и их обсуждение

Реализованное приложение с точностью 88.(8)% определяет команду. Минусом разработки являются баги, выявленные на момент тестирования приложения требования к вычислительным способностям компьютера и чёткости и скорости камеры.

### Заключение

В статье описана методика обработки скелетного представления руки для распознавания жеста, а реализация как подготовки собственного дата-сета, так и тестирование модели нейросети LSTM для распознавания жестовых команд. Полученная точность обученной модели составила около 90%.

### Библиографические ссылки

1. Krzysztof R. Classification Algorithm for Person Identification and Gesture Recognition Based on Hand Gestures with Small Training Sets // Sensors. 2020. № 20(24). P. 7279. DOI: 10.3390/s20247279.

2. Guillaume D., Wang X., Fabien M., Jie Y. Deep Learning for Hand Gesture Recognition on Skeletal Data // 13th IEEE Conference on Automatic Face and Gesture Recognition (FG'2018).2018. № 13(15). P. 106–113. DOI: 10.1109/FG.2018.00025; hal-01737771.
3. Sriram S.K., Nishant S. Gestop: Customizable Gesture Control of Computer Systems // 8th ACM IKDD CODS and 26th COMAD (CODS COMAD 2021). 2021. № 26(58). P. 405–409. DOI:10.1145/3430984.3430993.
4. Chenyang L., Xin Z., Lufan L., Lianwen J., Weixin Y. Skeleton-based Gesture Recognition Using Several Fully Connected Layers with Path Signature Features and Temporal Transformer Module // The Thirty-Third AAAI Conference on Artificial Intelligence (AAAI-19). 2019. № 33(1053). P. 8585–8593. DOI: 10.1609/aaai.v33i01.33018585.
5. Ryumin D., Kagirov I., Ivanko D., Axyonov A., Karpov A.A. Automatic detection and recognition of 3D manual gestures for human-machine interaction // ISPRS International Archives of the Photogrammetry, Remote Sensing and Spatial Information Sciences. 2019. № 42(12). P. 179-183. DOI: 10.5194/isprs-archives-XLII-2-W12-179-2019.
6. Grif M.G., Kondratenko Y.K. Development of a software module for recognizing the fingerspelling of the Russian Sign Language based on LSTM // International Conference on IT in Business and Industry. 2021. № 2032. P. 012024. DOI: 10.1088/1742-6596/2032/1/012024.
7. Zhang F., Bazarevsky V., Vakunov A., Tkachenka A., Sung G., Chang C. MediaPipe Hands: On-device Real-time Hand Tracking // CVPR Workshop on Computer Vision for Augmented and Virtual Reality. 2020. № 20(15). P. 77-81. DOI: 10.48550/arXiv.2006.10214.
8. Caputo A., Giachetti A., Soso S., Pintani D., D'Eusanio A., Pini S. SHREC 2021: Track on Skeleton-based Hand Gesture Recognition in the Wild // Computers & Graphics. 2021. № 99(4). P. 50-62. DOI:10.1016/j.cag.2021.07.007.
9. Yasen M., Jusoh S. A systematic review on hand gesture recognition techniques, challenges and applications // PeerJ Computer Science. 2019. № 5(6). P. 218-248. DOI: 10.7717/peerj-cs.218.
10. Sarma D., Bhuyan M. K. Methods, Databases and Recent Advancement of Vision Based Hand Gesture Recognition for HCI Systems: A Review // SN Computer Science. 2021. № 2(436). P. 1-40. DOI: 10.1007/s42979-021-00827-x.
11. Huang G., Tran S., Bai Q., Alty J. Hand gesture detection in tests performed by older adults // Computer Vision and Pattern Recognition. 2021. № 2110(1). P. 1146. DOI: 10.48550/arXiv.2110.14461.

## МЕТОДЫ ПРЯМОГО ОБУЧЕНИЯ ГЛУБОКИХ ИМПУЛЬСНЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

Ю.М. Вувуникян, Чэнь Ваньли

*Гродненский государственный университет имени Янки Купалы,  
ул. Ожешко, 22, 220023, г. Гродно, Беларусь, [yuv64@mail.ru](mailto:yuv64@mail.ru)*

Импульсные или спайковые нейронные сети (SNN) способны моделировать пространственно-временную информацию и имеют широкие перспективы применения для выявления поведения, подобного мозгу. Недавние схемы, такие как предварительное обучение искусственных нейронных сетей (ИНС) или прямое обучение на основе обратного распространения, обеспечивают высокоэффективное контролируемое обучение SNN. Но другая потенциальная проблема заключается в том, что в импульсных нейронных сетях пиковая активность не дифференцируема, что усложняет контролируемое обучение SNN. Поэтому нам нужны новые алгоритмы для прямого обучения глубоких SNN. В настоящей работе предложен эффективный метод пакетной нормализации, зависящий от порога, для алгоритма пространственно-временного обратного распространения.

**Ключевые слова:** Импульсная (спайковая) нейронная сеть; метод обратного распространения; пакетная регуляризация; метод градиентного спуска; итеративная модель LIF.

## DIRECT LEARNING METHODS FOR DEEP PULSED NEURAL NETWORKS

Yu. M. Vuvunikian, Chen WanLi

*Grodno State University, Ozheshko, 22, Grodno 220023, Belarus  
Corresponding author: [yuv64@mail.ru](mailto:yuv64@mail.ru)*

Pulsed or spiking neural networks (SNNs) are capable of modeling spatiotemporal information and have broad application prospects for detecting brain-like behavior. Recent schemes such as artificial neural network (ANN) pretraining or backpropagation (BP) forward learning provide highly efficient supervised learning for SNNs. But another potential problem is that in bursty neural networks, peak activity is not differentiable, which makes it difficult to supervise SNN training. Therefore, we need new algorithms for direct learning of deep SNNs. In this paper, we propose an efficient threshold-dependent batch normalization method for the spatiotemporal backpropagation algorithm.

**Keywords:** Pulse (spike) neural network; backpropagation method; batch regularization; gradient descent method; iterative model LIF.



## Введение

В настоящее время существует два основных подхода к обучению высокопроизводительных SNN.

Первый подход заключается в преобразовании предварительно обученной ИНС в SNN, что обычно занимает сотни временных шагов. Следовательно, хотя эти SNN имеют сравнимую точность со структурно подобными ANN, большое количество временных шагов может вызвать серьезные задержки сигнала и увеличить объем вычислений.

Другой подход заключается в обучении SNN напрямую на основе градиентного спуска, не полагаясь на предварительно обученные нейронные сети и уменьшая временной шаг [2,3].

Текущие SNN, обученные алгоритму STBP, ограничены неглубокими архитектурами и не могут обеспечить удовлетворительную производительность на крупномасштабных наборах данных. Поэтому в этой статье предлагается использовать метод пакетной нормализации, зависящий от порога (tdBN), основанный на пространственно-временном обратном распространении (STBP – Spatio-Temporal BackPropagation), называемый «STBP-tdBN». И строить сеть с глубокими всплесками, используя tdBN, расширяя непосредственно обученную сеть SNN, используя небольшой временной шаг, достигает эффекта прямого обучения нейронных сетей с глубокими пиками.

### 1. Полученные результаты

1.1. Глубокие нейронные сети (DNN) могут избежать исчезновения или взрыва градиентов, когда они динамически равноудалены (то есть каждое сингулярное значение входной и выходной матриц Якоби поддерживается близким к 1).

В работе [2] Chen и др. предложили «динамическую изометрию блоков» в качестве общего статистического инструмента для всех сложных последовательно-параллельных ГНС, изучая моменты первого и второго порядка каждого блока в нейронной сети и анализируя их влияние на распределение градиента. Теоретически объяснена роль инициализации веса, пакетной нормализации и быстрого соединения в DNN.

#### 1.2. Итерационная модель LIF:

Итеративная модель LIF была предложена [1] Wu и др. в 2019 году на основе оригинальной модели Leaky Intergrate and Fired.

Найдены импульсные и спектральные характеристики нелинейных эволюционных операторов [5], определяемых моделью LIF.

### 1.3. Пороговая нормализация партии (TDBP).

Пакетная нормализация (BN), как компонент регуляризации DNN, является широко используемым методом нейронной сети, который может обеспечить стабильную конвергенцию и более глубокие нейронные сети.

Однако непосредственно обученные SNN требуют специально разработанных методов нормализации из-за дополнительного временного измерения и специального механизма активации SNN. Поэтому мы используем метод нормализации партии, зависящий от порогового значения (threshold-dependent batch normalization, tdBN [3]).

### 1.4. Общий алгоритм обучения.

Мы вводим общий алгоритм обучения STBP-tdBN для обучения глубокого SNN с нуля с помощью нашего tdBN. При обратном распространении ошибки мы используем последний уровень в качестве уровня декодирования, а конечный результат  $Q$  выражается следующим равенством:

$$Q = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T M o^{n,t}$$

где  $o^{n,t}$  – шип, выпущенный последним выходным слоем,  $M$  — матрица уровня декодирования, а  $T$  обозначает количество временных шагов. Затем мы пропускаем выходные данные через слой softmax. Функция потерь определяется как кросс-энтропия. С учетом выхода  $Q$  и вектора меток  $Y$  функция потерь  $L$  определяется выражением

$$L = - \sum_{i=1}^n y_i \log(p_i), \quad p_i = \frac{e^{q_i}}{\sum_{j=1}^n e^{q_j}}.$$

В итеративной модели LIF метод STBP-tdBN распространяет обратно градиент потерь  $L$  как в пространственной, так и во временной областях. Применяя формулу дифференцирования сложной функции, производные

$\frac{\partial L}{\partial o_i^{t,n}}$  и  $\frac{\partial L}{\partial u_i^{t,n}}$  можно вычислить с помощью равенств

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial o_i^{t,n}} &= \sum_{j=1}^{l(n+1)} \frac{\partial L}{\partial u_j^{t,n+1}} \frac{\partial u_j^{t,n+1}}{\partial o_i^{t,n}} + \frac{\partial L}{\partial u_i^{t+1,n}} \frac{\partial u_i^{t+1,n}}{\partial o_i^{t,n}}, \\ \frac{\partial L}{\partial u_i^{t,n}} &= \frac{\partial L}{\partial o_i^{t,n}} \frac{\partial o_i^{t,n}}{\partial u_i^{t,n}} + \frac{\partial L}{\partial u_i^{t+1,n}} \frac{\partial u_i^{t+1,n}}{\partial u_i^{t,n}}, \end{aligned}$$

где  $o^{t,n}$  и  $u^{t,n}$  представляют спайковый и мембранный потенциал нейрона в слое  $n$  в момент времени  $t$ .

### 1.5. Теория градиентной нормы

Теория нормы градиента — это разработанная в последние годы теория, целью которой является преодоление проблемы исчезновения или взрыва градиента в различных структурах нейронных сетей.

В этой статье мы используем «блочную динамическую изометрию», предложенную в работе [2] в 2020 году, для анализа влияния tdBN на непосредственно обученную SNN, которая рассматривает сеть как систему блоков.

Экспериментальные результаты на статистическом наборе данных показаны в приведенной таблице.

Таблица: Полученные экспериментальные данные.

| Набор данных | Модель                          | Методы          | Шаг времени | Точность |
|--------------|---------------------------------|-----------------|-------------|----------|
| CIFAR-10     | (Sengupta et al. 2019)          | ANN-SNN         | 2500        | 90.53%   |
|              | (Hu et al. 2018)                | ANN-SNN         | 350         | 91.32%   |
|              | (Rathi et al. 2020)             | Hybird Training | 200         | 91.01%   |
|              | (Lee et al. 2020)               | Spike-based BP  | 100         | 89.93%   |
|              | (Wu et al. 2019)                | STBP            | 12          | 89.49%   |
|              | наша модель                     | STBP-tdBN       | 4           | 91.89%   |
| ImageNet     | (Sengupta et al. 2019)          | ANN-SNN         | 2500        | 68.86%   |
|              | (Sengupta et al. 2019)          | ANN-SNN         | 2500        | 64.47%   |
|              | (Han, Srinivasan, and Roy 2020) | ANN-SNN         | 1024        | 65.63%   |
|              | (Hu et al. 2018)                | ANN-SNN         | 768         | 71.53%   |
|              | (Rathi et al. 2020)             | Hybird          | 250         | 65.38%   |

|  |                     |                 |     |        |
|--|---------------------|-----------------|-----|--------|
|  |                     | Training        |     |        |
|  | (Rathi et al. 2020) | Hybird Training | 250 | 61.35% |
|  | наша модель         | Hybird Training | 6   | 65.72% |

## Заключение

В этой статье мы используем метод нормализации, который напрямую обучает высокопроизводительные глубокие SNN. Включая теорию градиентной нормы, мы демонстрируем, что метод может эффективно сбалансировать входные стимулы и пороги нейронов во время обучения, тем самым способствуя конвергенции обучения. Мы достигаем приемлемой точности на наборах данных статических изображений со значительно меньшей задержкой вывода по сравнению с другими моделями SNN.

Поэтому в этой работе предлагается возможная схема прямого обучения для глубоких SNN. Он поддерживает высокую эффективность механизма связи на основе спайков, позволяет SNN решать более сложные задачи классификации, облегчает реализацию на соответствующем оборудовании и практическое применение SNN.

## Библиографические ссылки

1. Wu Y, Deng L, Li G, et al. Direct training for spiking neural networks: Faster, larger, better[C] // Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. 2019, № 33(01). P. 1311–1318.
2. Chen Z, Deng L, Wang B, et al. A comprehensive and modularized statistical framework for gradient norm equality in deep neural networks[J] // IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 2020. № 44(1). P. 13–31.
3. Wu Y, Deng L, Li G, et al. Spatio-temporal backpropagation for training high-performance spiking neural networks[J] // Frontiers in neuroscience, 2018. № 12. P. 331.
4. Yao M, Gao H, Zhao G, et al. Temporal-wise Attention Spiking Neural Networks for Event Streams Classification[C] // Proceedings of the IEEE/CVF International Conference on Computer Vision. 2021.P. 10221–10230.
5. Вувуникян Ю.М. Эволюционные операторы с обобщенными импульсными и спектральными характеристиками: монография. Гродно : ГрГУ, 2007. 224 с.

## АДАПТИВНЫЙ ШАГ ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ НЕКОНТРОЛИРУЕМОГО ОБУЧЕНИЯ ГЛУБОКИХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

**В.А. Головко, А.А. Крощенко, Е.В. Михно, А.М. Соловчук**

*Брестский государственный технический университет, ул. Московская 267,  
224017, г. Брест, Беларусь, vladimir.golovko@gmail.com*  
Corresponding author: [vladimir.golovko@gmail.com](mailto:vladimir.golovko@gmail.com)

В статье получены выражения для адаптивного шага обучения на этапе предварительного обучения глубоких нейронных сетей. Для вывода выражений использовался метод наискорейшего спуска. Использование адаптивного шага обучения позволяет повысить скорость обучения глубокой нейронной сети на этапе предварительного обучения.

**Ключевые слова:** глубокое обучение; адаптивный шаг обучения; RBM машина.

### Введение

Существуют два основных метода глубокого обучения.

1. *Метод с предварительным обучением*, который состоит из двух этапов [1–9]:

- предобучение нейронной сети, начиная с первого слоя. Данное обучение осуществляется без учителя и базируется на ограниченной машине Больцмана (RBM) или на автоэнкодерной нейронной сети ;
- настройка синаптических связей всей сети при помощи алгоритма обратного распространения ошибки.

2. *Метод стохастического градиента (SGD)* с ректификационной функцией активации (ReLU) нейронных элементов [4, 6].

В настоящее время принята следующая парадигма для обучения глубоких нейронных сетей. Если обучающая выборка большая, т. е. размерность обучающей выборки намного больше, чем количество настраиваемых параметров сети, то используется метод стохастического градиента с функцией активации ReLU нейронных элементов. Если размерность обучающей выборки сравнима или меньше количества настраиваемых параметров сети или используются сигмоидальные функции активации нейронных элементов, то применяется предварительное обучение нейронной сети и алгоритм обратного распространения ошибки на заключительном этапе обучения [4,6].

Основные недостатки существующих подходов:

1. метод стохастического градиента требует большого объема обучающей выборки и делает невозможным использование сигмоидальных функций активации в скрытых слоях нейронной сети [4,6].
2. методы предварительного обучения базируются на линейной ограниченной машине Больцмана с точки зрения минимизации суммарной квадратичной ошибки сети или классическом автоэнкодерном подходе, со всеми присущими их недостатками (выбор подходящего шага обучения, достижение приемлемой начальной точки обучения с точки зрения хорошей обобщающей способности и редуцирования параметров нейронной сети) [6].

В данной работе получены выражения для адаптивного шага обучения на этапе предварительного обучения нейронной сети для ReLU функции активации, что позволяет повысить качество обучения.

### 1. Адаптивный шаг обучения

Для ускорения процедуры обучения градиентного спуска, вместо постоянного шага обучения можно использовать *адаптивный шаг*  $\alpha(t)$ .

*Адаптивным* называется шаг обучения, который выбирается на каждом этапе алгоритма таким образом, чтобы минимизировать квадратичную ошибку сети [6].

Пусть дана однослойная нейронная сеть, которая состоит из распределительного слоя нейронных элементов и выходного слоя (рисунок).

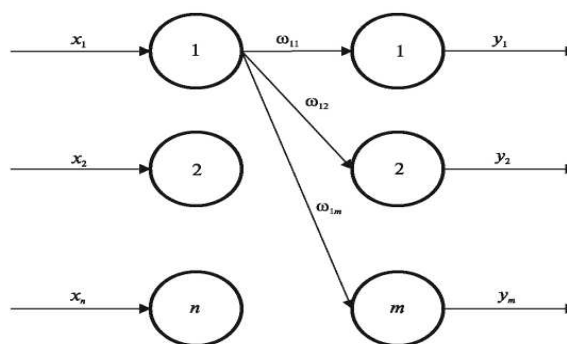


Рисунок – Однослойная нейронная сеть

В качестве нейронов выходного слоя используются нейронные элементы с ректификационной функцией активации:

$$y_j(t) = F(S_j(t)) = r_j(t)S_j(t), \quad (1)$$

$$r_j(t) = \begin{cases} r_1, & S_j(t) \geq 0; \\ r_2, & S_j(t) < 0. \end{cases} \quad (2)$$

Где  $r_1 \neq r_2$ . Каждый нейрон распределительного слоя имеет синаптические связи со всеми нейронами обрабатывающего слоя. Взвешенная сумма  $j$ -го нейрона сети определяется как

$$S_j(t) = \sum_i \omega_{ij}(t)x_i(t) + T_j(t). \quad (3)$$

Суммарная квадратичная ошибка сети для всей обучающей выборки вычисляется по формуле

$$E_s = \frac{1}{2} \sum_k \sum_j (y_j^k - e_j^k)^2 \quad (4)$$

Соответственно квадратичную ошибку для одного образа можно представить в виде:

$$E = \frac{1}{2} \sum_j (y_j - e_j)^2 \quad (5)$$

Для нахождения адаптивного шага обучения будем использовать метод наискорейшего спуска.

**Теорема 1.** Для однослойной нейронной сети с ReLU функцией активации при последовательном обучении значение адаптивного шага обучения вычисляется на основе следующего выражения:

$$\alpha(t) = \frac{\sum_{j=1}^m r_j(t+1)b_j(r_j(t+1)S_j(t) - e_j)}{\sum_{j=1}^m r_j^2(t+1)b_j^2},$$

$$b_j = r_j(t)(y_j - e_j)(1 + \sum_{i=1}^n x_i^2(t)), \quad (6)$$

$$\text{где } r_j(t+1) = \begin{cases} r_1, & e_j(t) \geq 0; \\ r_2, & e_j(t) < 0. \end{cases}$$

Данная теорема справедлива, когда обучение происходит последовательно после подачи каждого образа на вход нейронной сети.

Весовые коэффициенты и пороговые значения изменяются следующим образом:

$$\omega_{ij}(t+1) = \omega_{ij}(t) - \alpha(t)r_j(t)(y_j - e_j)x_i(t),$$

$$T_j(t+1) = T_j(t) - \alpha(t)r_j(t)(y_j - e_j) \quad (7)$$

Адаптивный шаг обучения позволяет значительно повысить скорость

обучения однослойной нейронной сети и достичь оптимального решения задачи.

## 2. Предобучение глубоких нейронных сетей с адаптивным шагом

Рассмотрим использование адаптивного шага обучения для ограниченной машины Больцмана (RBM).

В процессе обучения автоэнкодерной сети для каждого входного образа производится три цикла преобразования информации: прямое (сжатие), обратное (восстановление) и прямое (сжатие). Такое преобразование информации эквивалентно сэмплированию Гиббса с единичным шагом. После этого производится настройка весовых коэффициентов сети. Для наглядности процесса распространения информации введем обозначения. Пусть  $x_i(0)$ ,  $i = \overline{1, n}$  входной вектор, поступающий на вход сети в начальный момент времени  $t = 0$ . Тогда формулы выходных значений сжимающего слоя можно записать как

$$y_j(0) = F(S_j) = r_j(0)S_j(0) = r_j(0) \left( \sum_{i=1}^n w_{ij} x_i(0) + T_j \right) \quad (8)$$

где  $j = \overline{1, p}$ .

Выходные значения восстанавливающего слоя в момент времени  $t = 1$ :

$$x_i(1) = F(S_i) = r_i(1)S_i(1) = r_i(1) \left( \sum_{j=1}^p w_{ji} y_j(0) + T_i \right) \quad (9)$$

где  $i = \overline{1, n}$ .

На следующем этапе распространения информации выходной вектор восстанавливающего слоя подается на вход сети и опять определяются выходные значения сжимающего слоя:

$$x_i(1) = F(S_i) = r_i(1)S_i(1) = r_i(1) \left( \sum_{j=1}^p w_{ji} y_j(0) + T_i \right)$$

$$y_j(1) = F(S_j(1)) = r_j(1)S_j(1) = r_j(1)F \left( \sum_{i=1}^n w_{ij} x_i(1) + T_j \right) \quad (10)$$

где  $j = \overline{1, p}$ .

Для нелинейной ограниченной машины Больцмана правило модификации синаптических связей в случае CD-1 будет следующим:

$$w_{ij}(t+1) = w_{ij}(t) - \alpha_1 (y_j(1) - y_j(0)) r_j(1) x_i(1) - \alpha_2 (x_i(1) - x_i(0)) r_i(1)$$



$$\begin{aligned}
T_i(t+1) &= T_i(t) - \alpha_2(x_i(1) - x_i(0))r_i(1), \\
T_j(t+1) &= T_j(t) - \alpha_1(y_j(1) - y_j(0))r_j(1)
\end{aligned}
\tag{11}$$

Адаптивные шаги для последовательного обучения вычисляются следующим образом:

$$\alpha_1(t) = \frac{\sum_{j=1}^m r_j(t+1)b_j(r_j(t+1)S_j(1) - y_j(0))}{\sum_{j=1}^m r_j^2(t+1)b_j^2},$$

$$b_j = r_j(1)(y_j(1) - y_j(0))(1 + \sum_{i=1}^n x_i^2(1)),
\tag{12}$$

где  $r_j(t+1) = \begin{cases} r_1, & y_j(0) \geq 0; \\ r_2, & y_j(0) < 0. \end{cases}$

$$\alpha_2(t) = \frac{\sum_{i=1}^n r_i(t+1)b_i(r_i(t+1)S_i(1) - x_i(0))}{\sum_{i=1}^n r_i^2(t+1)b_i^2},
\tag{13}$$

$$b_i = r_i(1)(x_i(1) - x_i(0))(1 + \sum_{i=1}^m y_i^2(0)),$$

где  $r_i(t+1) = \begin{cases} r_1, & x_i(0) \geq 0; \\ r_2, & x_i(0) < 0. \end{cases}$

### Заключение

1. Получены выражения для вычисления адаптивного шага обучения в однослойном персептроне при использовании ReLU функции активации;

2. Произведено отображение полученных выражений для предварительного обучения глубоких нейронных сетей.

Данная работа выполнена при поддержке белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований БРФФИ, проект Ф22КИ-046.

### Библиографические ссылки

1. Hinton G. E., Osindero S., Yee-Whye Teh. A fast learning algorithm for deep belief nets // *Neural computation*. 2006. № 18. P. 1527–1554.
2. Hinton G., Salakhutdinov R. Reducing the dimensionality of data with neural networks // *Science*. 2006. № 313 (5786). P. 504–507.

3. Hinton G. E. A practical guide to training restricted Boltzmann machines. Toronto, 2010.
4. LeCun Y., Bengio Y., Hinton G. Deep learning Nature, 2015, 521 (7553). P. 436–444.
5. Головки В.А. От многослойных перцептронов к нейронным сетям глубокого доверия: парадигмы обучения и применение: лекции по нейроинформатике. М.: 2015.
6. Головки В.А., Краснопрошин В.В. Нейросетевые технологии обработки данных. Минск: БГУ, 2017. 263 с.
7. V. Golovko, A. Kroshchanka, V. Turchenko, S. Jankowski, and D. Treadwell A new technique for restricted Boltzmann machine learning // IEEE 8th Int.Conf. on Intelligent Data Acquisition and Advanced Computing. Systems: Technology and Applications (IDAACS), Warsaw: IEEE, 2015. P. 182–186.
8. V. Golovko, A. Kroshchanka, and D. Treadwell, “The nature of unsupervised learning in deep neural networks:A new understanding and novel approach // Opt. Memory Neural Networks, 2016. Vol. 25. P. 127–141.
9. V. Golovko . Deep neural networks: a theory, application and new trends / Proc. of the 13th intern. conf. on pattern recognition and inform, processing, Minsk, 3–5 oct. 2016. Minsk, 2016. P. 33–37.

**ПРОГРАММНАЯ СИСТЕМА ДЛЯ ОЦЕНКИ  
ИНФОРМАТИВНОСТИ ПРИЗНАКОВ 2D ИЗОБРАЖЕНИЙ  
КОСТНЫХ ОБЪЕКТОВ В СУДЕБНО-ЭКСПЕРТНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЯХ**

**А.А. Дудкин, В.В. Старовойтов, А.А. Воронов, В.В. Ганченко,  
Е.Е. Марушко, А.В. Инютин, Л.П. Поденок**

*Объединенный институт проблем информатики Национальной академии наук  
Беларуси, ул. Сурганова, 6, 220012, г. Минск, Беларусь, [voronov@lsi.bas-net.by](mailto:voronov@lsi.bas-net.by)*

Приведено описание программного обеспечения (ПО) для экспериментального исследования способа анализа разрушенных костных объектов по 2D-данным, описана архитектура ПО, а также результаты анализа разрушений костных объектов. Проведенный анализ на основе оценки информативности позволил выбрать признаки, наиболее подходящие для решения задачи классификации переломов. Результаты будут использованы для судебно-экспертного исследования сложных поверхностей переломов с применением автоматизированной системы анализа цифровых изображений.

**Ключевые слова:** Костные объекты; информативные признаки; текстурные характеристики; локальные бинарные шаблоны.

**SOFTWARE FOR ASSESSING THE INFORMATIVITY  
OF FEATURES IN THE ANALYSIS OF 2D IMAGES OF BONE  
OBJECTS IN FORENSIC EXAMINATION**

**A. Doudkin, V. Starovoitov, A. Voronov, V. Ganchenko,  
E. Marushko, A. Inytin, L. Podenok**

*The United Institute of Informatics Problems of the National Academy of Sciences  
of Belarus, 6 Surhanava Street, Minsk 220012, Belarus,  
[voronov@lsi.bas-net.by](mailto:voronov@lsi.bas-net.by)*

This article describes the software implementation of the system for extracting and evaluating information features from 2D images of bone fractures and bone objects for classifying fractures and identifying the alleged instrument that caused the injury. As parameters, the textural characteristics of Haralick, local binary patterns of pixels for 2D images, Gabor filters, Laws energy texture characteristics for 2D images are considered. The analysis carried out on basis of information content estimation to select the features that are most suitable for solving the problem of bone fractures classification. The results will be used for development of methods for complex forensic examination of complex polygonal surfaces of solid objects for automated system for analyzing digital images.

**Keywords:** Bone fracture; bone objects; texture features; local binary patterns.

## Введение

Существуют разные методы исследования костных объектов и переломов [1-2]. Для исследования строения переломов применим оптический метод. Существуют различного рода автоматизированные системы и экспертные системы для классификации переломов по изображениям костных объектов, однако они обладают определенными недостатками и как правило импортные. Предлагается программная система для выделения информативных признаков по фотографиям переломов костных объектов, что полезно для классификации перелома и идентификации предполагаемого орудия, которым нанесена травма. В предлагаемой системе используется один из подходов к оценке поверхности перелома - выделение информативных признаков.

### 1. Структура системы

В общем виде разработанную систему можно описать как совокупность следующих подсистем:

- графического интерфейса пользователя, которая используется для отображения данных и взаимодействия с пользователем (ГИП);
- хранения данных, которая выполняет взаимодействие с базой данных (БД) и файловой системой, обеспечивая чтение и запись данных (ПХД);
- обработки и анализа, которая получает от подсистемы хранения данных указанные пользователем данные, осуществляет их обработку и анализ, после чего сохраняет результат, обращаясь к подсистеме хранения (ПОА).

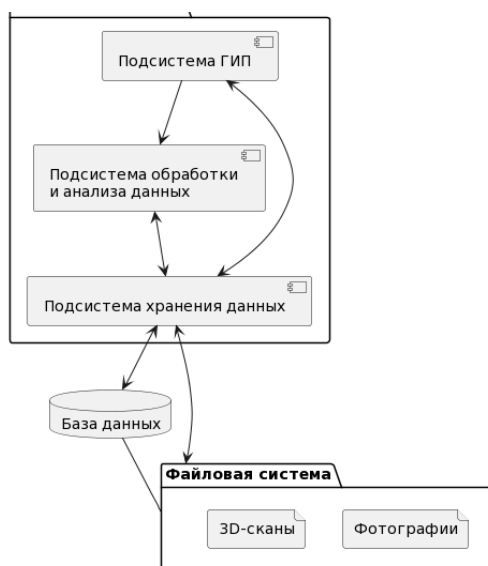


Рисунок 1 – Архитектура системы

Все загруженные в систему файлы (фотографии и 3D-сканы), хранятся в виде файлов на файловой системе. Информация о загруженных в систему данных и их взаимосвязях хранится в виде записей в базе данных (БД).

## 2. Описание работы системы

Обрабатываемые данные связываются в один объект «Набор данных», который содержит описание добавленных данных, несколько изображений и/или 3D-сканов, результатов их обработки. В общем виде работа системы может быть представлена в виде диаграммы последовательности, приведенной на рисунке 2.

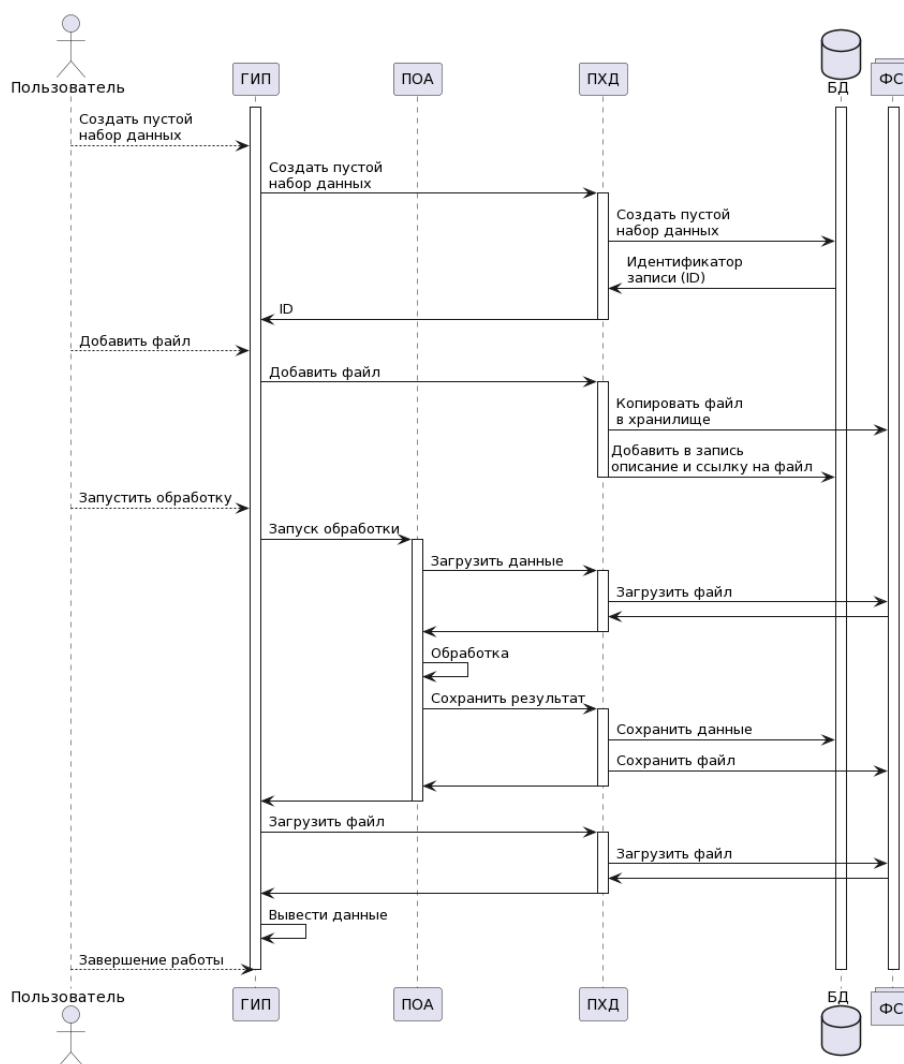


Рисунок 2 – Диаграмма последовательности работы системы

Пользователь, работая с системой, всегда работает с набором данных, каждый из которых имеет свой уникальный идентификатор (ID), описание набора данных (название, время создания, время последнего об-

новления, текстовое описание и т.п.), а также связанные 2D и 3D данные. Модули системы используют этот ID для конкретизации запроса. Передача больших объемов данных (изображение, 3D-скан) осуществляется только между модулем, требующим этой операции, как правило, модули из подсистемы обработки и анализа данных, и подсистемой хранения данных.

### **3. Анализ 2D изображений костных объектов**

В подсистеме обработки и анализа данных содержится реализация алгоритма анализа 2D изображений костных объектов. Для этого реализованы все необходимые функции.

С исходными фотоизображениями, зарегистрированными фотокамерой с разным разрешением, осуществили предварительную подготовку и вырезали прямоугольные фрагменты, содержащие 100% области интереса без фона.

Все имеющиеся исходные изображения были разделены на две группы. Первая группа для анализа была сформирована таким образом, что включала кроме непосредственно фотографий переломов также неповрежденные фрагменты кости черепа.

Во второй группе с фотографиями повреждений черепа согласно классификации основных следообразующих частей твердых тупых предметов (орудия травмы костей свода черепа) были выделены шесть классов повреждений: плоская ограниченная поверхность (прямоугольной, продолговатой или треугольной формы), плоская ограниченная поверхность круглой формы, плоская преобладающая поверхность, цилиндрическая поверхность, сферическая поверхность, предметы с ребром или двугранным углом.

### **4. Исследование информативности текстурных признаков для первой группы изображений**

Были детально исследованы следующие группы текстурных признаков на предмет различения повреждений костей из первой группы: фильтры Габора [3]; энергетические текстурные характеристики Лавса [4]; 13 признаков Харалика на базе матриц смежности значений яркости [5]; локальные бинарные шаблоны пикселей (LBP) [6].

Использовались следующие варианты признаков LBP: радиус = 3, количество шаблонов = 24; радиус = 5, количество шаблонов = 40; радиус = 7, количество шаблонов = 56.

Имя LBP признака содержит его параметры:  $lbp\_r<радиус>\_h<индекс\_шаблона>$ . После вычисления признаков в каждом пикселе формируется гистограмма их значений. Эта гистограмма и

рассматривается как набор признаков. Всего вычислялось 26 значений гистограммы LBP радиуса 3; 42 значений гистограммы LBP радиуса 5; 58 значений гистограммы LBP радиуса 7. Всего исследовалось 139 признаков. Фильтры Габора применялись со следующими параметрами: размеры ядра фильтров – 15, 21, 31; углы поворота в градусах – 0, 22, 24, 67, 90, 112, 135, 157.

Имя фильтра описывает его параметры:  $ks_{<размер ядра>}th_{<угол поворота>}$ . В качестве оценки используется среднее значение матрицы, полученной при фильтрации изображения.

Использовались следующие энергетические текстурные характеристики Лавса:  $L_N L_N$ ,  $E_N E_N$ ,  $S_N S_N$ ,  $L_N E_N$ ,  $E_N S_N$ ,  $L_N S_N$ , где  $N$  – размеры базового вектора, которые могут принимать значения из диапазона [3, 5, 7]. В качестве оценки, также, как и для фильтров Габора, используется среднее значение матрицы, полученной при фильтрации изображения.

Всего исследовался 181 текстурный признак. Оценка информативности признаков выполнялась на основе статистических процедур ANOVA (ANalysis Of VAriance), на базе F-статистики [7], рекурсивного исключения признаков (Recursive feature elimination, RFE) [8] на основе L1 нормы (Linear Support Vector Machine, SVM) [9]. Кроме этого использовались классификаторы: ансамбль деревьев, который строит ряд рандомизированных деревьев решений [10], и случайный лес [11]. Выделялись лучшие оценки, найденные каждым методом в отдельности и по сумме нормализованных значений всех признаков (рисунки 3–4, таблицы 1–2).

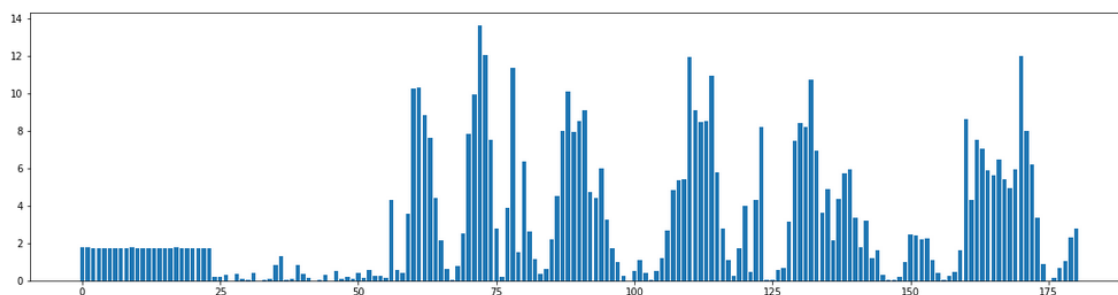


Рисунок 3 – Суммарные нормализованные оценки информативности всех признаков

Модель ExtraTrees (Extremely Randomized Trees) реализует ансамбль деревьев, который соответствует ряд рандомизированных деревьев решений на различных подвыборках набора данных, и использует усреднение для повышения точности прогнозов и контроля переобучения. ExtraTrees на каждом уровне дерева выбирает разделение признаков случайным образом.

Метод построения случайного леса реализует набор случайно построенных деревьев решений. Случайный лес на каждом уровне дерева выбирает разделение признаков на основании критерия Gini.

В двух последних методах строилось по 1000 деревьев. На исследуемых данных оба метода выделили 55 признаков, но их значимость несколько отличалась, что показано в таблице 1.

Таблица 1 – Двадцать наиболее информативных признаков для идентификации повреждений поверхности и переломов костей

| №  | Признак    | Суммарная оценка |
|----|------------|------------------|
| 1  | lbp_r3_h6  | 0.026883         |
| 2  | lbp_r5_h7  | 0.026713         |
| 3  | lbp_r3_h5  | 0.023050         |
| 4  | lbp_r7_h0  | 0.020107         |
| 5  | lbp_r5_h29 | 0.020078         |
| 6  | lbp_r3_h17 | 0.019377         |
| 7  | lbp_r7_h9  | 0.018229         |
| 8  | lbp_r7_h7  | 0.017201         |
| 9  | lbp_r5_h30 | 0.016604         |
| 10 | lbp_r3_h18 | 0.015955         |
| 11 | lbp_r5_h6  | 0.015771         |
| 12 | lbp_r7_h29 | 0.014985         |
| 13 | lbp_r7_h27 | 0.014879         |
| 14 | lbp_r7_h8  | 0.014655         |
| 15 | lbp_r3_h23 | 0.014529         |
| 16 | lbp_r3_h4  | 0.013667         |
| 17 | lbp_r7_h31 | 0.013111         |
| 18 | lbp_r7_h6  | 0.013103         |
| 19 | lbp_r3_h19 | 0.013058         |
| 20 | lbp_r7_h28 | 0.012983         |

В таблице 2 и на рисунке 4 представлены результаты выбора наиболее информативных признаков для повреждений поверхности и переломов костей. На исследованном наборе из 27 изображений 13 костных объектов наиболее информативными оказались признаки типа LBP с разными радиусами.

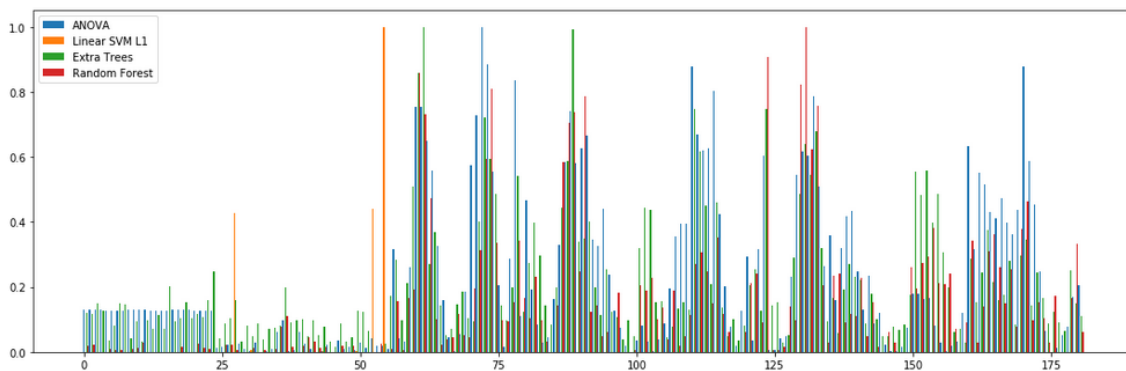


Рисунок 4 – Суммарные нормализованные оценки информативности всех признаков переломов кости



Таблица 2 – Наиболее информативные признаки, выделенные шестью методами

| ANOVA      |        | RFE         |   | LinearSVC L1 |               | ExtraTrees |        | Случайный лес |        | Комбинированная оценка |        |
|------------|--------|-------------|---|--------------|---------------|------------|--------|---------------|--------|------------------------|--------|
| Признак    | Оценка | Признак     |   | Признак      | Коэфф. модели | Признак    | Оценка | Признак       | Оценка | Признак                | Оценка |
| lbp_r3_h17 | 13.64  | ks_21_th_22 | - | L7E7         | 0.0010        | lbp_r3_h5  | 0.028  | lbp_r7_h7     | 0.037  | lbp_r5_h7              | 2.47   |
| lbp_r3_h18 | 12.06  | ks_31_th_22 | - | Variance     | -0.0010       | lbp_r3_h6  | 0.028  | lbp_r7_h0     | 0.034  | lbp_r3_h5              | 2.37   |
| lbp_r7_h47 | 11.98  | Contrast    | - | L7S7         | -0.0023       | lbp_r5_h7  | 0.024  | lbp_r3_h5     | 0.032  | lbp_r3_h18             | 2.33   |
| lbp_r5_h29 | 11.97  | S3S3        | - | -            | -             | lbp_r3_h18 | 0.019  | lbp_r7_h6     | 0.031  | lbp_r7_h9              | 2.26   |
| lbp_r3_h23 | 11.39  | E3S3        | - | -            | -             | lbp_r3_h17 | 0.018  | lbp_r3_h18    | 0.030  | lbp_r3_h6              | 2.23   |
| lbp_r5_h33 | 10.96  | L3S3        | - | -            | -             | lbp_r7_h0  | 0.017  | lbp_r5_h9     | 0.029  | lbp_r7_h7              | 2.22   |
| lbp_r7_h9  | 10.72  | S5S5        | - | -            | -             | lbp_r7_h31 | 0.016  | lbp_r7_h9     | 0.028  | lbp_r3_h17             | 2.20   |
| lbp_r3_h6  | 10.29  | E5S5        | - | -            | -             | lbp_r3_h23 | 0.015  | lbp_r5_h7     | 0.027  | lbp_r7_h0              | 2.10   |
| lbp_r3_h5  | 10.26  | E7E7        | - | -            | -             | lbp_r7_h47 | 0.015  | lbp_r3_h6     | 0.027  | lbp_r5_h9              | 2.04   |
| lbp_r5_h7  | 10.09  | E7S7        | - | -            | -             | lbp_r5_h6  | 0.015  | lbp_r5_h6     | 0.026  | lbp_r7_h6              | 1.85   |

## 5. Исследование информативности текстурных признаков для второй группы изображений

Всего исследовался 181 признак с использованием инструментов, описанных выше, но для второй группы изображений. В таблице 3 и на рисунке 5 представлены результаты выбора наиболее информативных признаков для повреждений этой группы.

На исследованном наборе из 45 изображений 6 костных объектов наиболее информативными оказались признаки типа LBP с разными радиусами и текстурная характеристика Харалика Correlation.

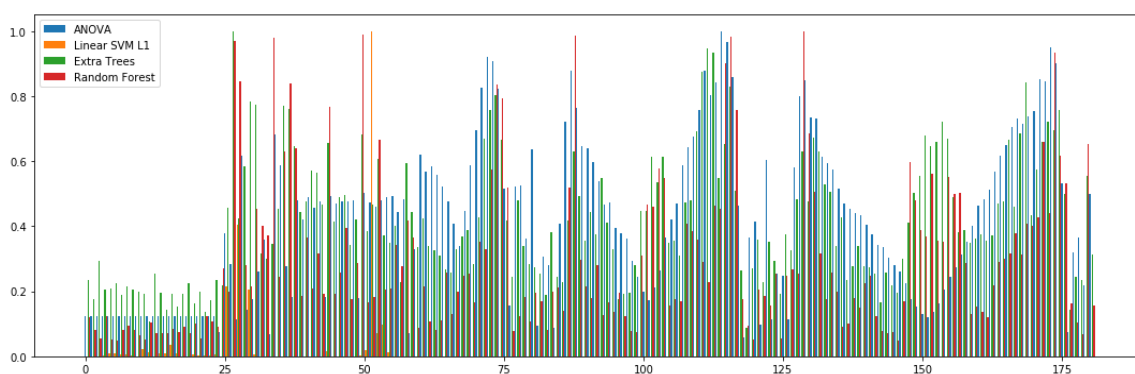


Рисунок 5 – Суммарные нормализованные оценки информативности всех признаков поверхности и переломов кости

Таблица 3 – Наиболее информативные признаки, выделенные шестью методами для второй группы

| ANOVA      |        | RFE          |   | LinearSVC L1 |              | ExtraTrees         |        | Случайный лес      |        | Комбинируемая оценка |        |
|------------|--------|--------------|---|--------------|--------------|--------------------|--------|--------------------|--------|----------------------|--------|
| Признак    | Оценка | Признак      |   | Признак      | Коэф. модели | Признак            | Оценка | Признак            | Оценка | Признак              | Оценка |
| lbp_r5_h33 | 24,57  | ks_21_th_157 | - | L7E7         | 0.0040       | Correlation        | 0,013  | lbp_r7_h5          | 0,0185 | lbp_r5_h34           | 2,78   |
| lbp_r5_h34 | 23,73  | ks_31_th_157 | - | L5L5         | 0.0009       | lbp_r5_h30         | 0,013  | L7L7               | 0,0183 | lbp_r7_h50           | 2,58   |
| lbp_r7_h50 | 23,38  | Contrast     | - | L7S7         | 0.0007       | lbp_r5_h31         | 0,012  | lbp_r5_h6          | 0,0182 | lbp_r5_h33           | 2,55   |
| lbp_r3_h17 | 22,63  | SumAverage   | - | L7L7         | 0.0006       | lbp_r5_h29         | 0,012  | lbp_r5_h34         | 0,0181 | lbp_r3_h18           | 2,55   |
| lbp_r3_h18 | 22,33  | S5S5         | - | -            | -            | lbp_r7_h45         | 0,011  | DifferenceVariance | 0,0181 | lbp_r5_h6            | 2,50   |
| lbp_r7_h51 | 22,18  | L5S5         | - | -            | -            | lbp_r5_h34         | 0,011  | Correlation        | 0,0179 | lbp_r7_h5            | 2,43   |
| lbp_r5_h6  | 21,59  | E7E7         | - | -            | -            | lbp_r3_h18         | 0,011  | lbp_r7_h50         | 0,0173 | lbp_r3_h19           | 2,28   |
| lbp_r5_h30 | 21,55  | S7S7         | - | -            | -            | SumAverage         | 0,010  | lbp_r5_h33         | 0,0166 | lbp_r7_h51           | 2,28   |
| lbp_r5_h35 | 21,08  | E7S7         | - | -            | -            | SumVariance        | 0,010  | Variance           | 0,0156 | lbp_r3_h17           | 2,25   |
| lbp_r7_h48 | 20,91  | L7S7         | - | -            | -            | MeasOfCorrelation1 | 0,010  | MeasOfCorrelation2 | 0,0155 | Correlation          | 2,25   |

## Заключение

Разработано программное обеспечение для экспериментального исследования и оценки информативности параметров поверхностей переломов костей по 2D-данным для классификации переломов. В качестве параметров рассмотрены текстурные характеристики Харалика, локальные бинарные образцы. Для анализа повреждений костной ткани по фотографиям реализован выбор наиболее информативных признаков. По результатам экспериментов наиболее информативными оказались признаки типа LBP с разными радиусами и текстурная характеристика Харалика Correlation. Отобранные признаки позволяют выполнять классификацию и количественную оценку повреждений костных объектов по их фотоизображениям.

## Библиографические ссылки

1. Волегов П.С., Грибов Д.С., Трусов П.В. Поврежденность и разрушение: обзор экспериментальных работ // Физическая мезомеханика. 2015. Т. 18. № 3. С. 11–24.
2. Разрушение. Т. 1: Микроскопические и макроскопические основы механики разрушения / Под ред. Г. Либовица. М.: Мир, 1973. 620 с.

3. Feichtinger, Hans G. Gabor analysis and algorithms : theory and applications./ Feichtinger, Hans G. and Thomas Strohmer. Boston: Birkhäuser, 1998. 496 p.
4. Laws, K. Rapid texture identification / Kenneth I. Laws // Proc. SPIE 0238. Image Processing for Missile Guidance. 1980. San Diego, USA. Vol. 238. P. 376–381.
5. Haralick R.M., Shanmugam K., Dinstein I.H. Textural features for image classification // IEEE Trans. on systems, man, and cybernetics, 1973. № 6. P. 610–621.
6. Ojala T., Pietikainen M., Maenpaa T. Multiresolution gray-scale and rotation invariant texture classification with local binary patterns // IEEE Transactions on pattern analysis and machine intelligence, 2002. Vol. 24. № 7. P. 971–987.
7. Наследов Д. Математические методы психологического исследования. СПб.: Речь, 2008. 172 с.
8. Kuhn M. Applied Predictive Modeling / Kuhn Max and Kjell Johnson. New York, NY: Springer. 2018. 600 P.
9. Ben-Hur, Asa; Horn, David; Siegelmann, Hava; Vapnik, Vladimir N. "Support vector clustering" // Journal of Machine Learning Research. 2001. № 2. P. 125–137.
10. Geurts P., Ernst D. and Wehenkel L. Extremely randomized trees // Machine Learning. 2006. Vol.63. P.3–42.
11. Breiman L. Random Forests // Machine Learning. 2001. Vol. 45. P. 5–32.

## АУГМЕНТАЦИЯ ДАННЫХ ДЛЯ РЕГУЛЯРИЗАЦИИ В НЕЙРОСЕТЕВЫХ АЛГОРИТМАХ ПОВТОРНОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ ЛЮДЕЙ ПО ВИДЕОДАНЫМ

С.А. Игнатъева<sup>1</sup>, Р.П. Богущ<sup>1</sup>, С.В. Абламейко<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup> *Полоцкий Государственный Университет имени Ефросинии Полоцкой*  
ул. Блохина, д. 29, г. Новополоцк, Беларусь,  
igniteva604@gmail.com, [r.bogush@psu.by](mailto:r.bogush@psu.by)

<sup>2</sup> *Белорусский Государственный Университет*  
п-т. Независимости, д. 4, г. Минск, Беларусь

<sup>3</sup> *Объединенный институт проблем информатики НАН Беларуси*  
ул. Сурганова, 6, г. Минск, Беларусь, [ablameyko@bsu.by](mailto:ablameyko@bsu.by)

Предлагается новый способ аугментации данных и подход к ее применению для регуляризации при обучении сверточной нейронной сети (СНС) для решения задачи повторной идентификации людей при видеонаблюдении. Для аугментации используется циклический сдвиг изображения по вертикали и горизонтали на случайное число пикселей и добавление уменьшенной копии другого изображения. Кроме этого, особенностью является применение двухэтапного обучения СНС. На первом этапе сеть обучается на аугментированных данных, а на втором продолжает обучение на исходных изображениях. Показано, что предлагаемый подход позволяет увеличить значения трех метрик mAP, Rank1 и mINP.

**Ключевые слова:** Ре-идентификация человека; сверточные нейронные сети; регуляризация; аугментация данных.

## DATA AUGMENTATION FOR REGULARIZATION IN NEURAL NETWORK PERSON RE-IDENTIFICATION ALGORITHMS BY VIDEO DATA

S.A. Ihnatsyeva<sup>1</sup>, R.P. Bohush<sup>1</sup>, S.V. Ablameyko<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup> *Euphrosyne Polotskaya State University of Polotsk, Blokhina 29, Novopolotsk, Belarus,*  
igniteva604@gmail.com, [r.bogush@psu.by](mailto:r.bogush@psu.by)

<sup>2</sup> *Belarusian State University, pr. Nezavisimosti 4, Minsk, Belarus*

<sup>3</sup> *United Institute of Informatics Problems, National Academy of Sciences of Belarus,*  
Surganova 6, Minsk, Belarus, [ablameyko@bsu.by](mailto:ablameyko@bsu.by)

A new data augmentation method and an approach to its application for regularization in training a convolutional neural network (CNN) for solving the people re-identification problem in video surveillance are proposed. The method uses two key techniques. First, the cyclic shift is applied to the image pixels in two directions, namely vertically and horizontally. Secondly, subimage replacement of with a reduced copy of another image from

the package is applied. In addition, feature is use of two-stage training CNN. It is shown that the proposed approach allows increasing the values mAP, Rank1 and mINP.

**Keywords:** Person re-identification; convolutional neural networks; regularization; data augmentation.

## **Введение**

Для повторной идентификации (ре-идентификации) человека в распределенных системах видеонаблюдения наиболее эффективным способом извлечения признаков является использование сверточных нейронных сетей (СНС) [1]. Однако, недостаточное количество обучающих данных может приводить к переобучению и неустойчивости обученной модели к новым данным. Для решения проблемы переобучения одним из способов является регуляризация данных. Под регуляризацией в машинном обучении понимают добавление ограничений к архитектуре нейронной сети, функции потерь или входным данным [2]. Техника регуляризации позволяет избежать СНС запоминания обучающих примеров и улучшить обобщающую способность. Примерами регуляризации являются: прореживание нейронных связей СНС; L1- и L2-регуляризация; аугментация данных, при которой часть изображения удаляется или заменяется другой информацией.

Под аугментацией понимают расширение обучающей выборки путем выполнения каких-либо преобразований изображения без привлечения дополнительных данных. Примерами аугментации данных является добавление таких преобразований изображения как поворот, отражение, изменение яркости, контраста и другие, позволяющие увеличить разнообразие обучающей выборки.

### **1. Анализ существующих подходов**

При использовании аугментации данных для регуляризации могут применяться два подхода: преобразование выполняется с заданной степенью вероятности к тензору загружаемого изображения [3] или к тензору пакета изображений [2, 4, 5].

В [3] предлагается метод *random erasing*, который требует удаление фрагмента из исходного изображения. При загрузке пакета изображений на разных эпохах обучения одно и то же изображение может быть загружено как с исходном виде, так и с отсутствующими фрагментами. Это позволяет СНС повысить устойчивость к окклюзиям.

Применение преобразования к пакету изображений рассматривается в [2], где предлагается метод регуляризации с использованием аугмента-

ции CutMix. Суть заключается в том, что фрагмент одного из изображений в пакете накладывается на другое изображение из пакета. Применение CutMix позволяет повысить устойчивость к окклюзиям и более детально изучать отдельные признаки изображений. Схожая идея используется в алгоритме Mixed Single Thumbnail (MST) [4], только фрагмент изображения замещается на уменьшенную копию другого изображения из пакета. Это, повышает устойчивость к окклюзиям и низкому разрешению изображений. Одновременно два изображения обрабатывается и при использовании аугментации mixup [5], при которой два изображения, выбранные из пакета, объединяются с помощью линейной интерполяции. Mixup позволяет улучшить обобщающую способность обученной СНС и снижает чувствительность к запоминанию ошибочных меток.

В [6] предлагается подход, состоящий из трех этапов: На первом этапе модель обучается на исходных неаугментированных данных. На втором этапе определяются области изображения, оказывающие наибольшее влияние на точность предсказания. Для этого методом скользящего окна закрываются разные участки изображения и оценивается, как это влияет на результат. При обнаружении области изображения, без которой сеть не может верно определить класс объекта (идентификационную метку человека), эта область закрывается. На третьем этапе сеть продолжает обучение на изображениях, объединяющих как исходные изображения, так и изображения со скрытыми фрагментами. Такой подход к применению аугментации вынуждает сеть искать не только наиболее очевидные признаки, но и дополнительные особенности, которые могут повысить точность обученной модели.

## **2. Аугментация с использованием циклического сдвига пикселей в изображении и замещены фрагмента в нем**

Предлагаемый метод аугментации (ЦЗФ) состоит из двух шагов: циклический сдвиг изображения по вертикали и горизонтали на некоторое количество пикселей; при формировании пакета, фрагмент изображения замещается другим, уменьшенным изображением. На рисунке представлен пакет из восьми изображений. Изображения (в), д), е), з)) смещены по вертикали и горизонтали. Для всех изображений выполнена замена фрагмента на уменьшенное изображение из пакета. На каждой итерации для выбора уменьшенного изображения используется генератор псевдослучайных чисел. Уменьшенные изображения содержат циклический сдвиг в примерах а), б), в), г). На примере ж) ни к самому изображению, ни к уменьшенному изображению, циклический сдвиг не применялся. При загрузке следующего пакета уменьшенные копии будут иметь другой раз-

мер и место расположения или отсутствовать, а циклический сдвиг будет применяться к иным изображениям.



а) б) в) г) д) е) ж) з)

Пример применения метода аугментации ЦЗФ.

Такой метод позволяет сети повысить устойчивость к местоположению признаков, входному разрешению изображения и окклюзиям, при этом не требует больших вычислительных затрат.

Для снижения значения функции потерь при обучении, вызванной неправдоподобностью обучающих данных по отношению к тестовым данным, к которым аугментация не применяется, предлагается подход, использующий циклический сдвиг пикселей и замещение фрагмента уменьшенной копией другого изображения с применением двухэтапного обучения (ЦЗФД), основная идея которого заключается в том, что обучение включает два этапа. На первом этапе сеть обучается на аугментированных данных, а на втором продолжает обучение на исходных изображениях. Это позволяет более близко подойти к локальному минимуму функции потерь и минимизировать ошибку. Таким образом, сначала сеть учится быть устойчивой к окклюзиям, разрешению изображения и независимости от местоположения признаков, а затем на более низкой скорости обучения корректируется, что позволяет извлекать более надежные признаки.

Предлагаемый нами подход к применению аугментации ЦЗФД заключается в следующем:

- скорость обучения всех слоев СНС в 0.1 раз меньше скорости обучения классификационного слоя, а после 40 эпохи скорость обучения снижается в 0.1 раз;
- первые 45 эпох обучения выполняются с применением аугментации ЦЗФ;
- в течении последующих 15 эпох обучение продолжается на данных без аугментации.

### 3. Результаты экспериментов

Для определения наиболее эффективного метода аугментации данных использовался алгоритм повторной идентификации [7] реализованный на фреймворке pyTorch. Обучение модели выполнено для ResNet-50 и DenseNet-121 без применения предварительного обучения, в течение 60 эпох со скоростью 0,07 для классификационного слоя, и 0,007 для всех остальных слоев СНС, уменьшенными после 40-й эпохи в 0,1 раз, с размером пакета 16, на наборе данных Market-1501. Вероятность применения метода аугментации при проведении экспериментов составляет 0,5. Для ЦЗФД, объединяющего применение аугментации и двухэтапное обучение, значения гиперпараметров не изменяются, но после 45 эпохи на вход СНС подаются исходные изображения. Результаты экспериментов приведены в таблице.

Сравнение методов аугментации для СНС ResNet-50 и DenseNet-121 на наборе данных Market-1501

| Метод             | ResNet-50    |              |              | DenseNet-121 |              |              |
|-------------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|
|                   | mAP          | Rank1        | mINP         | mAP          | Rank1        | mINP         |
| Baseline[6]       | 61,20        | 82,78        | 0,238        | 61,40        | 82,45        | 0,248        |
| Random erasing[1] | 63,38        | 84,26        | 0,255        | 64,39        | 83,31        | 0,276        |
| CutMix[2]         | 64,43        | 85,24        | 0,274        | 64,87        | 84,14        | 0,277        |
| MixUP[4]          | 62,34        | 83,81        | 0,246        | 64,43        | 85,12        | 0,275        |
| MST[3]            | 65,65        | 84,94        | 0,286        | 66,25        | 84,74        | 0,299        |
| ЦЗФ               | 65,67        | 85,84        | 0,294        | 66,23        | 84,44        | 0,308        |
| <b>ЦЗФД</b>       | <b>67,65</b> | <b>86,31</b> | <b>0,326</b> | <b>67,56</b> | <b>85,72</b> | <b>0,328</b> |

Анализ полученных результатов, представленных в таблице, показывает, что использованием ЦЗФД позволяет значительно повысить точность повторной идентификации по всем трем метрикам оценки точности для двух рассмотренных архитектур относительно базовой модели Baseline, а также увеличить точность по сравнению с существующими методами.

#### Заключение

В работе предлагается подход, отличающийся тем, что совмещает циклический сдвиг пикселей изображения, замещение фрагмента уменьшенной копией другого и использует двухэтапное обучение. Во-первых, такой подход позволяет получить большее разнообразие данных, чем если два выполняемых преобразования применять только к одному изображению [3], или только к пакету изображений [2,4], и позволяет повысить устойчивость обученной СНС к местоположению признаков, низкому раз-



решению изображения, окклюзиям и переобучению. Во-вторых, использование двухэтапного обучения позволяет минимизировать значение функции потерь и повысить точность обученной модели. То, что на разных этапах обучения используются различные данные, не позволяет СНС запомнить обучающие примеры, тем самым предотвращая переобучение.

### Библиографические ссылки

1. Ye S., Bohush R., Chen C., Zakharova I., Ablameyko S. Person Tracking and Re-Identification in Video for Indoor Multi-Camera Surveillance Systems *Pattern Recognition and Image Analysis*, 2020. Vol. 30, № 4 P. 827–837. DOI: 10.1134/S1054661820040136
2. Yun S., Han D., Oh S., Chun S., Choe J., Yoo Y.J. CutMix: Regularization Strategy to Train Strong Classifiers With Localizable Features. 2019 IEEE/CVF International Conference on Computer Vision (ICCV), 2019, P. 6022–6031. DOI:10.1109/ICCV.2019.00612
3. Zhong Z., Zheng L., Kang G., Li S., & Yang, Y. Random Erasing Data Augmentation // *AAAI*. 2020. DOI:10.1609/AAAI.V34I07.7000
4. Xie T., Cheng X., Wang X., Liu M., Deng J., Zhou T., Liu M. Cut-Thumbnail: A Novel Data Augmentation for Convolutional Neural Network // *Proceedings of the 29th ACM International Conference on Multimedia*, 2021. DOI:10.1145/3474085.3475302
5. Zhang H., Cissé M., Dauphin Y., Lopez-Paz D. mixup: Beyond Empirical Risk Minimization. URL: <https://arxiv.org/abs/1710.09412>, 2018; (дата обращения: 09.08.2022). DOI:10.48550/arXiv.1710.09412
6. Huang H., Li D., Zhang Z., Chen X., Huang K. Adversarially Occluded Samples for Person Re-identification. 2018 IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition, 2018. P. 5098-5107. DOI:10.1109/CVPR.2018.00535
7. Person ReID baseline pyTorch. URL: [https://github.com/layumi/Person\\_reID\\_baseline\\_pytorch](https://github.com/layumi/Person_reID_baseline_pytorch) (дата обращения: 09.08.2022)

## ЭТАПЫ КОНТРОЛЯ ВХОДНЫХ ДАННЫХ ПРИ РАБОТЕ СИСТЕМЫ АВТОМАТИЧЕСКОГО ВЫЯВЛЕНИЯ ПАТОЛОГИЙ ЛЕГКИХ

А.А. Косарева<sup>1,2</sup>, Д.А. Павленко<sup>2</sup>, Э.В. Снежко<sup>2</sup>, В.А. Ковалев<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
ул. П. Бровки, 6, 220013, г. Минск, kosareva@bsuir.by

<sup>2</sup>Объединенный институт проблем информатики Национальной академии наук  
Беларуси, ул. Сурганова, 6, 220012, г. Минск, vassili.kovalev@gmail.com,  
<https://image.org.by>

Предварительная обработка и отсеивание поступающих данных в систему компьютерной диагностики заболеваний легких является важным этапом, так как напрямую влияет на работу приложения и на отношение пользователя к получаемым результатам. В данном докладе предлагается алгоритм верификации изображений компьютерной томографии (КТ) органов грудной клетки человека, включающий в себя набор тривиальных и нетривиальных чекеров. Наибольшее внимание уделяется нейросетевым методам. Разработанный модуль контроля входных данных имеет точность классификации 100 % на тестовом наборе данных для проверки модальности и точность классификации 89 % на тестовом наборе данных для проверки наличия легких.

**Ключевые слова:** классификация изображений; медицинская визуализация; сверточная нейронная сеть; глубокое обучение; компьютерная диагностика; компьютерная томография; проверка входных данных.

## STAGES OF INPUT DATA CONTROL DURING THE WORK OF AUTOMATIC LUNG PATHOLOGY DETECTION SYSTEM

А.А. Kosareva<sup>1,2</sup>, D.A. Paulenka<sup>2</sup>, E.V. Snezhko<sup>2</sup>, V.A. Kovalev<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, 6 P. Brovki st., 220013,  
Minsk, Belarus, kosareva@bsuir.by

<sup>2</sup>The United Institute of Informatics Problems of the National Academy of Sciences  
of Belarus, 6 Surhanava st., 220012, Minsk, Belarus, vassili.kovalev@gmail.com,  
<https://image.org.by>

Pre-processing and verification of incoming data into a computer-aided diagnosis system of lung diseases is an important step, as it directly affects the output of the application and the user's attitude to the obtained result. This report proposes a chest computed tomography (CT) checking algorithm that includes a set of trivial and non-trivial verification tools. The greatest attention is paid to neural network methods. The result of the developed input data control module is 100% classification accuracy on the modality check dataset and 89% classification accuracy on the lung presence check dataset.

**Keywords:** Image Classification; Medical Imaging; Convolutional Neural Network; Deep Learning; Computer-Aided Diagnosis; Computed Tomography; Input Validation.

## **Введение**

Методы искусственного интеллекта позволяют реализовывать сложные системы второго мнения при автоматизированной диагностике различных заболеваний. Одной из сложностей использования таких инструментов в реальной практике являются некорректные входные данные. При работе с подобными системами на вход может быть подано изображение другой модальности или другой части тела, что приведет к некорректным результатам при работе системы. Например, в одном испытании среди 7830 рентгенограмм грудной клетки, полученных из различных больниц десяти стран, было 564 случая, содержащих ошибочные данные такого рода [1]. Также входные данные могут содержать ряд других ошибок: ошибка расположения, ошибка формата файла, инвертированное изображение и т.д. [2–4]. В связи с этим возникает необходимость разработки алгоритма контроля входных данных, который отсеивает некорректные изображения, загружаемые пользователем.

Разработанный алгоритм предназначен для системы обработки изображений компьютерной томографии (КТ) легких и включает в себя следующие этапы:

1. Последовательность тривиальных проверок, таких как: проверка размерности трехмерного изображения, проверка формата поступающего файла, проверка гистограммы яркости изображений на наличие разброса значений в динамическом диапазоне, проверка минимального размера входного изображения (количество слоев должно быть не менее 25), дополнительная проверка тегов DICOM-изображений, если поступающее изображение пришло в формате DICOM.

2. Проверка модальности. Входное изображение должно являться КТ, а не изображением УЗИ, ПЭТ, МРТ или бинарной маской;

3. Проверка анатомической области. Необходимо убедиться, что входное КТ-изображение содержит легкие в необходимой пропорции для обработки приложением.

## **1. Методология исследования / теоретические основы**

### *Тривиальные проверки*

На рисунке 1 представлен алгоритм тривиальных проверок, позволяющий отсеять изображения, не соответствующие требованиям разработанной интеллектуальной системы.

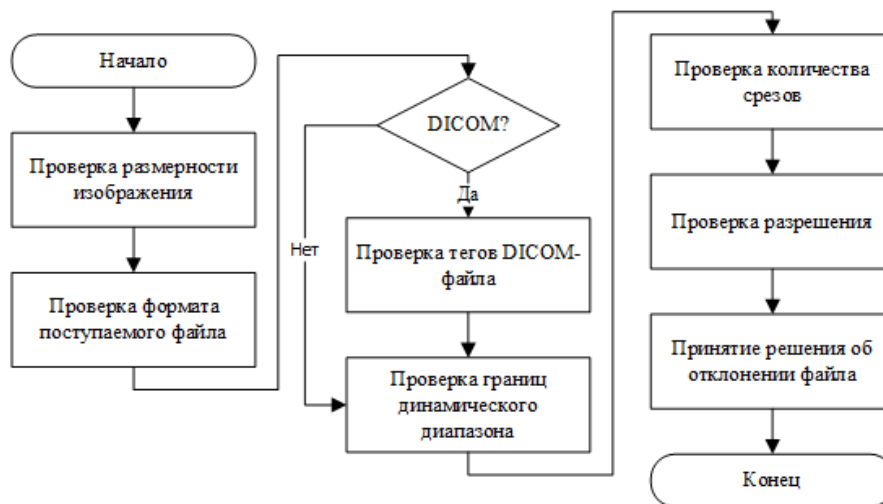


Рисунок 1 – Алгоритм тривиальных проверок входных данных

Разработанная интеллектуальная система принимает трехмерные изображения, содержащие серию срезов компьютерной томографии разрешением  $512 \times 512$  пикселей. При подаче изображений низкого разрешения и малого количества срезов, высока вероятность получить некорректный ответ на выходе системы. Поэтому были установлены минимальные значения разрешения и количества срезов в поступающих на вход трехмерных объемах. Решение об отклонении входного изображения от дальнейшей обработки принимается на каждом этапе алгоритма.

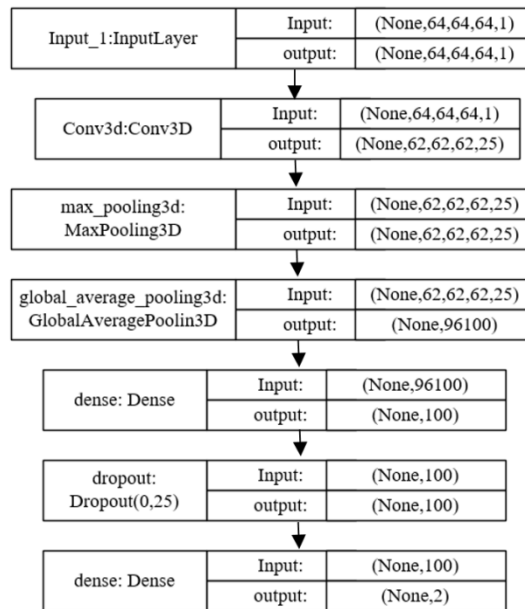
#### *Нетривиальные проверки*

Для разработки системы контроля входных КТ-изображений легких использовались два набора данных:

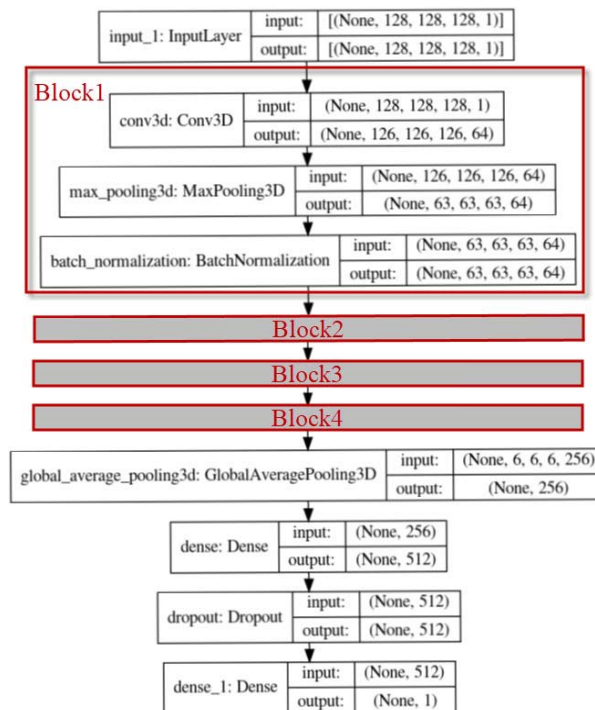
1. 506 изображений разных модальностей (КТ, УЗИ, ПЭТ, МРТ, бинарные маски, маммографические изображения);
2. 668 КТ-изображений разных частей тела (легкие, голова, конечности, абдоминальная область, пустые изображения, шум и т.д.).

Изображения, входящие в подготовленные наборы данных, были взяты из открытых источников [5].

Для разработки модуля проверки модальности и модуля проверки наличия легких на КТ-изображении использовались методы глубокого обучения, основанные на тренировке сверточных нейронных сетей (CNN). Архитектуры используемых CNN представлены на рисунке 2.а для решения задачи проверки модальности и на рисунке 2.б для проверки наличия легких на КТ-изображении.



a)



б)

Рисунок 2 – а) Одноблочная CNN для проверки модальности изображения;  
 б) четырехблочная CNN для проверки наличия легких на КТ-изображении

Параметры нейронной сети для проверки модальности (рисунок 2.а) подбирались на практике в ходе многочисленных испытаний. Исследование показало, что входной слой с разрешением  $64 \times 64$  и сверточный слой с 25 фильтрами оказались приемлемыми. Входные изображения

нормализуются и случайно вращаются на 90, 180 и 270 градусов вокруг трех осей, что исключает неточности, связанные с поворотом изображения.

Перед подачей на вход нейронной сети для проверки наличия легких на КТ-изображении (рисунок 2.б) изображение проходит серию предварительных обработок. Сначала к изображению применяется порог [-1500, 500] для единиц Хаунсфилда [6]. Затем изображение нормализуется к диапазону [-1, 1]. Изменяется размер на 128×128×128 пикселей. После чего к изображению применяется серия трехмерных поворотов и отражений.

## 2. Результаты и их обсуждение

При решении задачи проверки модальности КТ-изображений достигла 100 % точности классификации на тестовом наборе данных. Модель была обучена три раза, состав обучающей выборки менялся при каждом обучении, это не повлияло на точность классификации. Соответственно можно сделать вывод, что результаты прогнозов модели не зависят от состава данных в обучающей выборке. Анализируя 100% точность проверки модальности КТ-изображений, мы обратились к результатам аналогичного исследования для проверки модальности рентгеновских изображений. В ходе экспериментов выяснилось, что тот же метод показал точность менее 70% для рентгеновских изображений. Для улучшения результата нам пришлось увеличить обучающую выборку до 1000 изображений для каждого класса и использовать более продвинутую архитектуру CNN (EfficientNet). Это позволило достичь точности классификации в 99,8%. Поэтому мы предполагаем, что признаки КТ-изображений имеют ряд существенных отличий от признаков МРТ, УЗИ, бинарных масок, гистологических изображений и т.д.

При решении задачи проверки наличия легких на КТ-изображениях обученная нейронная сеть имеет точность классификации 89 % на тестовом наборе данных. Анализ ошибочных прогнозов показал, что CNN ошибочно классифицирует изображения биопсии легких. Семь из девяти (настоящих и искусственно созданных) КТ-биопсий были неверно отнесены к классу «легкие». Возможная причина, по которой КТ-биопсии неправильно классифицируются как «легкие», заключается в том, что их осевой аксиальный вид не отличается от обычных легких. Однако коронарный и сагиттальный виды имеют большие отличия.

## Заключение

Обученные искусственные нейронные сети показали хорошие результаты и используются авторами для контроля входных данных в нейросетевом программном комплексе для поддержки принятия решений при диагностике заболеваний легких на основе рентгеновских и томографических изображений. Модуль контроля входных КТ-изображений имеет точность классификации 100 % на тестовом наборе данных для проверки модальности и точность классификации 89 % на тестовом наборе данных для проверки наличия легких. С помощью разработанного модуля авторы обнаружили девять КТ-изображений легких, которые были ошибочно помещены в набор данных КТ головы CQ500 [7]. Эти КТ-изображения легких были визуально проверены и добавлены в базу изображений легких для повышения точности обучения.

## Библиографические ссылки

1. Rosenthal A, Gabrielian A, Engle E, Hurt DE, Alexandru S, Crudu V, Sergueev E, Kirichenko V, Lapitskii V, Snezhko E, Kovalev V, Astrovko A, Skrahina A, Taaffe J, Harris M, Long A, Wollenberg K, Akhundova I, Ismayilova S, Skrahin A, Mammadbayov E, Gadirova H, Abuzarov R, Seyfaddinova M, Avaliani Z, Strambu I, Zaharia D, Muntean A, Ghita E, Bogdan M, Mindru R, Spinu V, Sora A, Ene C, Vashakidze S, Shubladze N, Nanava U, Tuzikov A, Tartakovsky M. The TB Portals: an Open-Access, Web-Based Platform for Global Drug-Resistant-Tuberculosis Data Sharing and Analysis. *J Clin Microbiol.* 2017 Nov;55(11):3267-3282. DOI: 10.1128/JCM.01013-17. Epub 2017 Sep 13. PMID: 28904183; PMCID: PMC5654911.
2. Kaplan S., Handelman D., & Handelman A. Sensitivity of neural networks to corruption of image classification // *AI Ethics.* 2021. № 1, 425–434. doi.org/10.1007/s43681-021-00049-0.
3. Guan D., Yuan W., Lee Y.K., Lee S.: Identifying mislabeled training data with the aid of unlabeled data // *Appl. Intell.* 2011. № 35. P. 345–358.
4. Brady A.P.: Error and discrepancy in radiology: inevitable or avoidable? // *Insights Imaging.* 2017. № 8. P. 171–182.
5. Clark K., Vendt B., Smith K., Freymann J., Kirby J., Koppel P., Moore S., Phillips S., Maffitt D., Pringle M., Tarbox L., & Prior F. (2013). The Cancer Imaging Archive (TCIA): Maintaining and Operating a Public Information Repository // *Journal of Digital Imaging,* 2013. № 26(6). P. 1045–1057. doi.org/10.1007/s10278-013-9622-7
6. Zunair Hasib & Rahman, Aimon & Mohammed, Nabeel & Cohen, Joseph. // Uniformizing Techniques to Process CT Scans with 3D CNNs for Tuberculosis Prediction. 2020. DOI: 10.1007/978-3-030-59354-4\_15.
7. Chilamkurthy S., Ghosh R., Tanamala S., Biviji M., Campeau NG., Venugopal VK., Mahajan V., Rao P., Warier P. Deep learning algorithms for detection of critical findings in head CT scans: a retrospective study. *The Lancet.* 2018, DOI: 10.1016/S0140-6736(18)31645-3.

## РАСПОЗНАВАНИЕ НА ОСНОВЕ СИНТЕЗА ПАТТЕРНОВ КЛАССОВ

**В.В. Краснопрошин<sup>1</sup>, А.В. Карканица<sup>2</sup>, В.Г. Родченко<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4,  
220030, г. Минск, Беларусь, krasnoproshin@bsu.by

<sup>2</sup>Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, ул. Ожешко, 22,  
230023, г. Гродно, Беларусь, a.karkanica@grsu.by

<sup>3</sup>Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, ул. Ожешко, 22,  
230023, г. Гродно, Беларусь, rovar@grsu.by  
Контактный автор: a.karkanica@grsu.by

Рассмотрен альтернативный подход к распознаванию, основанный на выявлении различительных свойств классов. Вначале предлагается в признаковых пространствах наблюдаемых объектов формировать области определения классов (паттерны). Затем на основе оценок взаимного размещения паттернов выявлять признаковые подпространства, в которых классы не пересекаются.

**Ключевые слова:** Распознавание образов; интеллектуальный анализ данных; машинное обучение.

## RECOGNITION BASED ON THE SYNTHESIS OF CLASS PATTERNS

**V.V. Krasnoproshin<sup>a</sup>, A.V. Karkanitsa<sup>b</sup>, V.G. Rodchenko<sup>c</sup>**

<sup>a</sup>Belarussian State University, Nezavisimosti Avenue, 4,  
220030, Minsk, Belarus, krasnoproshin@bsu.by

<sup>b</sup>Yanka Kupala State University of Grodno, Ozheshko str, 22,  
230023, Grodno, Belarus, a.karkanica@grsu.by

<sup>c</sup>Yanka Kupala State University of Grodno, Ozheshko str, 22,  
230023, Grodno, Belarus, rovar@grsu.by  
Corresponding author: a.karkanica@grsu.by

An alternative approach to pattern recognition based on identifying the distinctive properties of classes is considered. Initially, it is proposed to form domains of classes (patterns) in the feature spaces of observed objects. Then, based on estimates of patterns mutual placement, identify feature subspaces where classes do not intersect.

**Keywords:** Pattern recognition; data mining; machine learning.

### Введение

Одной из приоритетных задач информатики является разработка новых подходов (методов и технологий) анализа больших данных, направленных на увеличение объема извлекаемой из них полезной информации [1, 2].



Известно, что современные тренды развития в области информационных систем связаны в первую очередь с внедрением технологий искусственного интеллекта. Эти технологии наиболее ярко представлены методами машинного обучения (*Machine Learning*) и интеллектуального анализа данных (*Data Mining*) [3, 4].

Различают два вида обучения: *дедуктивное* и *индуктивное*. Дедуктивное обучение предусматривает формализацию знаний экспертов и размещение их в базе знаний. Индуктивное (обучение по прецедентам) – направлено на выявление в данных эмпирических закономерностей [5, 6].

Машинное обучение и интеллектуальный анализ данных ассоциируются с индуктивным обучением. В результате машинного обучения строится алгоритм, приближающий неизвестную целевую зависимость, как на объектах обучающей выборки, так и на всем исходном множестве [7, 8]. В то же время методы интеллектуального анализа данных предусматривают обнаружение ранее неизвестных, практически полезных и доступных интерпретации закономерностей для принятия решений в различных сферах человеческой деятельности [9, 10].

В настоящее время традиционно обучение по прецедентам сводится к решению задачи оптимизации. В данном случае требуется построить алгоритм, который наилучшим образом приближал бы неизвестную целевую зависимость, как на элементах обучающей выборки, так и на всем множестве [11]. Здесь необходимо указать на ряд серьезных проблемных моментов, связанных с использованием такого подхода. Во-первых, процесс обучения удастся реализовать только в автоматизированном режиме, поскольку требуется участие специалиста в области компьютерного анализа данных. Во-вторых, единственным результатом обучения является алгоритм классификации, неявным образом отражающий выявленную скрытую закономерность. Построенный алгоритм фактически представляет собой некий «black box», который не поддается интерпретации. В-третьих, затратив существенные ресурсы на формирование и обработку обучающей выборки, в итоге не удастся получить никаких новых знаний о предметной области [12].

В статье рассмотрен альтернативный подход для реализации процесса обучения по прецедентам. Подход основан на исследовании свойств классов, содержащихся в сочетании различных признаков и обеспечивающих различение классов. Описан метод построения и сравнения паттернов классов в признаковых пространствах, сформированных на основе сочетаний признаков из априорного словаря.

## 1. Об альтернативном подходе к распознаванию

Распознавание образов относится к числу фундаментальных проблем информатики, которая изучается в рамках теории интеллектуальных систем. Под распознаванием в широком смысле этого термина подразумевается процедура отнесения исходных данных (на основе выделения различительных признаков и свойств) к определенному классу. При этом класс представляет собой некоторое множество объектов, обладающих набором общих свойств.

В процессе построения систем распознавания образов решаются три основные подзадачи. Первая посвящена представлению исходных данных, полученных для распознаваемых объектов в результате измерений. Вторая связана с выделением существенных признаков и свойств из исходных данных, а третья заключается в нахождении оптимальных решающих правил классификации [13].

В настоящее время обучение в системах распознавания традиционно сводится к оптимизационной задаче, в рамках которой строятся решающие правила, обеспечивающие экстремум заранее выбранного критерия. Ее решение начинается с выбора исходной модели (*параметрического семейства алгоритмов, реализующих решающее правило*). Затем на основе данных обучающей выборки производится многократное выполнение сценария «*тренинг + тестирование*». По существу, обучение представляет собой итерационный процесс, когда с помощью положительных и отрицательных подкреплений формируются оптимальные значения параметров алгоритма распознавания (*классификатора*) [14].

Фактически в теории распознавания образов сложился и используется классический подход к обучению по прецедентам, который предусматривает построение (на основе данных обучающей выборки) прогностического алгоритма:

*задано пространство описания объектов и в этом пространстве необходимо построить поверхность, разделяющую классы (Рисунок 1).*

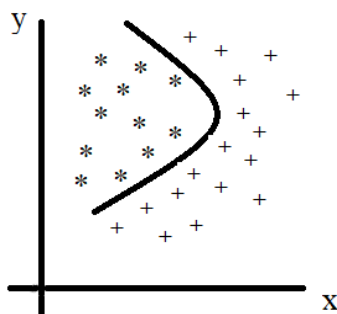


Рисунок 1 – Пример разделения двух классов кривой

В настоящее время на основе классического подхода удалось эффективно решить большое число практически полезных задач, особенно в рамках использования технологий искусственных нейронных сетей [15].

Однако детальный анализ и практический опыт использования данного подхода позволяют указать на наличие у него ряда существенных ограничений и недостатков. Во-первых, выбор модели является нетривиальной задачей, которая выполняется специалистом в области компьютерного анализа данных. И, как следствие, весь процесс обучения удается реализовать только в автоматизированном режиме. Во-вторых, результатом обучения является практически полезный алгоритм классификации, представляющий собой «*black box*», механизм работы которого неизвестен, то есть невозможно никак проинтерпретировать. В-третьих, построенный алгоритм является *единственно* полезным результатом. То есть, затратив на формирование обучающей выборки серьезные ресурсы, в итоге удается построить *только* алгоритм классификации, но никак не расширить свои знания ни о свойствах классов, ни о предметной области.

От указанных выше недостатков можно избавиться в случае использования предлагаемого альтернативного подхода. Когда акцент в обучении направлен не на построение алгоритма классификации, а на исследование свойств классов с целью выявления тех из них, которые обеспечивают различение классов.

Процесс обучения предлагается строить на основе гипотезы компактности, которая гласит, что в пространстве признаков образам классов соответствуют компактные множества:

*задано пространство описания объектов и необходимо проверить выполняется ли в этом пространстве условие гипотезы компактности [16].*

На рисунке 2 показано, что на основе наблюдаемых прецедентов двух классов (\* и +) и пары признаков (x, y) построены области определения классов (*паттерны*), которые не пересекаются. Отметим, что пара признаков (x, y) обладает свойством различения классов, а построение классификатора на основе выявленного свойства пары превращается в тривиальную процедуру.

Если априорный словарь включает  $n$  признаков, то из них можно сформировать  $2^n - 1$  различных сочетаний. Тогда, казалось бы, в процессе обучения необходимо проверить выполнение гипотезы компактности в каждом из  $2^n - 1$  соответствующих подпространств описания объектов. Однако при детальном рассмотрении свойств отдельных сочетаний очевидным является факт, что если, например, пара признаков (x, y) обладает

свойством различения классов, то это свойство сохраняется и у всех остальных сочетаний, содержащих эту пару.

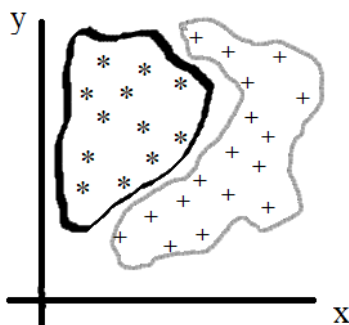


Рисунок 2 – Пример взаимного размещения паттернов двух классов

## 2. Алгоритм обучения

В основе предлагаемого подхода лежит идея гипотезы компактности. В пространстве описания наблюдаемых объектов предлагается строить области определения классов и на основе оценки их взаимного размещения проверить условие выполнения гипотезы компактности.

Отметим, что построение на основе наблюдаемых прецедентов области определения класса представляет собой фактически *синтез паттерна класса*, а проверка гипотезы компактности выполняется на основе *сравнения паттернов классов*.

В данном случае постановка задачи распознавания формально выглядит следующим образом.

*Пусть заданы:*

*множество описаний объектов  $X$ , априорный словарь признаков  $F=\{f_1, \dots, f_n\}$  и алфавит классов  $Y=\{y_1, \dots, y_k\}$ . И пусть обучающая выборка  $X^m=\{(x_1, y_1), \dots, (x_m, y_m)\}$  сформирована на основе словаря  $F$ , а  $V=\{v_1, \dots, v_q\}$  (где  $q=2^n-1$ ) – множество всевозможных сочетаний признаков из  $F$ .*

*Требуется найти такие сочетания признаков из  $V$ , для которых в соответствующем признаковом подпространстве паттерны классов не пересекаются.*

Алгоритм нахождения сочетаний признаков из  $V=\{v_1, \dots, v_q\}$ , для которых в соответствующем признаковом подпространстве паттерны классов не пересекаются, следующий:

Шаг 1. Выбираем из  $V$  подмножество  $V^+=\{v^+_1, \dots, v^+_n\}$ , где  $v^+_i$  содержит только один признак.

Шаг 2. Для каждого  $v_i^+$  строим паттерны классов и проводим оценку их взаимного размещения [17].

Шаг 3. Включаем  $v_i^+$  в результирующее множество  $V^* = \{v_1^*, \dots, v_k^*\}$  в случае, если паттерны классов не пересекаются.

Шаг 4. Исключаем из множества  $V = \{v_1, \dots, v_q\}$  подмножество  $V^+ = \{v_1^+, \dots, v_n^+\}$  и получаем  $V^\wedge = \{v_1^\wedge, \dots, v_p^\wedge\}$ .

Шаг 5. Исключаем из  $V^\wedge$  все сочетания  $v_i^\wedge$ , которые содержат любое сочетание из  $V^* = \{v_1^*, \dots, v_k^*\}$ .

Шаг 6. Выбираем очередное сочетание  $v_i^\wedge$  из  $V^\wedge$  и на его основе строим признакововое пространство.

Шаг 7. В этом признакововом пространстве строим паттерны классов и проводим оценку их взаимного размещения.

Шаг 8. Если паттерны классов не пересекаются, то сочетание  $v_i^\wedge$  включаем в результирующее множество  $V^*$ , а из  $V^\wedge$  исключаем все сочетания, содержащие  $v_i^\wedge$ ;

Шаг 9. Повторяем шаги 6 – 8 до тех пор, пока  $V^\wedge$  не станет пустым.

В результате выполнения алгоритма будет построено множество  $V^* = \{v_1^*, \dots, v_t^*\}$ , где  $0 \leq t \leq q$ . Для каждого сочетания  $v_i^* \in V^*$  формулируем выявленную закономерность: «в пространстве сочетания признаков  $v_i^*$  классы не пересекаются».

Поскольку в рамках конкретной прикладной задачи каждое сочетание  $v_i^*$  можно проинтерпретировать, то и все выявленные закономерности могут быть проинтерпретированы.

Каждое сочетание признаков из  $V^*$  определяет пространство решений, в котором паттерны классов не пересекаются, а потому построение алгоритмов классификации принципиальных затруднений не вызывает.

## Заключение

В статье рассмотрен альтернативный подход к проблеме распознавания образов. Предложено в процессе обучения отказаться от общепринятого целеполагания на построение алгоритма классификации в пользу исследования свойств классов: выявление среди них тех, которые обеспечивают различение классов.

Описан алгоритм обучения, который в автоматическом режиме на основе признаков априорного словаря и данных обучающей выборки выявляет сочетания признаков, которые обеспечивают различение классов. В результате удается не только построить классификатор, но и обнару-

жить ранее неизвестные и интерпретируемые закономерности в предметной области.

### Библиографические ссылки

1. Загоруйко Н.Г. Прикладные методы анализа данных и знаний. Новосибирск: ИМ СО РАН, 1999. 270 с.
2. Краснопрошин В.В., Родченко В.Г. Обучение по прецедентам на основе анализа свойств признаков // Доклады БГУИР. 2017. № 6. С. 35–41.
3. Плас Дж.В. Python для сложных задач: наука о данных и машинное обучение. СПб.: Питер, 2018. 576 с.
4. Барсегян А.А., Куприянов М.С., Степаненко В.В., Холод И.И. Технологии анализа данных: Data Mining. Text Mining, Visual Mining, OLAP. СПб.: БХВ-Петербург, 2007. 384 с.
5. Аркадьев А.Г., Браверман Э.М. Обучение машины распознаванию образов. М.: Наука, 1964. 112 с.
6. Краснопрошин В.В., Образцов В.А. Проблема принятия решений по прецедентности: разрешимость и выбор алгоритмов // Выбр. навуц. працы Беларус. дзярж. ун-та. 2001. № 6. Р. 285–311.
7. Машинное обучение [Электронный ресурс]. URL: [http://www.machinelearning.ru/wiki/index.php?title=Machine\\_Learning](http://www.machinelearning.ru/wiki/index.php?title=Machine_Learning) (дата обращения: 21.08.2022).
8. Флах П. Машинное обучение. Наука и искусство построения алгоритмов, которые извлекают знания из данных. М.: ДМК Пресс, 2015. 402 с.
9. Data mining [Электронный ресурс]. URL: [https://ru.wikipedia.org/wiki/Data\\_mining](https://ru.wikipedia.org/wiki/Data_mining) (дата обращения: 21.08.2022).
10. Краснопрошин В.В., Родченко В.Г. Классификация на основе пространств решений // Доклады БГУИР. 2019. № 6. С. 20-25. DOI: 10.35596/1729-7648-2019-124-6-20-25.
11. Рашка С. Python и машинное обучение. М.: ДМК Пресс, 2017. 418 с.
12. Rodchenko V. Pattern Recognition: Supervised Learning on the Bases of Cluster Structures. 13th International Conference, PRIP 2016 Minsk, Belarus, October 3-5, 2016, Communications in Computer and Information Science, Springer. 2017. P. 106-113. DOI: 10.1007/978-3-319-54220-1\_11
13. Ту Дж., Гонсалес Р. Принципы распознавания образов. М.: Мир, 1978. 412с.
14. Васильев В.И. Проблема обучения распознаванию образов. К.: Выща шк. Головное изд-во, 1989. 64 с.
15. Хайкин С. Нейронные сети: полный курс, 2-е изд. М.: ООО “И.Д. Вильямс”, 2016. 1104 с.
16. Белозерский Л.А. Современный взгляд на гипотезу компактности // Искусственный интеллект. 2005. № 3. С. 5–12.
17. Краснопрошин В.В., Родченко В.Г. Кластерные структуры и их применение в интеллектуальном анализе данных // Информатика. 2016. № 2. С. 71–77.

## МЕТОД РЕДУЦИРОВАНИЯ НЕЙРОСЕТЕВЫХ МОДЕЛЕЙ КОМПЬЮТЕРНОГО ЗРЕНИЯ

А.А. Крощенко, В.А. Головки

УО «Брестский государственный технический университет», kroschenko@gmail.com  
Corresponding author: kroschenko@gmail.com

В данной статье предлагается подход к редуцированию полносвязных нейронных сетей с помощью классического и модифицированного предобучения глубоких нейронных сетей. Авторами продемонстрировано, что данный подход позволяет существенно уменьшить количество параметров обучаемой нейронной сети практически без уменьшения обобщающей способности. Возможности предложенного метода продемонстрированы на классических выборках компьютерного зрения MNIST, CIFAR10 и CIFAR100.

**Ключевые слова:** Глубокие нейронные сети; редукция параметров нейронных сетей; предобучение глубоких нейронных сетей; компьютерное зрение; сэмплирование Гиббса.

## REDUCTION METHOD FOR NEURAL NETWORK MODELS OF COMPUTER VISION

A.A. Kroshchanka, V.A. Golovko<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Brest State Technical University, gva@bstu.by*

This article proposes an approach to the reduction of fully connected neural networks using classical and modified pre-training of deep neural networks. The authors have demonstrated that this approach can significantly reduce the number of parameters of the trained neural network with little or no reduction in the generalizing ability. The capabilities of the proposed method are demonstrated on the classical computer vision datasets MNIST, CIFAR10 and CIFAR100.

**Keywords:** Deep neural networks; neural network parameter reduction; deep neural network pretraining; computer vision,; Gibbs sampling.

### Введение

Полносвязные слои нейронных сетей в сравнении со сверточными содержат большее количество настраиваемых параметров, однако в задачах компьютерного зрения сверточные нейронные сети показывают существенно лучшие результаты, чем полносвязные. Таким образом, очевидно, что в полносвязных сетях при большем количестве настраиваемых параметров, они используются менее оптимально. Можно предположить,

что указанные «избыточные» параметры могут быть отброшены без существенного ухудшения эффективности работы сети. Важный вопрос, возникающий при таком редуцировании, касается самого алгоритма отсеивания малоинформативных параметров. К настоящему моменту предложено несколько работ, в которых авторами выполняется уменьшение размерности нейросетевых архитектур (например, [1], [2]).

Редуцирование параметров нейросетевой модели позволяет добиться уменьшения количества настраиваемых параметров, что может быть актуальным при применении нейронных сетей на устройствах с ограниченными аппаратными возможностями (одноплатные компьютеры, мобильные телефоны и т.д.). Применение при этом специальных методик для хранения разреженных матриц позволяет ускорить работу архитектуры. Важно, чтобы при этом сеть сохраняла свою обобщающую способность.

## 1. Теоретические основы

С появлением метода предобучения, предложенного Д. Хинтоном [3], любые, даже достаточно глубокие нейронные сети получили возможность обучаться на выборках небольшого размера с сохранением общей эффективности обученной сети.

Данный метод основывается на представлении слоев нейронной сети в виде ограниченных машин Больцмана (Restricted Boltzmann Machine – RBM) [4]. RBM состоит из двух слоев стохастических бинарных нейронных элементов, которые соединены между собой двунаправленными симметричными связями (рис. 1). Входной слой нейронных элементов называется видимым (слой  $X$ ), а выходной слой – скрытым (слой  $Y$ ). Таким образом, любую глубокую нейронную сеть можно представить последовательностью RBM-сетей.

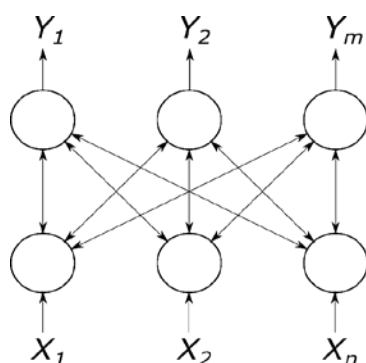


Рисунок 1 – Структура ограниченной машины Больцмана

RBM является стохастической нейронной сетью, в которой состояния видимых и скрытых нейронов меняются в соответствии с вероятностной версией сигмоидной функции активации:



$$p(y_j | x) = \frac{1}{1 + e^{-S_j}}, S_j = \sum_{i=1}^n w_{ij} x_i + T_j, \quad p(x_i | y) = \frac{1}{1 + e^{-S_i}}, S_i = \sum_{j=1}^m w_{ij} y_j + T_i.$$

В RBM нейроны скрытого слоя – это детекторы признаков, которые обнаруживают закономерности входных данных. Основная задача обучения состоит в воспроизведении распределения входных данных на основе состояний нейронов скрытого слоя как можно точнее.

Можно получить следующие правила для обучения RBM-сети [3]. В случае применения CD-1 (одношаговый вариант contrastivedivergence (CD)) для последовательного обучения имеем

$$w_{ij}(t+1) = w_{ij}(t) + \alpha(x_i(0)y_j(0) - x_i(1)y_j(1)),$$

$$T_i(t+1) = T_i(t) + \alpha(x_i(0) - x_i(1))$$

$$T_j(t+1) = T_j(t) + \alpha(y_j(0) - y_j(1))$$

Из последних выражений видно, что правила обучения RBM минимизируют разницу между оригинальными данными и данными, генерируемыми моделью. Генерируемые моделью данные получаются при помощи алгоритма сэмплирования Гиббса.

Обучение нейронной сети происходит на основе «жадного» алгоритма послойного обучения (greedy layer-wise algorithm). В соответствии с ним последовательно формируются и обучаются RBM на основе слоев исходной нейронной сети (рис. 2).

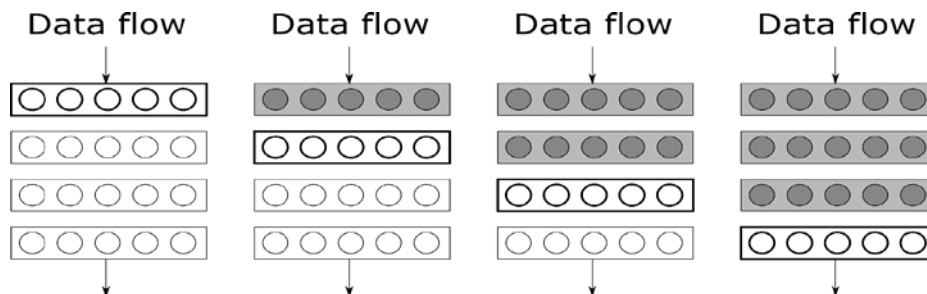


Рисунок 2– Жадный алгоритм предобучения нейронной сети

В результате такого обучения без учителя можно получить подходящую «хорошую» начальную инициализацию настраиваемых параметров глубокой нейронной сети. После этого осуществляется подстройка параметров всей сети (finetuning) при помощи алгоритма обратного распространения ошибки или алгоритма «бодрствования и сна» (wake-sleep algorithm) [5]

Рассмотрим метод для редуцирования полносвязной нейронной сети, базирующийся на применении процедуры предобучения [6].

Применение данного метода производится в три этапа:

1. Предобучение НС, представленной как последовательность RBM, по «жадному» алгоритму;

2. Обнуление весовых коэффициентов нейронной сети, не превышающих некоторый заданный параметр редуцирования  $t > 0$ . Иначе говоря, весовые коэффициенты, попадающие в интервал  $[-t, t]$  отбрасываются и в дальнейшем обучении не принимают участия;

3. Точная настройка (finetuning) получившейся редуцированной архитектуры, например, методом обратного распространения ошибки.

В этап 2 может также включаться дополнительный шаг сжатия разреженной параметрической матрицы, позволяющий добиться более компактного представления полносвязной архитектуры.

## 2. Результаты и их обсуждение

Продемонстрируем эффективность предложенного подхода на примере редуцирования различных архитектур полносвязных нейронных сетей, применяемых для классификации изображений из выборок MNIST [7], CIFAR10 и CIFAR100 [8].

Нами были проведены серии экспериментов, включающих различные используемые выборки и архитектуры.

Ниже для рассматриваемых выборок приведены основные параметры обучения моделей (табл 1).

Таблица 1 – Основные параметры обучения

|              |                          |            |
|--------------|--------------------------|------------|
| Обучение     | Скорость обучения        | 0.05-0.1   |
|              | Размер мини-батча        | 100        |
|              | Моментный параметр       | 0.9        |
|              | Количество эпох обучения | 50-100     |
| Предобучение | Скорость обучения        | 0.05-0.2   |
|              | Размер мини-батча        | 32-100     |
|              | Моментный параметр       | [0.5, 0.9] |
|              | Количество эпох обучения | 10         |

В результате вычислительного эксперимента были получены результаты для различных архитектур НС и значений параметра редуцирования  $t$  (табл.2).

Таблица 2 - Результаты обучения НС (по столбцам: тип обучения, эффективность, количество настраиваемых параметров, процент редуцированных параметров, архитектура модели и используемая выборка)

|                  |           |       |          |       |  |
|------------------|-----------|-------|----------|-------|--|
| Нередуцированная |           | 98.63 | 1276810  | 0     | [784, 800, 800, 10]<br><br>MNIST                           |
| Редуцированная   | $t = 0.2$ | 98.61 | 233760   | 81.69 |  |
|                  | $t = 0.5$ | 98.03 | 32524    | 97.45 |  |
|                  | $t = 0.8$ | 97.1  | 17061    | 98.66 |  |
| Нередуцированная |           | 98.76 | 5747210  | 0     | [784, 1600, 1600, 800, 800, 10]<br><br>MNIST               |
| Редуцированная   | $t = 0.2$ | 98.51 | 710734   | 87.63 |  |
|                  | $t = 0.5$ | 98.01 | 54709    | 99.05 |  |
|                  | $t = 0.8$ | 96.9  | 25385    | 99.56 |  |
| Нередуцированная |           | 58.56 | 3844682  | 0     | [3072, 1024, 512, 256, 128, 64, 10]<br><br>CIFAR10         |
| Редуцированная   | $t = 0.2$ | 58.69 | 409211   | 89.36 |  |
|                  | $t = 0.5$ | 42.08 | 29033    | 99.24 |  |
|                  | $t = 0.8$ | 23.02 | 10058    | 99.74 |  |
| Нередуцированная |           | 57.28 | 1746506  | 0     | [3072, 512, 256, 128, 64, 10]<br><br>CIFAR10               |
| Редуцированная   | $t = 0.2$ | 56.83 | 220037   | 87.40 |  |
|                  | $t = 0.5$ | 45.29 | 20431    | 98.83 |  |
|                  | $t = 0.8$ | 10.0  | 8599     | 99.51 |  |
| Нередуцированная |           | 20.84 | 13290788 | 0     | [3072, 3072, 1024, 512, 256, 128, 64, 100]<br><br>CIFAR100 |
| Редуцированная   | $t = 0.2$ | 20.77 | 1304525  | 90.18 |  |
|                  | $t = 0.5$ | 13.4  | 49847    | 99.62 |  |
|                  | $t = 0.8$ | 2.67  | 21329    | 99.84 |  |

## Заключение

В данной статье предложен подход к упрощению (редуцированию) структур полносвязных нейронных сетей, базирующийся на процедуре предобучения для сетей глубокого доверия. Полученные результаты демонстрируют эффективность предложенного метода. Так, для классических выборок компьютерного зрения было продемонстрировано, что упрощение структуры позволяет без потери в точности итоговой дообученной нейронной сети получить более простой вариант архитектуры. В ка-

честве направления дальнейших исследований могут рассматриваться изучение и применение методов компактного хранения параметров редуцированной архитектуры, а также применение предложенного подхода для упрощения структуры сверточных слоев.

Данная работа выполнена при поддержке белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований БРФФИ, проект **Ф22КИ-046**.

### Библиографические ссылки

1. Chai W. ProdSumNet: reducing model parameters in deep neural networks via product-of-sums matrix decompositions. InarXiv. 2018. URL: <https://arxiv.org/pdf/1809.02209.pdf>. (дата обращения: 05.01.2022.)
2. Kyuahn K., Jaeyong C. Reducing Parameters of Neural Networks via Recursive Tensor Approximation // Electronics. 2022. №11(214).
3. Hinton G., Osindero S., Teh Y. A fast learning algorithm for deep belief nets. Neural Computation. 2006. № 18. P. 1527–1554.
4. Smolensky P. Chapter 6: Information Processing in Dynamical Systems: Foundations of Harmony Theory. Parallel Distributed Processing: Explorations in the Microstructure of Cognition. Foundations // MIT Press. 1986. № 1. P. 194–281.
5. Hinton G., Dayan P., Frey B., Neal R. The ‘Wake-Sleep’ Algorithm for Unsupervised Neural Networks // Science. 1995. № 268. P. 1158–1161.
6. Kroshchanka A., Golovko V. The Reduction of Fully Connected Neural Network Parameters Using the Pre-training Technique. 11th IEEE International Conference on Intelligent Data Acquisition and Advanced Computing Systems: Technology and Applications (IDAACS) // IEEE. 2021. № 2. P. 937-941.
7. LeCun Y., Cortes C., Burges J. The MNIST database of handwritten digits. MNIST handwritten digit database. 2013. URL: <http://yann.lecun.com/exdb/mnist/>. (дата обращения: 05.01.2022.)
8. Krizhevsky A. Learning Multiple Layers of Features from Tiny Images. Tech report. 2009. P.32–33.

## ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЙ ЦЕНТР БИОМЕДИЦИНСКОЙ И МЕДИЦИНСКОЙ ИНФОРМАТИКИ

**В.Г. Левашенко<sup>1</sup>, Е.Н. Зайцева<sup>1</sup>, З. Султанова<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*Университет г. Жилина, Словакия, ул. Универзитна, 8215/1, 01026, г. Жилина, Словакия, vitality.levashenko@fri.uniza.sk*

<sup>2</sup>*Западно-Казахстанский аграрно-технический университет им. Жангир хана, ул. Жангир хана, 51, Уральск, Казахстан*

Медицинская и биомедицинская информатика (БМИ) – динамичная и быстро развивающаяся область. Разрабатываемые в БМИ технологии являются основой для создания персонализированного, более точного, безопасного и экономичного здравоохранения. Повышенный интерес к образованию и обучению БМИ приводит к трансформационным тенденциям в создании новых образовательных программ в университетах Европы и мира. В работе представлен результат создания новой специальности в данной предметной области. Подготовленные материалы и программное обеспечение находятся в свободном доступе. Это обеспечивает их устойчивость и развитие. При создании учебных материалов делается акцент на актуальные знания в области БМИ и их практическое использование в технических и медицинских системах. Все это создает благоприятную среду для сотрудничества между техническими, медицинскими университетами и предприятиями в БМИ, что позволяет получить множество дополнительных знаний, навыков и компетенций.

**Ключевые слова:** Медицинская и биомедицинская информатика; новая учебная программа; программное обеспечение; анализ данных.

## UNIVERSITY-INDUSTRY EDUCATIONAL CENTRE IN BIOMEDICAL AND MEDICAL INFORMATICS

**Vitaly Levashenko<sup>a</sup>, Elena Zaitseva<sup>a</sup>, Zamzagul Sultanova<sup>b</sup>**

<sup>a</sup>*Žilinská Univerzita v Žiline, Univerzitná 8215/1, 010 26 Žilina, Slovakia, vitality.levashenko@fri.uniza.sk*

<sup>b</sup>*Zhangir Khan West Kazakhstan Agrarian-Technical University, Jangir Khan St 51, Uralsk, Kazakhstan, zamzagulsultan267@gmail.com  
Corresponding author: vitality.levashenko@fri.uniza.sk*

Medical and Biomedical Informatics (BMI) is a dynamic and rapidly developing area. The technologies developed at BMI are the basis for creating personalized, more accurate, safer, and more cost-effective healthcare. The increased interest in the education and training of BMI leads to transformational trends in the creation of new educational programs at universities in Europe and the world. The paper presents the result of creating a new specialty in this subject area. Prepared materials and software are freely available. This ensures their stability and development. When creating training materials, emphasis is placed

on current knowledge in the field of medical and medical sciences and their practical use in technical and medical systems. All this creates a favorable environment for cooperation between technical, medical universities, and enterprises in BMI, which allows you to get a lot of additional knowledge, skills, and competencies.

**Keywords:** Medical and Biomedical Informatics; new master study program; software; analysis of data.

## **Введение**

Внедрение информационно-коммуникационных технологий (ИКТ) в сферу здравоохранения требует привлечения квалифицированных специалистов в этой области. Высшее образование является наиболее подходящим инструментом для улучшения квалификации специалистов, работающих в сфере ИКТ и здравоохранения. Медицинская и биомедицинская информатика (БМИ) - это междисциплинарная область, объединяющая предметные знания из биомедицины и информатики (включая ИКТ, интеллектуальный анализ данных и машинное обучение и пр.) [1]. Успешные исследования в области БМИ привели к разработке инновационных технологий, диагностических и терапевтических методов, ведущих к радикальным изменениям и улучшениям в оказании медицинской помощи [2]. Согласно отчетам ВОЗ, ИКТ являются неотъемлемой частью медицины и их совместное использование активно развивается в Словакии [3]. Развивающиеся междисциплинарные области предъявляют новые требования к ключевым компетенциям, что создает дополнительные проблемы для вовлеченных специалистов (например, обучение ИКТ и биомедицинская информатика). Учитывая эту динамичную ситуацию, студенты и будущие инженеры должны адаптироваться к существующим или будущим потребностям в наращивании потенциала и возможностей (т.е. новой форме знаний, способностей и навыков). Это устранило бы существующий в настоящее время разрыв между двумя изолированными группами, в одну из которых входят ИКТ-специалисты (программисты и системотехники), а в другую группу работники из медицинской и биомедицинской среды.

Это требует постоянного совершенствования программ профессионального обучения, и их адаптации к изменяющимся потребностям рынка. Будущим ИКТ-специалистам необходимо быть готовыми к технологическим изменениям в сфере здравоохранения [4]. Таким образом, необходимо разработать эффективную и инновационную учебную среду совместными усилиями группы экспертов (из медицинских и технических областей) с различным опытом [5]. Необходимо объединить теорию и практики, связанные с медицинской информатикой, чтобы помочь обеспечить

целостное обучение студентов и организовать совместную работу специалистов медицинских, технических вузов и предприятий. Т.е. объединить для постоянного сотрудничества три группы пользователей: технических, медицинских вузов/факультетов и компании, являющиеся производителями и поставщиками программных решений для здравоохранения.

Словацкие университеты предлагают несколько учебных программ, в которых студенты приобретают знания в области медицины, биологии, физики, информатики и информационных технологий. В первую очередь, это учебные программы биомедицинской физики (Университет Коменского – Факультет математики, физики и информатики в сотрудничестве с Медицинским факультетом; Технический университет Кошице – Факультет машиностроения; и Университет Жилины – Факультет электротехники и информационных технологий). Выпускники этих факультетов трудоустраиваются в медицинских учреждениях и производственных предприятиях в качестве электротехников и схемотехников, занимающихся эксплуатацией, разработкой и производством медицинских приборов и оборудования. Факультет математики, физики и информатики Университета Коменского предлагает бакалаврам учебную программу по биоинформатике, выпускники которой трудоустраиваются в биомедицинских лабораториях в качестве администраторов компьютерных технологий. Однако, указанные образовательные программы недостаточно отражают потребность в подготовке инженеров-программистов, которые могли бы общаться с врачами, биохимиками и инженерами-биомедиками и, исходя из их требований, создавать сложные информационные средства для медицинских учреждений, специализированных программные средства анализа биомедицинских данных и системы поддержки принятия решений в диагностике и лечении. Решение этой задачи и реализуется на Факультете управления и информатики Жилинского университета в Жилине.

## **1. Полученные результаты**

Новая учебная программа по биомедицинской информатике разработана на Факультете управления и информатики Жилинского университета в Жилине и одобрена Высшей Аккредитационной Комиссией Словацкой Республики. Эта программа обеспечивает подготовку специалистов в области прикладной информатики (программистов), ориентированных на создание медицинских и биомедицинских приложений. В рамках программы предложены несколько новых предметов, направленных на обучение основам медицины и биомедицины. Так, например, учебный план новой программы БМИ включает следующие предметы:

- *Основы теоретической медицины.* В рамках предмета студент ознакомится с профессиональной медицинской терминологией и биологией живых систем, приобретет базовые знания о строении и функциях человеческого организма с акцентом на морфологию и функции жизненно важных тканей, органов и систем. В рамках практических занятий он знакомится с основами трехмерного моделирования анатомических структур и его использования в медицинской практике.
- *Медицинская информатика.* После изучения предмета студент разбирается в терминологии медицинской информатики, ее взаимодействии со смежными областями. Студент знакомится со структурой электронных медицинских карт, стандартами хранения медицинской и биомедицинской информации, основами теле-медицины а также принципами доказательной медицины и критического мышления в клинической практике. Здесь рассматривается реальная информационная система и электронное обучение в здравоохранении; больничные, радиологические и лабораторные информационные системы, принципы работы с ними; важность систематических обзоров для доказательной медицины и др.
- *Программные средства биомедицинской информатики.* В рамках изучения предмета студент получает навыки работы в выбранных программных средствах, знакомится с работой в среде разработки порграммных приложений, учится анализировать данные и создавать собственные приложения в пакете Matlab и моделировать в среде Simulink.
- *Биомолекулярная информатика и химия.* После изучения этого предмета студент владеет основами химической номенклатуры, основными химическими расчетами, понимает строение, свойства и функции биологически важных веществ - углеводов, белков, липидов и нуклеиновых кислот, знает основные принципы обмена веществ, превращения энергии, клеточный цикл, деление и дифференцирование клеток, передача генетической информации в живых организмах и знакомится с основами обработки данных и работы с биологическими базами данных. Изучает возможности программных средств в анализе биологических данных (РНК, ДНК/белковые последовательности), а также основы статистической оценки и машинного обучения.
- *Базы данных и приобретение медицинских знаний.* Предмет представляет основные методы, связанные с получением новых знаний и зависимостей на основе анализа данных. Лекции и практические занятия охватывают вопросы представления и получения знаний, ос-



новые термины и определения, алгоритмы кластеризации и классификации, статистические и другие методы преобразования данных.

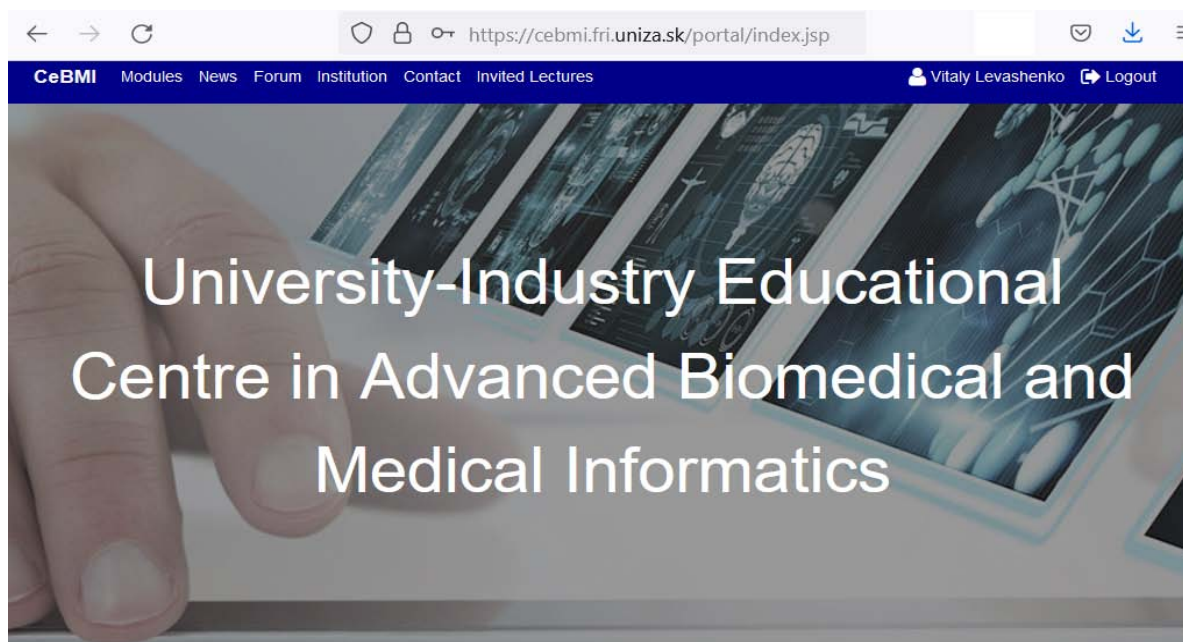
- *Прикладная информатика в доклинической медицине.* После изучения предмета студент обладает базовыми знаниями по физиологии, биохимии физиологических функций и клинической биохимии, иммунологии и патологической физиологии. Студент получит представление о функционировании человеческого организма, а также о возможностях использования компьютерных технологий в диагностике и анализе медицинских данных (например, классификация и обработка сигналов ЭКГ, МРТ и др. с использованием методов интеллектуального анализа данных; сегментации и визуализации данных).
- *Анализ надежности.* После изучения предмета студент приобретает знания в области оценки состояний сложных динамических объектов. Например, оценки вероятности врачебных ошибок. Он способен оценить критические показатели и ситуации, требующего особого внимания.

Из краткого описания новых предметов видно, что их содержание направлено на получение базовых знаний из: (а) теоретической медицины, включая профессиональную и медицинскую терминологию, строение человеческого тела и физиологию органов системы; (б) биомолекулярной химии; (с) доклинической медицины, включая патофизиологические механизмы формирования болезни и диагностику отдельных заболеваний. Эти дисциплины представляют собой теоретическую базу лекций. Практические занятия требуют внедрение прикладной информатики с ориентацией преимущественно на методы, технологии и средства решения задач, которые соответствуют содержанию тематики лекций.

В дополнение к учебным и методическим материалам создан онлайн-портал (см. рис.) [6].

Созданный портал реализует следующие цели: а) аккумулирует методические и учебные материалы для обмена; б) поддерживает инструменты общения и обсуждения сотрудников университетов и отраслевых экспертов; в) является открытым информационным ресурсом для студентов и молодых исследователей. Зарубежные партнеры из ряда Европейских университетов и эксперты (например, представители компаний Siemens Healthineers, Stapro, больницы г. Жилина) привлечены к разработке и развитию портала. Представители бизнеса и больниц деликатно формулируют учебные цели курса. Участие бизнеса в разработке учебных программ приводит к согласованию практики с использованием примеров из реального мира. Использование разработанного портала, в отличие от

Moodle, позволяет обеспечить гибкую структуру для коммуникации и хранения данных.



|  |  |  |
|--|--|--|
| <br><b>AI to Support Decision Making</b><br>Module includes a draft of the syllabuses proposed for the areas of AI to Support Decision Making   | <br><b>Data Mining</b><br>This module offers an overview of the main techniques for data mining | <br><b>Educational Software in Virtual Reality</b><br>Module includes a draft of the syllabuses proposed for the areas of educational software in Virtual Reality                             |
| <br><b>Health Information Systems, eHealth and Telemedicine</b><br>Module includes a draft of the syllabuses proposed for the areas of Health Information Systems, eHealth and Telemedicine | <br><b>Image Processing with ImageJ</b><br>Image Processing with ImageJ                       | <br><b>Medical Background, Epidemiology and Medical Statistics</b><br>The module is aimed to constitute a solid foundation for managing in the field of Biomedical and Medical Informatics. |

Рисунок – Интерфейс портала <https://cebmi.fri.uniza.sk/portal>

## Заключение

В работе представлен результат создания учебной программы «Биомедицинская информатика». При этом потребовалось решить три основные задачи: (а) подготовка и утверждение учебных и методических материалов (лекции, практические задания) новой учебной программы; (б) создание программного обеспечения, которое будет использоваться на практических занятиях, при решении курсовых и дипломных работ; (в) создание портала для хранения материалов, представления и обмена результатами и общения с зарубежными консультантами, исследователями и сотрудниками ИТ-компаний, работающих в сфере биомедицинской информатики и (г) распространение информации о достигнутых результатах в виде презентаций публикаций в материалах конференций и журналов.

Примером последней задачи является международный семинар по Биомедицинским технологиям [7], на котором организовано обсуждение актуальных проблем в области образования предметов образовательной программы и возможностей использования проектных материалов и созданного программного обеспечения.

### **Благодарность**

Данная публикация подготовлена при поддержке Ministry of Education, Science, Research, and Sport of the Slovak Republic в рамках проекта “Creation of methodological and study materials for Biomedical Informatics - a new Master program at the University of Žilina” (reg.no. KEGA 009ŽU-4/2020), и частично Slovak Research and Development Agency в рамках проекта “New methods development for reliability analysis of complex system” (reg.no. APVV-18-0027).

### **Библиографические ссылки**

1. What is biomedical informatics? [Electronic resource]. URL: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC2814957/>.
2. Use of Information Technology to Improve the Quality of Health Care in the United States [Electronic resource]. URL: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC1360897/> 2003.
3. Atlas of eHealth country profiles: the use of eHealth in support of universal health coverage: based on the findings of the third global survey on eHealth [Electronic resource]. URL: [http://apps.who.int/iris/bitstream/10665/204523/1/9789241565219\\_eng.pdf](http://apps.who.int/iris/bitstream/10665/204523/1/9789241565219_eng.pdf).
4. Nebraska Public Media [Electronic resource]. URL: <http://netnebraska.org/article/news/qa-what-biomedical-informatics-and-why-it-important>.
5. Biomedical and Health Informatics Education – the IMIA Years J. Mantas [Electronic resource]. URL: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC5171512/pdf/yimi-11-0s92.pdf>.
6. University-Industry Educational Centre in Advanced Biomedical and Medical Informatics [Electronic resource]. URL: <https://cebmi.fri.uniza.sk/portal>.
7. Information and Digital Technologies [Electronic resource]. URL: [https://idt.fri.uniza.sk/index.php?clanok=workshop\\_BT](https://idt.fri.uniza.sk/index.php?clanok=workshop_BT).

# ИСПОЛЬЗОВАНИЕ БЫСТРОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ФУРЬЕ ДЛЯ УСКОРЕНИЯ СВЕРТОЧНЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

**И.К. Леонов**

*Факультет прикладной математики и информатики, БГУ,  
пр. Независимости, 4, Минск, Беларусь ivan.leonov@live.com*

Сверточные нейронные сети хорошо себя зарекомендовали для решения задач сегментации, но при этом являются ресурсоемким решением, поэтому задача ускорения является актуальной. Данная статья описывает способ ускорения обучения сверточной нейронной сети при помощи быстрого преобразования Фурье. Для оценки увеличения производительности используется коэффициент Жаккарда. Результатом применения данной оптимизации является уменьшение времени обучения, а также увеличение точности.

**Ключевые слова:** быстрое преобразование Фурье; сверточные нейронные сети.

## CONVOLUTIONAL NEURAL NETWORKS OPTIMIZATION USING FAST FOURIER TRANSFORM

**I. Leonov**

*FAMCS, BSU, ivan.leonov@live.com*

Convolutional neural networks (CNNs) proved to be efficient in image segmentation yet computationally expensive. This paper proposes to use Fast Fourier Transform to speed up CNNs learning. The Jaccard Index was used to check the improvement. The proposed approach resulted in a decrease in learning time as well as a boost in segmentation accuracy.

**Keywords:** Fast Fourier Transform; CNN.

### **Введение**

Алгоритмы компьютерного зрения позволяют находить различные признаки, паттерны и объекты для дальнейшего изучения. Эти алгоритмы могут быть применены к широкому диапазону областей, таких как обработка изображений, спектроскопия, обработка медицинских снимков, метеорология, микроскопия и астрономия.

Определение объектов является необходимым шагом перед распознаванием объектов. На сегодняшний день сверточные нейронные сети хорошо себя зарекомендовали в поиске и детектировании объектов и узоров в изображениях. К сожалению, вычислительная сложность данных систем является высокой, так как необходимо выполнять большое количество матричных перемножений.

В данной работе рассматривается применение быстрого преобразования Фурье для ускорения обучения сверточных нейронных сетей.

## 1. Теоретические основы

### 1.1. Быстрое преобразование Фурье

При обработке изображений, преобразование Фурье используется для разложения изображения на действительную и мнимую компоненты, которые являются представлением заданного изображения в частотном пространстве. Преобразование Фурье дискретного двумерного изображения может быть рассчитано по формулам (1) и (2):

$$F(k_x, k_y) = \frac{1}{M \cdot N} \sum_{x=0}^{M-1} \sum_{y=0}^{N-1} f(x, y) e^{-i \cdot 2\pi \cdot (k_x x/M + k_y y/N)} \quad (1)$$

$$f(x, y) = \sum_{k_x=0}^{M-1} \sum_{k_y=0}^{N-1} F(k_x, k_y) e^{i \cdot 2\pi \cdot (k_x x/M + k_y y/N)} \quad (2)$$

где  $f(x, y)$  – пиксель на позиции  $(x, y)$ , а  $F(k_x, k_y)$  – функция, представляющая собой изображение в частотном пространстве,  $M \times N$  – размеры изображения и  $i = \sqrt{-1}$ . [1]

Временная сложность алгоритма дискретного преобразования Фурье составляет  $O((M \cdot N)^2)$ . Однако существует алгоритм быстрого преобразования Фурье, основанный на периодичности базовых функций. В результате вычисление преобразования Фурье имеет вычислительную сложность равную  $O((M \cdot N) \log_2(M \cdot N))$ .

По теореме о свертке преобразование Фурье превращает сложную операцию свертки в простое умножение. Пускай  $\mathcal{F}$  обозначает преобразование Фурье, а  $\mathcal{F}^{-1}$  – обратное преобразование Фурье, тогда свертку двух функций  $f$  и  $g$  можно вычислить следующим образом:

$$f * g = \mathcal{F}^{-1}(\mathcal{F}(f) \cdot \mathcal{F}(g))$$

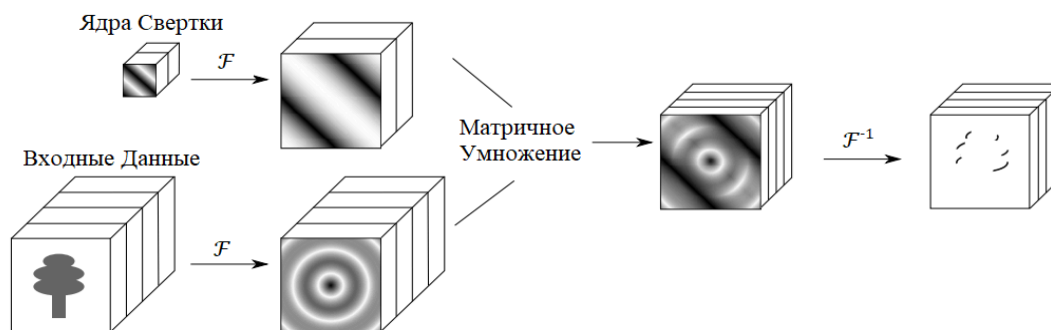


Рисунок 1 – Иллюстрация схемы применения преобразования Фурье [2]

Обычно данную схему применяют, когда размер ядра свертки близок к размерам исходного изображения. Также стоит отметить, что данное применение преобразования Фурье наиболее эффективно для сегментации объектов регулярной формы и регулярных текстур, хуже подходит для объектов сложной формы.

## 1.2. Модификация Архитектуры U-Net



Рисунок 2 – Архитектура предложенной сверточной нейронной сети [4]

Одним из существующих способов ускорения оптимизации данной архитектуры является применение быстрого преобразования Фурье для вычисления свертки изображения и ядра свертки (маски). Для этого сначала вычисляется преобразование Фурье исходного изображения, а также для ядра свертки. Затем происходит поэлементное умножение результатов свертки. После чего выполняется обратное преобразование Фурье. То есть имеем следующую организацию входного слоя:

- а) лямбда-слой, реализующий быстрое преобразование Фурье
- б) 3x3 сверточный слой и функция активации
- с) лямбда-слой, реализующий обратное быстрое преобразование Фурье

## 2. Результаты

Прирост производительности выполнения операции свертки при использовании быстрого преобразования Фурье сильно уменьшает количество операций, что хорошо прослеживается на рисунке 3.

По результатам экспериментов [4] становится ясно, что использование преобразования Фурье положительно влияет на скорость и качество обучений нейронных сетей.

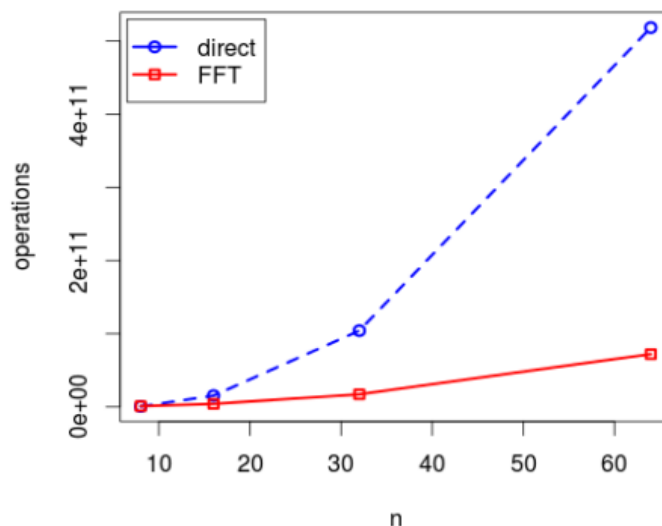


Рисунок 3 – Зависимость количества операция от размера изображения [2]

Для оценки производительности нейронных сетей используется коэффициент Жаккарда (обозначим его IoU), являющийся метрикой, отражающей точность определения объектов. В таблице отражены результаты производительности сетей, полученные за сто эпох. Среднее значение коэффициента Жаккарда для сети, использующей быстрое преобразование Фурье, составляет 0.83. В случае сети, не использующей быстрое преобразование Фурье, данный коэффициент равен 0.52.

Таблица – Метрика и функция потерь для эксперимента [4]

| <i>FFT</i> | <i>Avg. Valid. IoU</i> | <i>DICE value</i> | <i>Mean IoU</i> | <i>Cv. Val. Loss</i> | <i>Cv. Val mean loss</i> |
|------------|------------------------|-------------------|-----------------|----------------------|--------------------------|
| yes        | 0.83                   | -0.8392           | 0.8747          | -0.8753              | 0.8748                   |
| no         | 0.52                   | -0.5631           | 0.6815          | -0.6025              | 0.6815                   |

Основываясь на вышеперечисленных результатах, ясно, что использование быстрого преобразования Фурье положительно влияет на скорость обучения нейронных сетей. В дальнейшем необходимо исследовать возможность проведения обучения сразу в частотном пространстве. Дальнейшая оптимизация сверточных нейронных сетей позволит использовать их во встраиваемых системах, а также в мобильных устройствах.

## Библиографические ссылки

1. Szeliski R. Computer Vision: Algorithms and Applications/ Springer; 2nd ed, 2022, 947 p.
2. Mathieu M., Henaff M., LeCun Y., Fast Training of Convolutional Networks through FFTs, arXiv:1312.5851[cs.CV]. 2022
3. O. Ronneberger, Ph. Fischer, Th. Brox, U-Net: Convolutional Networks for Biomedical Image Segmentation, arXiv:1505.04597v1 [cs.CV]. 2022.
4. Nair V., M. Chatterjee, N. Tavakoli, A. S. Namin, C. Snoeyink, Fast Fourier Transformation for Optimizing Convolutional Neural Networks in Object Recognition, arXiv:2010.04257v1 [cs.CV]. 2022.
5. Vasilyev A. CNN optimizations for embedded systems and FFT, Stanford, 2020.



## КЛАССИФИКАЦИИ СТАДИЙ ДИАБЕТИЧЕСКОЙ РЕТИНОПАТИИ НА ОСНОВЕ АЛГОРИТМОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ И НАБОРА ПРИЗНАКОВ

М.М. Лукашевич<sup>1</sup>, Ю.И. Голуб<sup>2</sup>, В.В. Старовойтов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Учреждение образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники», ул. П. Бровки, 6, 220013, г. Минск, Беларусь,

[lukashevich@bsuir.by](mailto:lukashevich@bsuir.by)

<sup>2</sup>Государственное научное учреждение «Объединенный институт проблем информатики Национальной академии наук Беларуси», ул. Сурганова, 6, 220012, г. Минск,

Беларусь, [6423506@gmail.com](mailto:6423506@gmail.com), [valerystar@mail.ru](mailto:valerystar@mail.ru)

Машинное обучение и искусственный интеллект широко используются для диагностики хронических заболеваний, чтобы еще на ранних стадиях можно было провести необходимое профилактическое лечение. Сахарный диабет вызывает повреждение сетчатки глаз. Данное заболевание называется диабетической ретинопатией, которое может быть достаточно точно диагностировано с помощью алгоритмов машинного обучения при анализе изображений сетчатки глаза. Диагностика на ранней стадии имеет решающее значение для предотвращения опасных последствий таких как слепота. В данной работе проведен сравнительный анализ нескольких алгоритмов машинного обучения, а также описан подход к вычислению признаков для решения задачи классификации стадий диабетической ретинопатии. Отдельное внимание уделено этапам анализа исходных данных и предварительной обработки изображений. Выполнены экспериментальные исследования, приведены результаты экспериментов и рекомендации по использованию предложенного подхода.

**Ключевые слова:** Изображение, диабетическая ретинопатия; машинное обучение; классификация; признаки.

## CLASSIFICATION OF DIABETIC RETINOPATHY STAGES BASED ON MACHINE LEARNING ALGORITHMS AND SET OF FEATURES

М.М. Lukashevich<sup>a</sup>, Y.I. Golub<sup>b</sup>, V.V. Starovoitov<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, 6 Brovki Street, Minsk 220013, Belarus

<sup>b</sup>United Institute of Informatics Problems of the National Academy of Science of Belarus, 6 Surhanava Street, Minsk 220012, Belarus

Corresponding author: [lukashevich@bsuir.by](mailto:lukashevich@bsuir.by)

Machine learning and artificial intelligence are widely used to diagnose chronic diseases so that necessary preventive treatment can be given early on. Diabetes mellitus causes damage to the retina. This disease is called diabetic retinopathy, which can be diagnosed quite accurately using machine learning algorithms to analyze retinal images.

Diagnosis at an early stage is crucial to prevent dangerous consequences such as blindness. This paper provides a comparative analysis of several machine learning algorithms and describes an approach to feature computation for the task of classifying the stages of diabetic retinopathy. Particular attention is paid to the stages of initial data analysis and image preprocessing. Experimental studies are performed, the results of experiments and recommendations for the use of the proposed approach are given.

**Keywords:** Image; diabetic retinopathy; machine learning; classification; features.

## **Введение**

Значительные достижения в области медицинских технологий позволяют реализовать простые и недорогие способы получения и сбора данных, что требует разработки и прикладного применения новых технологий анализа данных (включая большие данные). На сегодняшний день существующие аппаратные средства сбора медицинских данных, включая различные приборы, датчики, которые далеко не всегда позволяют анализировать данные и чаще всего не предоставляют возможность принятия решений. Такая же ситуация существует и в области диагностики и лечения диабетической ретинопатии, которая проявляется как повреждение сетчатки глаз за счет повышенного уровня сахара в крови или сахарного диабета. По оценкам Международной диабетической федерации на 2019 год, 79% из 50 взрослых с диабетом проживают в странах с низким и средним уровнем дохода, а к 2045 году число случаев диабета в мире возрастет до 51 700 миллионов. С экономической точки зрения, диабет повлек за собой не менее 760 млрд долл. расходов на здравоохранение в 2019 году [1].

Фундус-исследование позволяет достаточно легко получить изображение сетчатки глаза человека. Тем не менее автоматизации последующего цифрового анализа такого рода изображений и интерпретация результатов ещё очень слабо развита. Методы машинного обучения позволяют извлекать закономерности из данных, имеют обобщающие способности, что позволяет строить эффективные модели [2, 3]. В области диабетической ретинопатии одним из наиболее важных приложений исследований является раннее прогнозирование и диагностика заболевания, представляющего угрозу для человека и снижающих качество жизни. Поэтому в рамках данного исследования была предложена методология классификации стадий диабетической ретинопатии на основе алгоритмов машинного обучения и набора информативных признаков [3, 4].

Условно можно выделить два подхода при решении данной задачи: использование классических алгоритмов машинного обучения (машины опорных векторов, метод k ближайших соседей, деревья решений и др.) и

реализация глубокого обучения сверточных нейронных сетей (AlexNet, VGGNet и др. архитектуры). Оба подхода имеют свои положительные моменты, но основным ограничением глубокого обучения является то, что необходимо иметь большое число данных, превышающее размер большинства доступных публичных наборов изображений сетчатки глаз. В рамках одного набора все возможные классы должны быть представлены достаточным числом изображений. В связи с этим в работе выбран подход исследования классических алгоритмов машинного обучения и возможности построения эффективных моделей на их основе [5, 6].

## **1. Методология исследования**

Методология проведенного исследования включает в себя подготовку данных, определение набора признаков, создание моделей машинного обучения и выбор наиболее эффективной с точки зрения точности модели. Этап подготовки данных включает в себя сбор изображений сетчатки глаз и предварительную обработку изображений. В исследовании будем использовать публичный набор данных, описание которого приведено ниже. Этап определения набора признаков включает в себя непосредственно само вычисление признаков, стандартные техники по их нормированию, масштабированию и стандартизации. Также предусмотрен этап выбора подмножества информативных признаков. Типовой процесс создания модели машинного обучения обязательно включает этап разбиения данных на обучающую и тестовую выборки. На следующем этапе предлагается реализовать алгоритмы машинного обучения, выполнить их настройку. Модели на основе выбранных алгоритмов обучаются на обучающем наборе данных, а затем применяются к тестовым данным. Выполняется оценка качества работы моделей и выбирается модель/алгоритм, показывающий максимальную точность на тестовых данных. Данная методология была реализована в процессе исследований, посвященных задаче классификации стадий диабетической ретинопатии.

## **2. Подготовка данных**

**Выбор и анализ набора данных.** В зависимости от типа и степени типичных признаков диабетической ретинопатии (ДР), таких как микроаневризмы, микрокровоизлияния, микроинфаркты, липидные экссудативные очаги, неоваскуляризация и т. д., болезнь классифицируется в несколько этапов: начальная, умеренная, тяжелая и пролиферативная [7]. В данном исследовании использовались изображения сетчатки глаза из набора данных Asia Pacific Tele-Ophthalmology Society 2019 Blindness

Detection (APTOS 2019 BD) [8]. Это большой набор изображений сетчатки, сделанных с помощью фундус-линзы при различных визуальных условиях. 3662 изображения размечены экспертами в соответствии со степенью тяжести диабетической ретинопатии по шкале от 0 до 4. Набор несбалансированный, распределение изображений по классам следующее: 0 – 1805 изображений, 1 – 370 изображений, 2 – 999 изображений, 3 – 193 изображения, 4 – 295 изображений). Многие изображения не в фокусе, переэкспонированы, недоэкспонированы или содержат артефакты. Набор подходит для постановки экспериментов по классификации стадий диабетической ретинопатии. Примеры изображений представлены на рисунке.



Рисунок - Примеры изображений сетчатки глаза

**Разбиение данных на обучающую и тестовую выборки** является важным этапом. Данные были разделены на обучающую и тестовую выборки (80% и 20% соответственно) с сохранением баланса классов.

**Предварительная обработка изображений** сетчатки глаз включает в себя следующие операции. На этапе предварительной обработки изображений необходимо выполнять **обрезку фона**, который иногда занимает значительный процент от общей площади изображения и является практически черной и неинформативной областью [9]. На следующем этапе из исходного цветного (RGB) изображения **извлекается зеленый канал** (Green Channel), который наиболее предпочтителен для автоматической диагностики заболеваний сетчатки [10]. Далее все операции выполняются только с Green каналом, как наиболее информативным для данной задачи.

База для экспериментов содержит изображения различного размера и соотношения сторон. Приведение изображений к единому размеру может изменить соотношение высоты и ширины изображений, а также внесет некоторые искажения. Поэтому предлагается выполнять **изменения размера изображений**, где будет зафиксирована его высота, равная 512 пикселям. А размер ширины изображения будет изменяться таким образом, чтобы сохранилось соотношение сторон.

Для **фильтрации шумов**, которые также присутствуют в Green канале изображения далее необходимо выполнить слияние в определенной пропорции исходного одноканального изображения ( $src1$ ) и изображения, полученного путём применения к исходному одноканальному изображению фильтра Гаусса ( $src2$ ) в соответствии с формулой:

$$dst = \alpha \cdot src1 + \beta \cdot src2 + \gamma \quad (1)$$

где  $dst$  – изображение после фильтрации шумов,  $src1$  – исходное одноканальное изображение,  $src2$  – исходное одноканальное изображение, к которому применен фильтр Гаусса,  $\alpha = 4, \beta = -4, \gamma = 128$  – коэффициенты слияния. Размер ядра Гаусса равен (0,0), а стандартное отклонение гауссова ядра в направлении  $X$  равно 10 [11].

### 3. Определение набора признаков

**Вычисление признаков.** В качестве признаков для принятия решения (классификации) были выбраны следующие 5 групп признаков: признаки Харалика (Haralick Features) [12, 13]; локальные бинарные признаки (Local Binary Patterns) [14]; гистограммные признаки; пороговые статистики смежности (Threshold Adjacency Statistics); моменты Ху. Для всех признаков выполнялась **стандартизация** путем удаления среднего значения и масштабирования до единичной дисперсии.

**Выбор признаков** является одним из наиболее важных процессов на этапе определения набора признаков. В работе был использован метод одномерного отбора признаков (Univariate Feature Selection), который работает путем выбора лучших признаков на основе одномерных статистических тестов. Выбор характеристик выполнялся в соответствии с процентилем самых высоких оценок (75%) [15].

### 4. Создание моделей машинного обучения на базе алгоритмов

Одна из целей данной работы - провести сравнительное исследование для оценки наиболее эффективного алгоритма классификации стадий диабетической ретинопатии у пациента. Было рассмотрено 4 группы популярных методов классификации для прогнозирования заболевания: линейные алгоритмы, нелинейные алгоритмы, алгоритмы на основе нейронных сетей и ансамблевые алгоритмы, всего 13 алгоритмов. В процессе построения моделей использоваться метод кросс-валидации или перекрестной проверки (k-fold cross-validation) со значением  $k = 10$ . Данный подход позволяет выполнить настройку гиперпараметров модели [16].

## 5. Оценка результатов, выбор лучшей модели

Описанные выше методология исследования и ее этапы были реализованы на языке программирования Python с использованием библиотеки машинного обучения scikit-learn [17], библиотеки компьютерного зрения OpenCV [18] и библиотеки компьютерного зрения и обработки изображений Mahotas [19]. Для оценки построенных моделей использовались стандартные метрики задач машинного обучения: общая точность предсказания модели по всем классам (accuracy), точность модели при определении положительных результатов (precision), полнота (recall) и F-мера (f1-score) [20]. Результаты экспериментов представлены в таблице. Приводятся название алгоритма, средняя оценка точности (accuracy) и среднее квадратичное отклонение (standard deviation) при 10-кратной перекрёстной проверки на обучающем наборе, а также точности (accuracy) модели на тестовом наборе.

Таблица. Результаты экспериментов

| Алгоритм   | Обучающий набор |                    | Тестовый набор |
|--|-----------------|--------------------|----------------|
|  | accuracy        | standard deviation | accuracy       |
| Логистическая регрессия (Logistic Regression)                                | 0.766           | 0.023              | 0.776          |
| Линейный дискриминантный анализ (Linear Discriminant Analysis, LDA)          | 0.758           | 0.024              | 0.769          |
| Метод k-ближайших соседей (K-Neighbors Classifier, KNN)                      | 0.729           | 0.022              | 0.749          |
| Деревья принятия решений (Decision Tree Classifier, CART)                    | 0.668           | 0.034              | 0.714          |
| Наивный классификатор Байеса (Naive Bayes Classifier, NB)                    | 0.533           | 0.026              | 0.542          |
| Линейный метод опорных векторов (Linear Support Vector Classification, LSVC) | 0.761           | 0.021              | 0.769          |
| Метод опорных векторов (C-Support Vector Classification, SVC)                | 0.751           | 0.023              | 0.776          |
| Многослойный перцептрон (Multilayer Perceptrons, MLP)                        | 0.756           | 0.017              | 0.780          |
| Bagging (Bagging Classifier, BG)   | 0.750           | 0.026              | <b>0.802</b>   |
| Случайный лес (Random Forest Classifier, RF)                                 | 0.751           | 0.021              | 0.793          |
| Экстра-деревья (Extra Trees Classifier, ET)                                  | 0.755           | 0.028              | 0.790          |
| AdaBoost (AdaBoost Classifier, AB)   | 0.717           | 0.022              | 0.748          |
| Градиентный boosting (Gradient Boosting Classifier, GB)                      | 0.749           | 0.019              | 0.797          |

Результаты экспериментов показывают, что наиболее высокую эффективность показывают ансамблевые алгоритмы. Модель на основе Bagging алгоритма показала на тестовом наборе лучшие результаты по точности (ассигасу). Данные результаты позволяют сформулировать некоторые выводы и рекомендации для решения задачи классификации стадий диабетической ретинопатии. Изображения сетчатки глаза человека требуют предварительной обработки для эффективной реализации последующих стадий вычисления признаков и принятия решений. При построении моделей машинного обучения для решения задачи классификации стадий диабетической ретинопатии целесообразно использовать ансамблевые методы. Дальнейшие исследования следует продолжить в области разработки алгоритмов вычисления информативных признаков.

### **Заключение**

В работе авторами описана и реализована методология классификации стадий диабетической ретинопатии на основе классических алгоритмов машинного обучения. Приведено описание этапа предварительной обработки изображений, вычисления и отбора информативных признаков, а также этап принятия решения на основе 13 алгоритмов машинного обучения. Тестирование выполнено на публичном наборе данных, приведены результаты экспериментов.

Работа частично выполнена в рамках проектов БРФФИ Ф20РА-014 и Ф21ПАКГ-001.

### **Библиографические ссылки**

1. IDF Diabetes Atlas 9th 475 Edition 2019 [Электронный ресурс]. URL: <https://www.idf.org/aboutdiabetes/what-is-diabetes/facts-figures.html> (дата обращения: 05.09.2022).
2. Kumar R.K., Arunabhaskar K.A. A Hybrid Machine Learning Strategy Assisted Diabetic Retinopathy Detection based on Retinal Images // International Conference on Innovative Computing, Intelligent Communication and Smart Electrical Systems (ICSES). 2021; 1-6. DOI: 10.1109/ICSES52305.2021.9633875.
3. Dagliati A., Marini S., Sacchi Lx., et al. Machine Learning Methods to Predict Diabetes Complications // J Diabetes Sci Technol. 2018. № 12(2). P. 295–302. DOI:10.1177/1932296817706375.
4. Kavakiotis I., Tsave O., Salifoglou A., Maglaveras N., Vlahavas I., Chouvarda I. Machine Learning and Data Mining Methods in Diabetes Research // Computational and Structural Biotechnology Journal. 2017. № 15. P. 104–116. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.csbj.2016.12.005>.
5. Stolte S, Fang R. A survey on medical image analysis in diabetic retinopathy // Med Image Anal. 2020. № 64. P. 101742. DOI:10.1016/j.media.2020.101742.

6. Shekar S., Satpute N., Gupta A. Review on diabetic retinopathy with deep learning methods // *Journal of Medical Imaging*. 2021. № 8(6). P. 060901.
7. Sim D'.A., Keane P.A., Rajendram R., et al. Patterns of peripheral retinal and central macula ischemia in diabetic retinopathy as evaluated by ultra-widefield fluorescein angiography // *Am J Ophthalmol*. 2014. № 158(1). P. 144–153. DOI:10.1016/j.ajo.2014.03.009.
8. APTOS 2019 Blindness Detection [Электронный ресурс]. URL: <https://www.kaggle.com/competitions/aptos2019-blindness-detection/data> (дата обращения: 05.09.2022).
9. Starovoitov V.V., Golub Y.I., Lukashevich M.M. A Universal Retinal Image Template for Automated Screening of Diabetic Retinopathy // *Pattern Recognit. Image Anal*. 2022. № 32. P. 322–331. <https://doi.org/10.1134/S1054661822020195>.
10. Amin J., Sharif M., Yasmin M. A Review on Recent Developments for Detection of Diabetic Retinopathy // *Scientifica (Cairo)*. 2016. P. 6838976. DOI:10.1155/2016/6838976.
11. Maison Maison, T. Maya Lestari, A. Luthfi. Retinal Blood Vessel Segmentation using Gaussian Filter // *Journal of Physics Conference Series*. 2019. № 1376(1). P. 012023. DOI: [10.1088/1742-6596/1376/1/012023](https://doi.org/10.1088/1742-6596/1376/1/012023).
12. Texture Feature Analysis in Fundus Image in Screening Diabetic Retinopathy | *Annals of the Romanian Society for Cell Biology* [Электронный ресурс]. URL: <https://www.annalsofrscb.ro/index.php/journal/article/view/1656> (дата обращения: 05.09.2022).
13. Haralick Robert M. et al. Textural Features for Image Classification // *IEEE Trans. Syst. Man Cybern*. 1973. № 3. P. 610–621.
14. Ojala T., Pietikäinen M., Harwood D. Performance evaluation of texture measures with classification based on Kullback discrimination of distributions // *Proceedings of the 12th IAPR International Conference on Pattern Recognition (ICPR 1994)*. 1994. № 1. P. 582–585.
15. Guyon I., Elisseeff A. An introduction to variable and feature selection // *Journal of machine learning research*. 2003. № 3. P. 1157–1182.
16. Krstajic D., Buturovic L.J., Leah, D.E. Cross-validation pitfalls when selecting and assessing regression and classification models // *J Cheminform*. 2014. № 6. P. 10. DOI: <https://doi.org/10.1186/1758-2946-6-10>.
17. scikit-learn: machine learning in Python — scikit-learn 1.1.2 documentation [Электронный ресурс]. URL: <https://scikit-learn.org/stable/> (дата обращения: 05.09.2022).
18. OpenCV [Электронный ресурс]. URL: <https://opencv.org/> (дата обращения: 05.09.2022).
19. Mahotas: Computer Vision in Python — mahotas 1.4.3+git documentation [Электронный ресурс]. URL: <https://mahotas.readthedocs.io/en/latest/> (дата обращения: 05.09.2022).
20. Géron A. *Hands-on machine learning with Scikit-Learn, Keras and TensorFlow: concepts, tools, and techniques to build intelligent systems* (2nd ed.). O'Reilly Media Inc.: 2019. 856 p.



## ЭФФЕКТИВНЫЙ АЛГОРИТМ ОБУЧЕНИЯ НА ОСНОВЕ СЛУЧАЙНОГО ПОИСКА

**В.В. Мацкевич**

*Белорусский Государственный Университет,  
пр. Независимости, 4, г. Минск, Беларусь Matskevich1997@gmail.com*

В работе предлагается оригинальный распараллеленный алгоритм обучения нейронных сетей на основе метода отжига. Также предлагается архитектура нейронной сети ориентированной на параллельную обработку данных. Эффективность предложенного алгоритма обучения показана на примере решения задачи сжатия цветных изображений.

**Ключевые слова:** ограниченная машина Больцмана; параллельные вычисления; обучение; метод случайного поиска; метод отжига.

## EFFECTIVE TRAINING ALGORITHM BASED ON RANDOM SEARCH

**V.V. Matskevich**

*Belarusian State University,  
Nezavisimosti av., 4, Minsk, Belarus Matskevich1997@gmail.com*

In paper an original parallelized neural network training algorithm based on annealing method is proposed. Also, a neural network architecture focused on parallel data processing is proposed. Proposed training algorithm efficiency is shown on the example of solving color images compression problem.

**Keywords:** restricted Boltzmann machine; parallel computations; training; random search method; annealing method.

### **Введение**

Современный мир вступил в эпоху цифровой экономики. В результате чего объемы информации поступающей из различных источников постоянно растут. Возникает необходимость в разработке эффективных алгоритмов, основанных на распараллеливании процесса обработки данных. В настоящее время большой популярностью пользуются нейросетевые технологии обработки данных. Однако для применения нейронных сетей необходимо произвести их обучение – трудоемкую настройку под решаемую задачу.

Для решения проблемы обучения были разработаны разнообразные алгоритмы на основе метода градиентного спуска. Они получили широкое

распространение за счет быстрой сходимости. Однако, данные алгоритмы имеют общую проблему – невысокое качество полученного решения что может быть неприемлемо в ряде случаев. Для решения данной проблемы существуют алгоритмы обучения основанные на идее случайного поиска. В данном случае пространство поиска оптимального решения существенно расширяется – это повышает качество решения. Одним из них является метод отжига. Он при определенных условиях сходится к оптимальному решению, причем из любого начального приближения [1]. Однако он обладает низкой скоростью сходимости, из-за чего считается не применимым на практике. На сегодняшний день вычислительных мощностей вполне достаточно для реализации данного метода.

В работе предлагается распараллеленный алгоритм обучения нейронных сетей на основе метода отжига. Предлагается специальная архитектура ограниченной машины Больцмана для параллельной обработки данных. Эффективность полученной системы демонстрируется на примере решения задачи сжатия цветных изображений.

## 1. Архитектура нейронной сети

Ограниченные машины Больцмана (ОМБ) применяются в задачах информационного поиска, анализа данных, сжатия изображений. ОМБ лежат в основе глубоких доверительных сетей. Несколько последовательно идущих ОМБ снижают размерность входных данных и делают их пригодными для последующей нейросетевой обработки.

Известно, что в основе ограниченной машины Больцмана лежит стохастический нейрон. Формально ее можно представить полносвязным двудольным графом  $G=(X, U)$  [2],

$$\left\{ \begin{array}{l} X = X_1 \cup X_2, X_1 \cap X_2 = \emptyset \\ U = \{u = (x_1, x_2) \mid \forall x_1 \in X_1, \forall x_2 \in X_2\} \end{array} \right\} ,$$

где  $X$  – множество вершин – стохастических нейронов,  $U$  – множество ребер – синаптических связей, при этом вершины подмножества  $X_1$  – задают нейроны входного слоя, а  $X_2$  – нейроны выходного слоя.

Число нейронов во входном слое определяется размером входного образа, а количество нейронов в выходном слое определяется исходя из требований к степени сжатия данных.

Выходные сигналы слоев ОМБ реализуют некоторые законы вероятностного распределения. В зависимости от используемых законов распределения строят различные типы машин. В данной работе речь пойдет о

машинах типах Гаусс-Бернулли (ГБ) и Бернулли-Бернулли (ББ), т.к. они являются наиболее распространенными.

Для ОМБ типа ГБ каждой вершине входного слоя поставим в соответствие множества параметров  $VB = \{b\}$  – смещения и  $\sigma = \{\sigma\}$  – дисперсии вершин, а вершинам выходного слоя – множество параметров  $HB = \{g\}$  – смещение вершин. Размеры множеств равны соответственно  $|VB| = |\sigma| = |X_1|$ ,  $|HB| = |X_2|$ . Каждому ребру, связывающему пару вершин входного и выходного слоев поставим в соответствие множество параметров  $W = \{w\}$  – весов ребер. Размер множества равен следующей величине  $|W| = |X_1||X_2|$ . Таким образом, описанное семейство нейронных сетей можно задать четырьмя типами параметров:  $RBM = (W, VB, \sigma, HB)$ . Стоит отметить, что у ОМБ типа ББ отсутствует множество параметров  $\sigma$ .

Для обучения нейронной сети объем обучающей выборки должен быть не меньше числа настраиваемых параметров сети. Вычислительная сложность обучения прямопропорциональна произведению количества настраиваемых параметров сети на объем выборки. Количество настраиваемых параметров прямопропорционально размерности входных данных. Таким образом, вычислительная сложность обучения прямопропорциональна квадрату размерности входных данных.

Для решения проблемы вычислительной сложности обучения предлагается следующая архитектура ОМБ. Пусть входные данные имеют размерность  $N$ . Каждый элемент входных данных разбивается  $k$  равных фрагментов размера  $m$  ( $km = N$ ). Значение  $k$  определяется при проектировке архитектуры нейронной сети. После разбиения данных создаются  $k$  ОМБ одинаковой архитектуры (по одной для каждого фрагмента данных). Таким образом исходные данные обрабатываются с помощью ансамбля из  $k$  ОМБ. Данный подход обладает следующими преимуществами:  $k$  ОМБ независимы друг от друга, что позволяет производить параллельное обучение машин; вычислительная сложность обучения прямопропорциональна размерности входных данных (линейная зависимость); снижение числа настраиваемых параметров нейронной сети понижает сложность обучения и повышает качество полученного решения (при разбиении данных на не слишком малые фрагменты).

## 2. Алгоритм обучения

Задача обучения в случае ее решения методами случайного поиска может быть сформулирована следующим образом. Пусть на конечном множестве допустимых решений  $\Omega$  определена целевая функция  $F$ , и для каждого элемента  $x \in \Omega$  задано множество соседних элементов

$N(x) \subset \Omega$ . Задачу условной оптимизации в данном случае можно задать в виде тройки  $(\Omega, F, N)$ . Рассмотрим возможности ее решения с помощью случайного поиска, в частности, с помощью метода отжига.

Перед изложением алгоритма обучения, необходимо понять особенности нейронных сетей. Любая нейронная сеть состоит из одного или нескольких слоев. В зависимости от типа сети ее отдельные слои могут выполнять абсолютно разные преобразования входных данных для слоя. В зависимости от этого слой может состоять из различных фрагментов выполняющих абсолютно разные преобразования. Любой фрагмент нейронной сети задается набором параметров. Из-за того, что фрагменты выполняют разные преобразования то и соответствующие им наборы параметров имеют абсолютно разный диапазон значений. Таким образом, любая архитектура нейронной сети может быть задана объединением из  $m$  наборов параметров  $NN = (x_1, x_2, \dots, x_m)$ . А конкретная сеть получается путем фиксации значений всех ее параметров.

Опишем теперь предлагаемый алгоритм, реализующий метод отжига.

**Предварительный шаг.** Инициализация начального состояния нейронной сети  $NN_0 = (x_{10}, x_{20}, \dots, x_{m0})$ , величины  $T_0$  и последовательности температур, связанных следующим соотношением:

$$T_k = T_0 / \ln(k+3), k > 0$$

**Общий  $k$ -ый шаг.** Шаг 1. Генерация  $m$  равномерно распределенных дискретных случайных величин (СВ)  $a_1, a_2, \dots, a_m$  на отрезке от нуля до количества параметров в наборе. Генерация  $m$  случайных перестановок длиной, равной количеству параметров в наборе. Первые  $a_1, a_2, \dots, a_m$  элементов перестановок задают индексы изменяемых параметров в каждом наборе параметров соответственно.

Шаг 2. Генерация нового решения. Для каждого изменяемого параметра генерируется две равномерно распределенные СВ  $b, c$  на отрезках  $[0;1]$ ,  $[0;l/2]$ . Величина  $l$  зависит от того, какому набору принадлежит изменяемый параметр и равна  $l_1, l_2, \dots, l_m$  соответственно. Значения  $l$  для каждого набора задаются как параметры алгоритма. Пусть  $x_i$  – изменяемый параметр, а его новое значение  $x_i'$ , тогда:

$$x_i' = \begin{cases} x_i + g, e \leq 0,5 \\ x_i - g, e > 0,5 \end{cases}$$

Шаг 3. Принятие решения о переходе. Пусть  $x$  текущее решение,  $y$  – новое, сгенерированное на шаге 2 решение. Тогда решение  $x'$  на следующей итерации определяется следующим образом:

$$P(x' = y | x) = \min\{1, \exp((F(x) - F(y)) / T_k)\}$$

Шаг 4. Проверка критерия останова. Если время на обучение нейронной сети истекло, то алгоритм завершается. В противном случае производится переход на следующую итерацию.

Отдельная итерация алгоритма обучения на основе метода отжига, как было указано выше, состоит из 4 этапов. Все этапы кроме вычисления значения функционала для нового решения выполняет процессор. Наиболее трудоемким этапом является вычисление значения функционала и, при малой архитектуре сети, генерация нового решения. Вычислительная мощность видеокарты выше процессора в среднем в 20 раз. Это приводит к тому, что при обучении небольших нейронных сетей значительная часть времени расходуется на генерацию новых решений. Все этапы в отдельной итерации выполняются строго последовательно.

Алгоритм производит сокращение вычислений. Рассмотрим подробнее этап вычисления значения функционала. Пусть текущее решение равно  $x$ , а новое решение –  $y$ . Во время вычисления значения функционала на видеокарте для решения  $y$ , процессор одновременно генерирует два новых решения  $x_1 \in N(x)$  и  $y_1 \in N(y)$ . После вычисления значения функционала производится проверка необходимости перехода в новое решение. Если новое решение принято, то следующим решением, которое будет проверяться будет  $y_1$  в противном случае  $x_1$ . Данный алгоритм позволяет замаскировать этап генерации нового решения. Таким образом, при переходе на следующую итерацию сразу будет производиться вычисление значения функционала для нового решения без его явной генерации.

Рассмотрим эффективность данного алгоритма. Пусть на генерацию одного нового решения на процессоре требуется  $a$  времени, вычисления значения функционала для нового решения на видеокарте  $b$  времени, а для передачи данных, синхронизации вычислений и прочего требуется  $c$  времени. Тогда в последовательном случае выполнения алгоритма обучения на одну итерацию требуется  $a + b + c$  времени, т.к. остальные этапы пренебрежимо малы по объему вычислений. В случае применения алгоритма распараллеливания в процессе обучения генерируется сразу два новых решения и время одной итерации составит  $\max(2a, b) + c$ . Рассмотрим величину выигрыша времени  $r$ . Возможны два случая.

1.  $2a \geq b$  в таком случае выигрыш составит  $r = (a + b) - 2a = b - a$
2.  $2a < b$  в таком случае получим  $r = (a + b) - b = a$

Таким образом, алгоритм распараллеливания целесообразно применять, если время вычислений на видеокарте превышает время вычислений на процессоре. Максимальная эффективность достигается в случае, когда

величина  $s$  мала и видеокарта ровно в 2 раза быстрее процессора и время вычислений в таком случае сокращается на треть.

### 3. Результаты

Эффективность алгоритма обучения проверим на примере решения задачи сжатия цветных изображений выборки CIFAR-10 [3]. Для экспериментов выбрана 16-кратная степень сжатия. Более высокая степень приводит к большим потерям, более низкая – не имеет смысла, т.к. классические алгоритмы сжатия более эффективны в таких условиях. Сравнение проведено с методом адаптивного момента – наилучшего градиентного алгоритма обучения нейронных сетей [4] (см. Таблица)

Таблица – Результаты экспериментов

| Алгоритм обучения | Метод отжига | Метод градиентного спуска |
|-------------------|--------------|---------------------------|
| MSE               | 459          | 2940                      |
| PSNR              | 21,6         | 13,7                      |
| SSIM              | 0,749        | 0,227                     |
| время обучения, ч | 1            | 1                         |

### Заключение

Разработанный алгоритм обучения нейронных сетей на основе случайного поиска заметно эффективнее широко распространенного градиентного. Полученный результат обладает перспективой. Он позволяет значительно увеличить эффективность обучения нейронных сетей. Благодаря широкой распространенности сетей возможно улучшение качества решений большого количества прикладных задач.

### Библиографические ссылки

1. Hajek B. Cooling schedules for optimal annealing // Mathematics of operations research, vol. 13, iss. 2, 1988.
2. Krasnoproshin V.V., Matskevich V.V. Neural Network Data Processing Based on Deep Belief Networks // Communications in Computer and Information Science. Vol. 1282: Open Semantic Technologies for Intelligent System. Springer. 2020. P. 234–244.
3. Выборка CIFAR-10. URL: <https://www.cs.toronto.edu/~kriz/cifar.html> (дата доступа: 04.03.2020).
4. Kingma D.P., Ba J.L. Adam: A Method for Stochastic Optimization // Proceedings of the 3rd International Conference on Learning Representations. 2015. P. 1–15.

# МЕТОД ПРИНЯТИЯ ОПЕРАТИВНЫХ РЕШЕНИЙ В РАСПРЕДЕЛЕННЫХ КОМПАНИЯХ НА ОСНОВЕ РЕДУКЦИИ БОЛЬШИХ ДАННЫХ

**А.С. Мороз, А.Н. Вальвачев**

*Белорусский Государственный Университет,  
пр.Независимости,4, г.Минск, Беларусь masbsu@mail.ru vanaisoft@mail.ru*

В докладе рассматривается проблема ускорения принятия оперативных решений без потери их качества в больших территориально распределенных компаниях. Предложен комбинированный метод решения на основе принципов редукции больших данных. Представлен вариант применения метода в системе оценки состояния фотоэлектрических панелей солнечной электростанции.

**Ключевые слова:** территориально-распределенные компании; принятие решений; системы поддержки принятия решений; большие данные; малые данные; редукция данных.

## METHOD FOR OPERATIONAL DECISION MAKING IN DISTRIBUTED COMPANIES BASED ON BIG DATA REDUCTION

**A.S. Moroz, A.N.Valvachev**

*Belarusian State University,  
Nezavisimosti av., 4, Minsk, Belarus masbsu@mail.ru vanaisoft@mail.ru*

The paper considers the problem of accelerating operational decision-making without loss of quality in large geographically distributed companies. A combined solution method based on the principles of big data reduction is proposed. A variant of application of the method in a system for assessing the state of photovoltaic panels of a solar power plant is presented.

**Keywords:** geographically distributed companies; decision making; decision support systems; big data; small data; data reduction.

### **Введение**

Территориально распределенные компании (ТРК) являются одной из важнейших составляющих мировой экономики [1]. К их отличительным признакам относятся: наличие центрального офиса (центра) в метрополии и множества компьютеризированных подразделений, реализующих бизнес-процессы в странах с благоприятным бизнес-климатом. Для решения плановых и оперативных задач в ТРК используются различные типы систем поддержки принятия решений (СППР) [2].

Основные преимущества ТРК, по сравнению с более консервативными централизованными компаниями, заключаются в гибкости структуры, адаптивности к изменениям внешней среды и эффективном противодействии рискам [3]. Поэтому ТРК активно исследуются [1, 2]. Тем не менее, ряд проблем остаются нерешенными. К ним, в частности, относятся: большой объем входных данных, загруженность каналов связи, субъективность и запаздывание управляющих решений [4]. Особенно ярко эти проблемы проявились после начала пандемии COVID-19. Для их решения, по мнению авторов, необходимо: акцентировать внимание на оперативных задачах и новых методах их решения; расширить поля факторов, влияющих на решение; адаптировать архитектуру СППР к работе в условиях динамической среды и роста неопределенности.

В докладе представлено комплексное решение проблемы сокращения потока данных без потери качества оперативных управляющих решений на основе принципов редукции больших данных.

## 1. Постановка задачи

Пусть имеется трехуровневая ТРК, функционирующая в динамической среде ( $Env$ ). Структура ТРК состоит из: центра ( $A$ ), территориальных подразделений ( $B$ ), включающих множество гетерогенных объектов ( $C$ ), и распределенную СППР ( $sys$ ).

Структуру типичной СППР можно рассматривать как граф, узлы которого представлены интеллектуальными системами уровней ( $aiA$ ,  $aiB$ ,  $aiC$ ), связанные каналами Интернет. Результаты решения пересылаются с уровня  $C$  на уровни  $B$  и  $A$ , где обобщаются и оцениваются. В настоящее время доминируют плановые задачи.

Задачи, решаемые на уровнях, в общем случае имеют следующие атрибуты: идентификатор задачи ( $id$ ), текст задачи ( $Z$ ), исходные данные ( $X$ ),  $L$  (алгоритм решения), результаты решения ( $U$ ), база знаний, содержащая предметную область задачи ( $KB$ ), время решения ( $t$ ).

На основе анализа результатов  $U$  руководством принимаются тактические (на уровнях  $C$ ,  $B$ ) и стратегические (на уровне  $C$ ) решения.

Требуется: выработать общий подход к решению оперативных задач принятия решений (ЗПР); сформировать целостный взгляд на архитектуру СППР; выявить актуальные классы оперативных ЗПР; определить способ синтеза минимального достаточного объема данных; разработать унифицированный метод для их решения на основе минимальных затрат времени и минимального объема данных без потери качества.

В качестве подхода к решению взяты два направления: “Big Data Reduction” [5] и “Small Data” [6].



## 2. Классификация оперативных задач

Для ускорения выбора метода решения, адекватному смыслу ЗПР выполнена классификация оперативных задач. С уверенностью можно зафиксировать четыре класса.

Класс 1. ЗПР, где решения принимаются на основе обработки значений всех входных переменных. Для решения используются статистические методы, метрики Евклида, Махаланобиса, Хэмминга и др.

Класс 2. ЗПР, где решения принимаются в зависимости от значения заранее определенной бифуркационной переменной независимо от значения других входных переменных. Решение – мониторинг бифуркационной переменной.

Класс 3. ЗПР, где решения принимаются в зависимости от значения нескольких заранее определенных bell-переменных, имеющих жизненно важное значение для ТРК. Решение – мониторинг bell-переменных.

Класс 4. ЗПР, где решения принимаются в зависимости от минимального или максимального значения в массиве входных переменных. Решение – мониторинг min/max-переменных.

Результат классификации дает возможность построить соответствующие паттерны и программы ( $L1$ ,  $L2$ ,  $L3$ ,  $L4$ ), сведя решение к достаточно простой стандартизированной процедуре.

## 3. База для нормализации входных данных

В качестве базы для нормализации данных для алгоритмов  $L1$ ,  $L2$ ,  $L3$ ,  $L4$  используем следующие положения, основанные на трудах Л.Заде [7].

Значение переменной любого типа  $X$  на уровнях  $aiC$ ,  $aiB$ ,  $aiC$  отображается в значение  $X$  из диапазон 0.00-1.00.

Нормализованные входные данные  $X$  соответствуют требованиям стандартных классов ЗПР и алгоритмов  $L1$ ,  $L2$ ,  $L3$ ,  $L4$  к типу данных.

На основе нормализованных данных вычисляется интегральный показатель  $I$ , на основе которого формируется управляющее решение  $U$ .

## 4. Комплексная онтология ТРК-СППР

Сложность поставленной задачи заключается в ее междисциплинарности. Поэтому для формирования целостного взгляда на ТРК и ЗПР использован онтологический подход [8]. Онтология ТРК носит базовый характер и не зависит от типа решаемых задач:

$$comp = (Env, A, B, C, sys, com) \quad (1)$$

В онтологии СППР выделим две части: плановые (расширение  $p$ ) и оперативные (расширение  $o$ ) подсистемы:

$$sys = (aipA, aipB, aipC, aioA, aioB, aioC, com) \quad (2)$$

Онтология плановых задач носит стандартный характер:

$$zp = (idp, Zp, Xp, Lp, Up, KBp, tp) \quad (3)$$

В онтологии оперативных отображены базовые положения нормализации входных данных 1-3 и результаты классификация ЗПР:

$$zo = (ido, Zo, Xo, Xo, Io, L1, L2, L3, L4, Uo, KBo, t0) \quad (4)$$

Нормализация и редукция больших данных за счет применения паттернов  $L1, L2, L3, L4$  позволяет сократить объем необходимых для принятия оперативных решения данных и сократить трафик, что в значительной мере снижает вероятность запаздывания.

## 5. Метод решения оперативных ЗПР

Методика решения поставленной задачи включает два этапа подготовительный и эксплуатационный.

Подготовительный этап.

1. Анализ специфики бизнес-процессов ТРК.
2. Выбор эксперта.
3. Выбор класса ЗПР и соответствующего алгоритма ( $L1, L2, L3, L4$ ).
4. Определение экспертом  $id, Zo, Xo, Lo, Xo, Io, Uo$ .
5. Формирование КВо (ПрО) задачи.

Эксплуатационный этап:

1. Формирование в aiC входного массива данных  $X$ .
2. Нормализация данных  $X = f_1(X)$ .
3. Выбор алгоритма, соответствующего классу ЗПР;
4. Вычисления интегрального показателя  $I = f_2(X)$ .
5. Синтез управляющего решения  $Uo = L1/L2/L3/L4 (I)$ .

Реализация метода возможна на любом языке программирования.

Пример реализации для языка Python в консольном режиме для решения практической задачи представлен ниже.

## 6. Апробация метода

На основе разработанного метода в рамках имитационного моделирования была разработана СППР верхнего уровня [9] для фотоэлектрических панелей солнечной электростанции. Станция состоит из центра управления, ремонтной бригады и 3 распределенных участков, где раз-

мещено 560, 640 и 740 панелей одного типа. Выходной вектор по каждой панели включает 11 показателей, общим объемом 70 байт. В результате воздействия негативных природных факторов состояние панелей ухудшается. Требуется разработать систему верхнего уровня [9] для быстрого реагирования на стихийные бедствия, обеспечивающую оперативный поиск, оценку и организацию ремонта разрушенных панелей.

Для решения достаточно трех (тип панели, координаты и состояние панели) из одиннадцати доступных параметров, объем которых для одной панели занимает 48 байт. Ниже представлен отчет трафика по традиционному и новому методам. Экономия составляет в самом худшем случае (сильном воздействии на панели) составляет 61600 байт.

Таблица – Результаты экспериментов

```
>>> %Run SunStation.py
*****
*          ЭЛЕКТРОСТАНЦИЯ СОЛНЕЧНЫХ ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПАНЕЛЕЙ          *
*****
Поля:                Участок 1            Участок 2            Участок 3 *
Количество панелей:      560              640              720 *
Телеметрия-1 (1 панель):   80              80              80 *
Всего:                  44960             51200            57600 *
Телеметрия-2 (1 панель):   48              48              48 *
Всего:                  26880             30720            34560 *
*****
Экономия по полям:       18080             20480            23040 *
Экономия по станции:     61600
*****
```

Аналогичным способом можно быстро строить и устанавливать ЗПР верхнего уровня поверх существующих систем в случае возникновения угроз или оценить устойчивость ТРК к внешним негативным воздействиям. Для стационарных НЛА-СППР следует использовать соответствующие стандарты и накопленный опыт [9].

### Заключение

Разработанный метод редукции больших данных позволяет нормализовать по единому принципу входные данные и синтезировать управляющее решение по одному из стандартных алгоритмов, что существенно сокращает время принятия оперативных решений, уменьшить трафик в каналах связи, снизить вероятность запаздывания решений. Так же метод позволяет быстро разрабатывать и разворачивать системы верхнего уров-

ня (HLA) в местах расположения ТРК с высокой вероятностью негативных природных явлений.

### **Библиографические ссылки**

1. Blokdyk G. Ultra-large-scale systems. CreateSpace Independent Publishing Platform, 2018. 140 p.
2. Виссия Х., Краснопрошин В.В., Вальвачев А.Н. Принятие решений в информационном обществе.. СПб. : ЛАНЬ, 2019. 227 с.
3. The Global Risks Report 2022 // World Economic Forum, 2022. 117 p.
4. Mayer-Schonberger V. Big Data / V. Mayer-Schonberger, K. Cukier. Eamon Dolan, 2014. 272 p.
5. Rehman M.H. Big Data Reduction Methods: A Survey / M.H. Rehman et al. // Data Science and Engineering. 2016. Vol. 1. P.265–284.
6. Lindstrom M. Small Data: The Tiny Clues That Uncover Huge Trends. St. Martin's Publishing Group, 2016. 256 p.
7. Zadeh L. Fuzzy Sets, Fuzzy Logic, and Fuzzy Systems / L. Zadeh, G. Klir, B. Yuan. World Scientific Pub. Co. Inc., 1996. 840 p.
8. Смирнов С.В. Онтологический подход к формированию гетерогенных сред моделирования // Вестник Самарского ГТУ, Сер. Технические науки. 2011. № 4(32). С. 50 – 62.
9. 1516.1-2000 IEEE Standard for Modeling and Simulation (M&S) High Level Architecture (HLA). Federate Interface Specification 2000. IEEE, 2000. 480 p.

# ОПРЕДЕЛЕНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ОБЛАСТИ НА ФРАГМЕНТЕ RGB ИЗОБРАЖЕНИЯ ДЛЯ ОЦЕНКИ РАЗВИТИЯ РАСТЕНИЙ

М.А. Недзьведь<sup>1</sup>, А.А. Недзьведь<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Белорусский Государственный Университет, биологический факультет, п-т. Независимости, д. 4, г. Минск, Беларусь, maksimnedzved@gmail.com

<sup>2</sup> Белорусский Государственный Университет, ФПМИ, п-т. Независимости, д. 4, г. Минск, Беларусь, artiom.nedzved@gmail.com

Анализ биологических объектов часто требует проведения спектрального анализа их изображений. Получение спектра на основе данных RGB изображения представляет собой достаточно сложную задачу. Поэтому в данной работе предлагается подход на основе использования деконволюции цвета, позволяющий получить более точные результаты.

**Ключевые слова:** спектральный анализ; цвет; конволюция цвета.

## DETERMINATION OF THE SPECTRAL CHARACTERISTICS OF A REGION ON A FRAGMENT OF RGB IMAGES FOR ASSESSMENT OF PLANT DEVELOPMENT

М.А. Nedzved<sup>1</sup>, А.А. Nedzved<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Belarusian State University, Faculty of Biology, pr. Nezavisimosti 4, Minsk, Belarus, maksimnedzved@gmail.com*

<sup>2</sup> *Belarusian State University, FAMCS, pr. Nezavisimosti 4, Minsk, Belarus, artiom.nedzved@gmail.com*

Often analysis of biological objects requires spectral analysis for reseach. Definition a spectrum from RGB image data is very complicate task. Therefore, in this paper, we propose an approach based on the using of color deconvolution, which makes it possible to obtain more accurate results.

**Keywords:** spectral analysis; color; color convolution.

### Введение

Цвет биологического объекта формируется за счёт двух механизмов. Одна из них – структурная окраска (явление иридесценции), когда окраска задаётся структурой поверхностей, на которые падает свет. Это явление характерно как для животных, такие примеры встречаются почти в каждом таксоне, так и для растений. Так, современные исследования находят как минимум один вид растений со структурной окраской в каждом семействе. Достаточно указать на листья бегонии, цвет которой

задаётся особой формой хлоропластов, или сизый цвет хвои голубой ели, цвет которой объясняется наноструктурой воскового налёта.

Тем не менее, для физиологии растений гораздо важнее другой механизм окраски – химический, или биохимический. Он связан со способностью молекул характерным для неё способом поглощать и отражать свет в ультрафиолетовой и инфракрасной областях спектра. В биологии эти молекулы называются пигментами. У растений пигменты имеют непосредственное физиологическое значение: участие в фотохимических и других метаболических процессах – зелёные хлорофиллы и желтые, оранжевые и красные каротиноиды, защита от излучений и участие в опылении энтомофильных растений (опылении насекомыми) – желтые, синие или фиолетовые флавоноиды.

Так же надо учитывать, что синтез пигментов у растений это сложный, многоступенчатый энергозатратный процесс, в котором задействованы многоферментные комплексы. В полной мере осуществлять его может только здоровое растение.

Таким образом, получая информацию о цвете растительного объекта (оптимально использовать верхнюю сторону листовой пластины), мы получаем информацию о концентрации пигмента, что нам может говорить о физиологическом состоянии анализируемого объекта (организма, или реже, анализируемого органа). При этом важно отметить, что у здорового листа содержание пигментов колеблется незначительно, так как процессы отмирания и образования новых пигментов идут с примерно равной скоростью. Так что у растения в нормальном физиологическом состоянии окраска листьев будет иметь определённое нормальное значение.

Цель данной работы – определение значений спектральных характеристик цвета в полихроматических условиях для изображений, полученных обычными цифровыми камерами.

## **1. Проблема преобразований цветовых систем в спектр**

Цветные изображения окрашенных биологических образцов формируются на основе заполнения областей разными красителями с разной концентрацией. Цвет формируется путем разложения значений абсорбции смесей красителей на значения абсорбции отдельных пятен, в данном случае простое разложение по координатам цветовых систем. Такое разложение не позволяет получить линейную зависимость между концентрацией красителя и абсорбцией, которая соответствует линии спектра в монохроматических условиях. Большинство диагностических задач в биологии ориентированы на полихроматические условия, для которых невозможно получить точные значения спектра.

Существует бесконечное количество спектров, соответствующих одному и тому же цвету RGB. Такие спектры называются метамерами. С математической точки зрения любая функция спектрального распределения, дающая заданные значения RGB, является решением обратной задачи. Однако требование физической корректности накладывает ряд ограничений, например, спектры источника света с отрицательными значениями не имеют смысла. При наличии априорной информации об исходном спектре на результат могут быть наложены некоторые дополнительные ограничения, такие как непрерывность или гладкость.

Известно несколько решений такой задачи. Они основаны на представлении спектра в виде кусочно-постоянных функций с постоянным шагом по длине волны. В статье [1] спектр восстанавливается как линейная комбинация трех базовых функций, соответствующих излучающему люминофору. Коэффициенты получаются из исходного цвета RGB путем решения системы линейных уравнений. В [2] предлагается взять такую же линейную комбинацию указанных автором функций: постоянной, синуса и косинуса. Аналогично получаются коэффициенты. Эти два подхода позволяют получать спектры, которые дают точно исходный цвет RGB после свертки с начальными кривыми отклика. Недостатком этих подходов является то, что они не учитывают реальный физический смысл результирующего спектра. И результатом может быть спектр, имеющий отрицательное значение. Автор [3] ввел дополнительные ограничения на гладкость спектра для лучшего согласования результирующих спектров отражения для известных материалов. С использованием этого ограничения был построен набор базовых функций, и результирующий спектр рассматривается как их линейная комбинация. Проблема этого метода заключается в невозможности восстановить спектр для некоторых цветов, соответствующих реально существующему спектру. В [4] спектрограмма строится как нормированная сумма допустимых частных решений, соответствующих набору случайно выбранных троек длин волн. Таким образом, авторы получили репрезентативный спектр, в котором все видимые длины волн соответствуют ненулевой интенсивности. Автор также предоставляет методы получения правильного спектра излучения и отражения. Однако этот метод требует очень много времени. Общая проблема существующих методов корректного построения спектра состоит в том, что ограничения корректности имеют определенную форму и заложены внутри самого метода. Также эти методы довольно сложны в реализации. Другой проблемой методов преобразования цвета RGB в

спектр является стабильность. В реалистичной визуализации они используются для построения спектрального изображения из обычного цветного изображения. Затем это спектральное изображение накладывается на объект в виде текстуры или используется как площадной источник света. Если одинаковые цвета соседних пикселей на изображении будут преобразованы в очень разные спектры, это приведет к образованию шума на конечном изображении. Поэтому стабильность цвета является еще одним требованием метода. Неформально это можно выразить так: для любых двух одинаковых цветов их спектры также должны быть подобны. Стабильность большинства вышеперечисленных методов не исследована, а некоторые из методик ею не обладают. Например, итерационный метод [5] неустойчив из-за использования случайных начальных приближений.

## 2. Цветовые системы и спектр

В модели физического формирования сигнала спектрального поглощения света окраска биологических образцов вызвана смесью разных красителей. Путем суммирования вкладов спектрального пропускания области, спектральной чувствительности сенсора и спектральных характеристик широкополосного (в системе CIE D65) или узкополосного (RGB) освещения получают немонахроматические сигналы сенсора. В данном случае, использование представление в RGB формате не является эффективным, так как затрудняет представление цвета в виде спектра. Тем не менее, существует система хуз [6] определяющая хроматическую плоскость в координатах  $x, y$ . Самым простым способом определения спектральных характеристик является использование хроматической диаграммы МКО (CIE 1931) которая лежит в плоскости данных координат. Волны спектра соответствуют углу на кривой диаграммы. Пространство RGB необходимо преобразовать в хуз.

$$x = 0,3935 R + 0,3653 G + 0,1916 B$$

$$y = 0,2124 R + 0,0711 G + 0,0866 B$$

$$z = 0,0187 R + 0,1119 G + 0,9582 B$$

Используя соответствия на хроматической диаграмме CIE 1931 (рис.1), можно получить длину волны от 380 до 780 нм с шагом в 5 нм, используя специальный массив, в котором длина волны определяется по координатам  $X, Y$ :



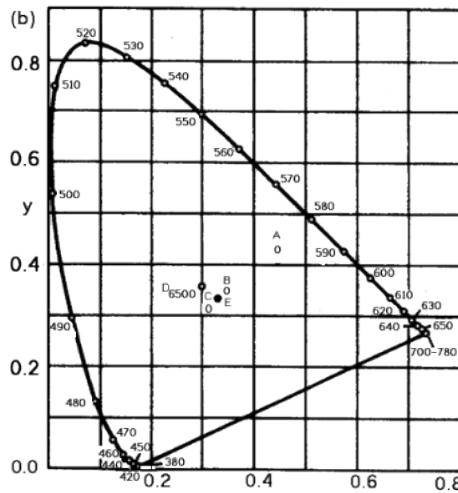


Рисунок 1 – Хроматическая диаграмма CIE 1931

{{0.1741, 0.0050}, {0.1740, 0.0050}, {0.1738, 0.0049}, {0.1736, 0.0049},  
 {0.1733, 0.0048}, {0.1730, 0.0048}, {0.1726, 0.0048}, {0.1721, 0.0048},  
 {0.1714, 0.0051}, {0.1703, 0.0058}, {0.1689, 0.0069}, {0.1669, 0.0086},  
 {0.1644, 0.0109}, {0.1611, 0.0138}, {0.1566, 0.0177}, {0.1510, 0.0227},  
 {0.1440, 0.0297}, {0.1355, 0.0399}, {0.1241, 0.0578}, {0.1096, 0.0868},  
 {0.0913, 0.1327}, {0.0687, 0.2007}, {0.0454, 0.2950}, {0.0235, 0.4127},  
 {0.0082, 0.5384}, {0.0039, 0.6548}, {0.0139, 0.7502}, {0.0389, 0.8120},  
 {0.0743, 0.8338}, {0.1142, 0.8262}, {0.1547, 0.8059}, {0.1929, 0.7816},  
 {0.2296, 0.7543}, {0.2658, 0.7243}, {0.3016, 0.6923}, {0.3373, 0.6589},  
 {0.3731, 0.6245}, {0.4087, 0.5896}, {0.4441, 0.5547}, {0.4788, 0.5202},  
 {0.5125, 0.4866}, {0.5448, 0.4544}, {0.5752, 0.4242}, {0.6029, 0.3965},  
 {0.6270, 0.3725}, {0.6482, 0.3514}, {0.6658, 0.3340}, {0.6801, 0.3197},  
 {0.6915, 0.3083}, {0.7006, 0.2993}, {0.7079, 0.2920}, {0.7140, 0.2859},  
 {0.7190, 0.2809}, {0.7230, 0.2770}, {0.7260, 0.2740}, {0.7283, 0.2717},  
 {0.7300, 0.2700}, {0.7311, 0.2689}, {0.7320, 0.2680}, {0.7327, 0.2673},  
 {0.7334, 0.2666}, {0.7340, 0.2660}, {0.7344, 0.2656}, {0.7346, 0.2654},  
 {0.7347, 0.2653}, {0.7347, 0.2653}, {0.7347, 0.2653}, {0.7347, 0.2653},  
 {0.7347, 0.2653}, {0.7347, 0.2653}, {0.7347, 0.2653}, {0.7347, 0.2653},  
 {0.7347, 0.2653}, {0.7347, 0.2653}, {0.7347, 0.2653}, {0.7347, 0.2653},  
 {0.7347, 0.2653}, {0.7347, 0.2653}, {0.7347, 0.2653}, {0.7347, 0.2653},  
 {0.7347, 0.2653}}

Следует отметить, что все описанные способы вычисления характеристик цвета можно использовать только при качественно откалиброванных и отъюстированных системах ввода изображения, так как даже незначительные ошибки при вводе приводят к неправильным результатам. И даже при качественной калибровке вероятность ошибки декомпозиции спектра слишком высока.

### 3. Применение деконволюции цвета для коррекции формирования спектра

Цветовая деконволюция – это метод преобразования цветных изображений нескольких окрашенных биологических образцов в изображения, представляющие концентрации красителей на основе разложения значений цветовых координат для смесей красителей. Метод предполагает линейную зависимость между концентрацией красителя и абсорбцией, которая действительна только в монохроматических условиях, т.е. в условиях, при которых формируется спектральная линия. Это свойство соответствует математической модели для расчета немнохроматических значений поглощения. Нелинейные характеристики формирования поглощения приводят к значительным ошибкам деконволюции. Такую модель можно использовать для количественной оценки компонентов системы.

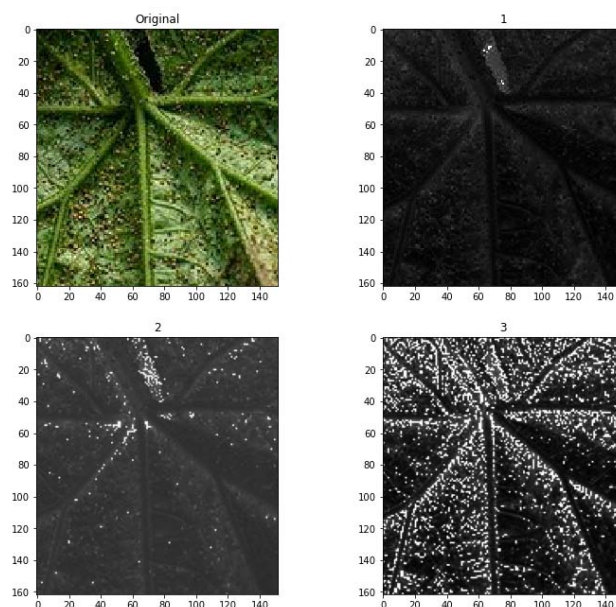


Рисунок 2 – Изображение в системе ортогональных векторов, включающей ось с длиной волны 550 нм (зеленый – первая компонента)

Для реализации деконволюции цвета использовался алгоритм Ruifrok-Johnston [8], реализованный в пакете deconvolution (<https://github.com/grfrederic/deconvolution>). Алгоритм использует базис трех векторов в трехмерном пространстве. Для выделенной спектральной линии используется только одна ось, поэтому для получения остальных осей используется метод Грама-Шмидта, как способ ортогонализации системы линейно-независимых векторов, как на рис.2.

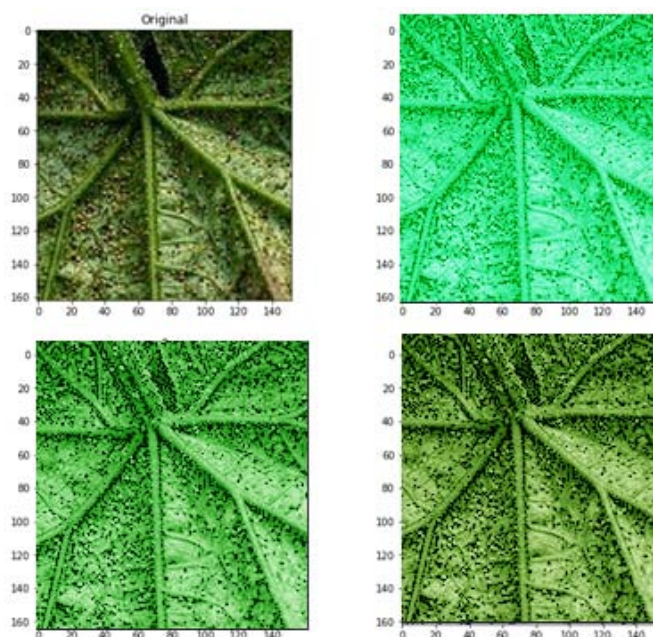


Рисунок 3 – Изображения для зеленых компонент спектральных линий с длиной волны 550нм, 555нм, 560нм.

Таким образом можно построить набор изображений, в которых будет отражаться спектральная составляющая, как на рис.3.

### **Заключение**

Предложенный метод позволяет построить набор изображений, отображающий компоненты заданных спектральных линий, что позволяет сместить исследование в сторону спектрального анализа. Однако использование данного метода требует серьезной калибровки как условий съемки изображения, так и собственно спектра. Важно отметить, что этот подход не учитывает влияние ошибок, связанных с подготовкой образцов и визуализацией. Таким образом, полученные результаты описывают эффекты, вызванные исключительно методологической ошибкой линейной деконволюции нелинейных сигналов поглощения. Для дальнейшей оптимизации необходимо использовать методы машинного

обучения, которые позволят автоматически определить методику калибровки спектра отталкиваясь от особенностей исследуемого биологического объекта.

### **Библиографические ссылки**

1. Glassner A.S. How to derive a spectrum from an RGB triplet // IEEE Computer Graphics and Applications, July 1989. Vol. 9, №.4. P. 95–99.
2. Glassner A.S. Principles of Digital Image Synthesis // San Francisco: Morgan-Kaufman, 1995. P.104–105.
3. Smits B. An RGB-to-spectrum conversion for reflectances // Journal of Graphics tools. 1999. Vol. 4. № 4. P.11–22.
4. Zhdanov D.D., Potemin I.S. Spectrum construction from RGB triplet in spectral simulation tasks // The Conference Proceedings of Graphicon-2010, St. Petersburg, 2010. P. 144–147.
5. Valiev I.V., Voloboy A.G., Denisov Ye.Yu., Ershov S.V., Pozdnyakov S.G. Transformation of XYZ triplet into spectrum for surface properties // The Conference Proceedings of Graphicon-2015, Moscow-Protvino, 2015. P. 209-213.
6. Lobanov I.V. Spectral representations and hardware accelerated ray tracing in jewel rendering //The Conference Theses of Lomonosov-2014. Moscow, 2014.
7. Прэтт У. Цифровая обработка изображений: Пер. с англ. М. : Мир, 1982. Кн.1 312 с.
8. Ruifrok AC, Johnston DA. Quantification of histological staining by color deconvolution // Anal Quant Cytol Histol. 2001. № 23(4). P. 291–299.

УДК 004.93'1; 004.932;  
002.6-027.21; 002.6:001.8

## **НАХОЖДЕНИЕ СТЕПЕНИ СХОДСТВА ОБЪЕКТОВ В МНОЖЕСТВАХ, ЗАДАННЫХ ПО ПРЕЦЕДЕНТНОСТИ**

**В.А. Образцов**

*Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030,  
г. Минск, Беларусь, obraztsov@bsu.by*

В работе предлагается новый взгляд на решение проблемы сходства путем сведения ее к задаче распознавания с обучением. Решение предлагается строить на базе метрического варианта алгоритма с использованием мер близости, подобия и прецедентности. Рассмотрены некоторые конкретные варианты реализации перечисленных мер.

**Ключевые слова:** Проблема сходства; задача распознавания с обучением; меры близости; подобия и прецедентности.

## **FINDING THE DEGREE OF SIMILARITY OF OBJECTS IN SETS SPECIFIED BY PRECEDENCE**

**V.A. Obratzsov**

*Belarusian State University, 4 Niezalieznasci Avenue, Minsk 220030, Belarus*

The article provides a fresh approach to solving the similarity problem by reducing it to pattern recognition problem with training. The solution is proposed to be built on the basis of the distance-based version of the algorithm using closeness, likeness and precedence measures. Some specific options for the implementation of these measures are considered.

**Keywords:** similarity problem; pattern recognition problem with training; closeness; likeness and precedence measures.

### **Введение**

Понятие сходства объектов играет очень важную роль в различных разделах математики. Это понятие широко используется при решении прикладных задач в кибернетике (распознавание образов), информатике (теория кодирования) и целом ряде разделов прикладной математики [1]. В данной статье предлагается рассматривать проблему сходства как задачу распознавания с обучением. Решение последней предлагается строить с использованием мер близости, подобия и прецедентности [2].

## 1. Проблема сходства как задача распознавания

Рассмотрим вначале как можно определить сходство объектов в произвольном множестве  $X$ . В общих чертах это можно сделать по следующей схеме. Так как речь идет о сходстве объектов, то очевидно, что сходство можно рассматривать как некое бинарное отношение  $\sigma$  на множестве  $X \times X$ . Подразумевается, что  $\sigma$  в случае сходства является эквивалентностью, т.к. для любых  $x, y, z \in X$  имеет место:

$$x\sigma x, \quad x\sigma y \Rightarrow y\sigma x, \quad x\sigma y \& y\sigma z \Rightarrow x\sigma z$$

Как известно [3], в этом случае эквивалентности  $\sigma$  (и, соответственно, сходству) может быть поставлено в соответствие некоторое разбиение множества  $X$  на подмножества  $X_1, \dots, X_l$ . В каждое подмножество  $X_i$  попадают сходные объекты. Чтобы представить это формально, сопоставим разбиению  $X_1, \dots, X_l$  систему предикатов  $P(x) = (P_1(x), \dots, P_l(x))$ , компоненты которой  $P_i(x) \forall i \in \{1, 2, \dots, l\}$  определяются следующим образом:

$$P_i(x) = \begin{cases} 1, & \text{if } x \in X_i, \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (1)$$

Теперь, произвольные объекты  $x, y \in X$  можно назвать сходными, если выполняется следующее условие:

$$\prod_{i=1}^l P_i(x) \times P_i(y) = 1. \quad (2)$$

Введенное по такой схеме понятие сходства показывает, что говорить о сходстве объектов в произвольном множестве  $X$  можно только при условии, что в нем задано разбиение  $X_1, \dots, X_l$  и  $l \geq 2$ . Наибольшую сложность представляет собой вычисление предикатов (1). Сам характер их вычисления зависит от способа задания множества  $X$  и его соответствующих подмножеств. Особую сложность и, вместе с тем, наивысший интерес с практической точки зрения, представляют собой задачи, в которых используется прецедентный способ задания множества. К их числу можно отнести широко известную задачу распознавания образов с обучением.

Рассмотрим вначале ее постановку. В этой задаче заданными являются некоторое множество объектов  $X$  произвольной природы, разбитое на подмножества (классы)  $X_1, \dots, X_l$  ( $l \in \mathbb{N}$ ). Причем, классы не пересекаются  $X_i \cap X_j = \emptyset \forall i \neq j$  ( $i, j \in \{1, \dots, l\}$ ). Информация о множестве задана по

прецедентности: т.е. имеется выборка объектов  $X^0 \subset X$ , которая удовлетворяет условию  $X^0 \cap X_i \neq \emptyset (\forall i \in \{1, \dots, l\})$ . Кроме того, для каждого объекта  $x \in X^0$  известна (определена) информация о принадлежности к классам  $X_1, \dots, X_l$ . Она может быть задана с помощью системы предикатов (1) и называется обычно информационным вектором, т.к. для каждого объекта  $x \in X^0$  этот вектор известен. Теперь задачу распознавания с обучением можно сформулировать следующим образом. Пользуясь только лишь введенной информацией, необходимо указать (построить) алгоритм:

$$\forall x \in X (A: x \times X^0 \rightarrow P(x)), \quad (3)$$

определенный на всем множестве  $X$ .

Из приведенной постановки видно, что в задаче распознавания фактически производится вычисление предикатов (1), что можно использовать для определения сходства в смысле (2).

## 2. Реализации функции сходства как решение задачи распознавания

Рассмотрим один из простейших вариантов такого алгоритма  $A$  [4].

### Метрический алгоритм.

**Шаг 0.** Инициализация исходной информации. Разделим выборку  $X^0$  на части полагая:  $X_i^0 = X^0 \cap X_i$ ,  $|X_i^0| = m_i$ ,  $|X^0| = m$ .

**Шаг 1.** Определение функции:

$$s: X \times X \rightarrow \mathbb{R} \quad (4)$$

*пояснение:* очевидно, что (4) может быть вычислено на выборке  $X^0$ . В результате объекту  $x$  можно сопоставить вектор  $(s(x, x_1), \dots, s(x, x_m))$   $m_1$  первых компонент которого задают значение (4) на  $X_1^0$ ,  $m_2$  следующих задают значение  $x$  (4) на  $X_2^0$  и т.д.

**Шаг 2.** Определение функции:

$$f_i: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}, i \in \{1, \dots, l\} \quad (5)$$

*пояснение:* с помощью функций (5) каждому вектору  $(s(x, x_1), \dots, s(x, x_m)) \in \mathbb{R}^m$  можно сопоставить вектор  $(f_1(x), \dots, f_l(x)) \in \mathbb{R}^l$ .

**Шаг 3.** Определение решающего правила  $P^A$  в виде:

$$P^A: \mathbb{R}^l \rightarrow \mathbb{B}_2^l, \mathbb{B}_2 = \{0, 1\} \quad (6)$$

*комментарий:* вектор  $P^A(x) = (P_1^A(x), \dots, P_l^A(x))$  в отличие от вектора  $P(x)$  называют обычно классификационным.

**Конец алгоритма.**

Приведенный алгоритм действительно является простейшим вариантом реализации отображения (3). Более сложные и интересные с практической точки зрения варианты можно найти в литературе. Мы же ограничимся приведенным вариантом алгоритма, т.к. нас в большей степени интересуют способы вычисления функции (4), которые, в конечном итоге, и определяют все разнообразие вариантов вычисления сходства (2). Для определения способов мы воспользуемся результатами, приведенными в [2]. Там с этой целью определены три варианта для определения функции (4): меры близости, подобия и прецедентности. Опишем их вкратце, а все недостающие детали можно найти в [2].

**Вариант I. Метрическая близость.** (для пространства  $X \subseteq \mathbb{R}^n$ )

Выбор функции (4).

В общем случае метрическая близость определяется следующим образом:

$$\forall x_1, x_2, x_3 \in X \begin{cases} s(x_1, x_2) = 0 \Leftrightarrow x_1 = x_2; \\ s(x_1, x_2) = s(x_2, x_1); \\ s(x_1, x_2) \leq s(x_1, x_3) + s(x_3, x_2). \end{cases}$$

Примеры:

– метрика Евклида ( $X \subseteq \mathbb{R}^n$ )

$$s(x_1, x_2) = \left( \sum_{i=1}^n (x_{1i} - x_{2i})^2 \right)^{1/2}$$

**Вариант II. Метрическое подобие.** (для пространства  $X \subseteq \mathbb{R}_+^n, \mathbb{R}_+ \stackrel{\text{def}}{=} \{x | x \in \mathbb{R}, x > 0\}$ )

Выбор функции (4). В общем случае, когда сходство объектов в пространстве  $X$  определяется с помощью функции  $s: X \times X \rightarrow \mathbb{R}$ , численно реализующей метрическое подобие, такая функция должна удовлетворять следующим условиям:

$$\forall x_1, x_2, x_3 \in X \begin{cases} s(x_1, x_2) = 1 \Leftrightarrow x_1 = x_2; \\ s(x_1, x_2) = (s(x_2, x_1))^{-1}; \\ s(x_1, x_2) = s(x_1, x_3) \times s(x_3, x_2). \end{cases}$$



**Пример:** (для случая  $x_1, x_2 \in \mathbb{R}_+^n, \mathbb{R}_+ \stackrel{\text{def}}{=} \{x | x \in \mathbb{R}, x > 0\}$ ) Если условие не выполняется, то описанный ниже метод не применим.

**Инициализация:** Полагаем ниже по определению  $n + 1 \stackrel{\text{def}}{=} 1$  и вычисляем

$$s(x_1, x_2) = \left( \prod_{k=1}^n \frac{x_{1k} \cdot (x_{1k+1})^{-1}}{x_{2k} \cdot (x_{2k+1})^{-1}} \right)^{1/n}$$

**Конец процедуры вычисления  $s(x_1, x_2)$ .**

**Вариант III. Метрическая прецедентность.** (для пространства  $X \subseteq \mathbb{B}_2^n, \mathbb{B}_2 = \{0,1\}$ )

Выбор функции (4). В общем случае, когда сходство объектов в пространстве  $X$  определяется с помощью функции  $s: X \times X \rightarrow [-1,1]$ , численно реализующей метрическую прецедентность, такая функция должна удовлетворять следующим условиям:

$$\forall x_1, x_2, x_3 \in X \begin{cases} s(x_1, x_2) = 1 \Leftrightarrow x_1 = x_2; \\ s(x_1, x_2) = s(x_2, x_1); \\ s(x_1, x_2) + s(x_1, \bar{x}_2) = 0. \end{cases}$$

**Подготовительный этап:** (подсчет параметров алгоритма)

**Шаг 1.** Фиксируем номер класса  $i \in \{1, \dots, l\}$  и переходим к шагу 2.

**Шаг 2.** Для всех признаков  $j \in \{1, \dots, n\}$  вычисляем:

$$b_{ij} = (m_i)^{-1} \left( \sum_{x_t \in X_i^0} x_{tj} \right)$$

где  $x_{tj}$  - значение признака  $j$  в векторе  $x_t \in X_i^0$  ( $t \in \{1, \dots, m_i\}$ )

**Шаг 3.** Шаги 1&2 выполняем до тех пор, пока все номера классов и все признаки в каждом классе не будут исчерпаны. Затем переходим к шагу 4.

**Шаг 4.** Для всех признаков  $j \in \{1, \dots, n\}$  и классов  $i \in \{1, \dots, l\}$  вычисляем:

$$b_j = (l)^{-1} (\sum_{i=1}^l b_{ij}); a_{ij} = |b_{ij} - b_j| \quad (7)$$

**Основной этап:** (вычисление функции  $s(x, x_t)$ )

Функция  $s(x, x_t)$  зависит от параметров (7). При описании этой зависимости в формуле ниже предполагаем, что  $x_2 \in X_i^0$  и для всех таких  $x_2$  вычисляем

$$s(x_1, x_2) = \left( \sum_{j=1}^n a_{ij} \right)^{-1} \times \left( \sum_{j=1}^n (-1)^u \times a_{ij} \right), \quad u = \begin{cases} 1, & \text{если } x_{1j} \neq x_{2j} \\ 2, & \text{иначе} \end{cases}$$

Замечание: при вычислении функции (4) для II и III вариантов можно напрямую воспользоваться введенными мерами. Можно также перейти к метрической близости (метрикам), вводя меру следующим образом:

$$\mu(x_1, x_2) = 1 - \min\{s(x_1, x_2), (s(x_1, x_2))^{-1}\} \text{ (для варианта II)}$$

$$\mu(x_1, x_2) = 1 - s(x_1, x_2). \text{ (для варианта III)}$$

Выбор функций (5) и (6) во всех приведенных вариантах почти очевиден. Основные идеи можно найти в [2, 4].

### Заключение

В статье развивается новый взгляд на решение проблемы сходства для случая, когда множество задано по прецедентности. Предложен алгоритм, который базируется на интересных в контексте более широкой проблемы распознавания мерах – подобия и прецедентности. Полученные результаты являются хорошей основой для их обобщения на случай нечетких множеств.

### Библиографические ссылки

1. V.K. Leont'ev On measures of similarity and distances between objects. Computational Mathematics and Mathematical Physics, 2009. V.49, Issue 11. P. 2041–2058.
2. Obraztsov V. Possible Methodological Options for Development of Pattern Recognition Theory / V. Obraztsov, M. Sun // Communications in Computer and Information Science. Volume 1055: Pattern Recognition and Information Processing. Springer Nature Switzerland. 2019. P. 64–73.
3. A.I. Maltzev Algebraic systems. M.: Science, 1970. 392 p. (in russian).
4. Krasnoproshin VV Problems of solvability and choice of algorithms for decision making by precedence / VV Krasnoproshin, VA Obraztsov // Pattern Recognition and Image Analysis, 2006. V. 16, Issue 2. P. 155–169.

## СОЗДАНИЕ КАТАЛОГА ТОВАРОВ ЭЛЕКТРОННОЙ КОММЕРЦИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

**В.В. Сорокина**

*Белорусский государственный университет  
пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь  
viktorina.sorokina.96@gmail.com*

В данной работе представлена технология для автоматического создания каталога товаров электронной коммерции на основе нейронных сетей. Под каталогом товаров электронной коммерции подразумевается набор обработанных фотографий товаров. Технология включает в себя этапы по определению самого товара (задача object detection) и его основного цвета, сегментации и автоматической обрезке (задача определения частей тела человека). Новизна представленной работы заключается в использовании сверточных нейронных сетей совместно с моделью внимания, которая способна концентрироваться на определенных областях входного изображения.

**Ключевые слова:** Электронная коммерция; каталог товаров; модель внимания; сверточная нейронная сеть; сегментация.

## CREATING A CATALOG OF E-COMMERCE GOODS USING NEURAL NETWORKS

**V. Sorokina**

*Belarussian State University,  
Nezavisimosti av. 4, Minsk, 220050, Belarus, Minsk, Belarus  
viktorina.sorokina.96@gmail.com*

In this paper a technology for automatically creating a catalog of e-commerce products based on neural networks is presented. An e-commerce product catalog is a set of processed product photos. The technology includes steps for determining the product itself (the task of object detection) and its main color, segmentation and automatic cropping (the task of determining parts of the human body). The novelty of the presented work lies in the use of convolutional neural networks in conjunction with an attention model that is able to focus on certain areas of the input image.

**Keywords:** E-commerce; catalog of goods; attention model; convolutional neural network; segmentation.

### **Введение**

В электронной коммерции одну из ключевых ролей играет каталог товаров. Каталог товаров – это набор изображений, представляющий товар. Создание каталога – процесс подготовки фотографий от момента съемки

до представления готового набора [1]. С быстрым ростом электронной коммерции и появлением алгоритмов искусственного интеллекта, традиционные системы управления контентом уступают место автоматизированным масштабируемым системам.

При подготовке изображений одежды, например, обычно используется фотография человека в полный рост, представляющего несколько предметов одежды одновременно. Задача состоит в определении положения предмета, его сегментации, обрезки и создания Color swatch – образца цвета товара. В настоящее время процесс подготовки изображений для каталогов производится вручную.

Для автоматизации данного процесса нами разработана технология, позволяющая при помощи решения задачи object detection, сегментации, выделения частей тела человека, а также определения доминантного цвета товара осуществлять автоматическую подготовку каталога товаров электронной коммерции.

## **1. Методология исследования**

В данной работе предлагается технология для автоматической подготовки изображений товаров электронной коммерции и создания каталога. Схема технологии представлена на рисунке 1.

Разработанная на базе данной технологии система представляет собой программу с веб-интерфейсом, реализованным с помощью фреймворка Flask, на вход которой подается RGB-изображение товара/группы товаров. Далее изображение последовательно проходит через алгоритмы, описанные ниже.

В начале определяется тип объекта на изображении. За это отвечает реализованный нами алгоритм на основе нейронной сети YOLACT [2] и стандартизации весов, подробное описание которого представлено в [3].

Результатом предыдущего шага является получение метки класса «человек» / «не человек». Если это человек, то срабатывает алгоритм Smart Cropping [4], где выделяются ключевые точки человеческого тела, вычисляется позиционное соотношение между ними, после чего оно используется для обрезки исходного снимка и создания набора изображений, представляющих товары. Данный алгоритм способен подготавливать изображения плечевой одежды, поясной одежды, головных уборов и обуви. В данной статье для определения частей тела человека используется архитектура OpenPose [5], модифицированная моделью внимания (attention model) [6]. Построенная модель позволяет не только структурировать части тела человека за счет полей сходства частей, но и более детально выделять части человеческого тела благодаря стимулам к

усилению значимых и подавлению незначимых объектов на изображении, что достигается ввиду построения двумерной матрицы оценок для каждой тепловой карты.

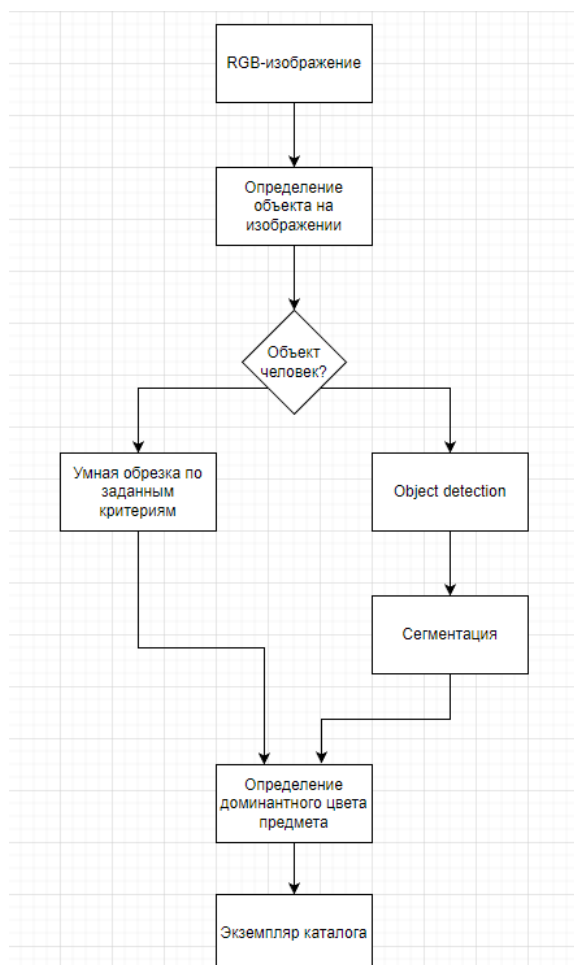


Рис. 1. Схема технологии

Если тип объекта не человек, то происходит классификация и обнаружения положения этого объекта при помощи сверточной нейронной сети YOLACT [2], а также модели внимания, после чего производится сегментация для последующего удаления фона. Модель внимания фиксирует кросс-канальные корреляции признаков, сохраняя при этом независимое представление в метаструктуре. Модуль сети выполняет набор преобразований для вложений низкой размерности и объединяет их выходные данные. Каждое преобразование включает в себя применение модели внимания по каналам, чтобы зафиксировать взаимозависимости карт признаков. Каждое преобразование имеет одну и ту же топологию. Такой подход позволяет ускорить обучение, используя идентичную реализацию, как и у унифицированных операторов CNN.

Последним шагом в технологии создания каталога товаров электронной коммерции является определение доминантного цвета товара и генерация образца – небольшого изображения (обычно 50x50 px), заполненного доминантным цветом. Для этого используется метод k-means [7]. При подборе правильного значения k центр тяжести самого большого кластера будет довольно хорошим представлением доминирующего цвета изображения.

## 2. Результаты и их обсуждение

В ходе исследования были разработаны следующие алгоритмы:

- задача обрезки изображения – алгоритм на основе архитектуры OpenPose с использованием модифицированной модели внимания VGG-19 [8]. Алгоритм показал улучшение точности на 8% и способен распознавать 23 ключевые точки человеческого тела.
- задача обнаружения объекта на изображении – алгоритм с использованием сверточной нейронной сети YOLACT с применением модели внимания. Обучение модели было направлено на распознавание 26 классов объектов электронной коммерции: модели (человека в полный рост), обуви (четырёх классов), одежды (пяти классов), еды (пяти классов), косметики (пяти классов), кухонной техники, аксессуаров и класса заднего фона. Модель внимания использовалась в основе ResNet-101 [9] нейронной сети для выделения наиболее значимых признаков объекта. Она позволила улучшить распознавание объектов в среднем на 3%.
- задача сегментации – алгоритм на основе сверточной нейронной сети YOLACT с применением стандартизации весов. Обучение модели было направлено на распознавание 21 класса объектов электронной коммерции. Стандартизация весов использовалась в сверточных слоях при прямом проходе обучения нейронной сети. Это позволило улучшить классификацию объектов в среднем на 3%, а обнаружение объектов — на 4%.
- задача определения основного цвета товара на изображении – алгоритм на основе k-means, решающий задачу кластеризации цветов, обнаруженных на вырезанном при помощи предыдущего алгоритма изображении товара.

Во всех случаях для обучения использовались видеокарты GPU NVIDIA T4, набор данных COCO [10], размер исходного изображения не

менее 800x800 px. Алгоритмы системы были реализованы на фреймворке PyTorch.

### **Заключение**

Решение таких задач, как обнаружение объекта на изображении, его сегментация, обрезка и определение основного цвета предмета позволили создать технологию для автоматической подготовки изображений для электронного каталога товаров. Данная технология была протестирована на реальных изображениях товаров одного интернет-магазина.

Пример работы представлен на рисунке 2.

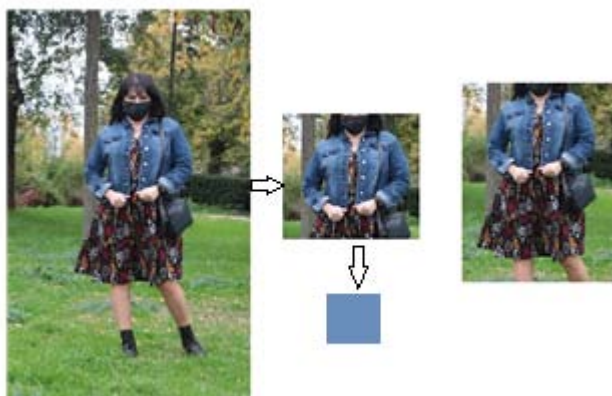


Рис. 2. Пример работы Smart Cropping системы

Результаты, полученные в разработанной программе, могут быть использованы для подготовки изображений других категорий товаров.

По мере того, как данных становится больше и появляются новые технологии, мы постоянно улучшаем построенную систему. Например, планируется оценка релевантности изображения, используя название и описание продукта.

### **Библиографические ссылки**

1. eCommerce Product Image Guide. URL: <https://www.threekit.com/blog/ecommerce-product-image-guide-2020>. (Date of access: 25.03.2021).
2. Bolya D. YOLACT: Real-time Instance Segmentation / D. Bolya [et al.] // Proceedings of the IEEE/CVF International Conference on Computer Vision (ICCV), 2019. P. 9157–9166.
3. Сорокина В.В., Абламейко С.В. Применение метода стандартизации весов в нейросети в задаче сегментации изображений электронной коммерции / В. В. Сорокина // Развитие информатизации и государственной системы научно-технической информации (РИНТИ-2020) : доклады XIX Международной конференции, Минск, 19 ноября 2020 г. Минск: ОИПИ НАН Беларуси, 2020 С. 182–187.

4. Viktoria Sorokina and Sergey Ablameyko. Extraction of Human Body Parts from the Image Using Convolutional Neural Network and Attention Mode. Proceedings of 15th International conference “Pattern Recognition and Information Processing”, Minsk, UIIP NASB, 2021. P. 84-88.
5. Realtime Multi-Person 2D Pose Estimation using Part Affinity Fields / Zhe Cao [et al.] // 2017 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR), Honolulu, 21–26 July 2017. Honolulu, 2017. P. 1302–1310.
6. Dzmitry Bahdanau, Kyunghyun Cho, and Yoshua Bengio. 2015. Neural Machine Translation by Jointly Learning to Align and Translate. In 3rd International Conference on Learning Representations.
7. MacQueen J.B. Some methods for classification and analysis of multivariate observations. In L. M. Le Cam & J. Neyman (Eds.), Proceedings of the fifth Berkeley symposium on mathematical statistics and probability. Vol. 1, P. 281–297. California: University of California Press.
8. Very Deep Convolutional Networks for Large-Scale Image Recognition / Karen Simonyan and Andrew Zisserman // International Conference on Learning Representations, San Diego, May 7–9, 2015. San Diego, 2015. P. 1137–1149 .
9. He K. Deep Residual Learning for Image Recognition / K. He [et al.] // 2016 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. Las Vegas, 2016. P. 770–778.
10. COCO dataset // COCO 2018 Keypoint Detection Task. URL: <http://cocodataset.org/#overview> (Date of access: 05.04.2019).



## МЕТОДЫ ГЛУБОКОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ВРЕМЕНИ ДО ПОСЛЕДНЕГО ОБЩЕГО ПРЕДКА ПО ГЕНОМУ

Е.В. Хомутов<sup>1</sup>, К. Арзыматов<sup>2</sup>

*Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»,  
ул. Мясницкая, 20, 101000, г. Москва, Россия*

<sup>1</sup>[ehomutov@hse.ru](mailto:ehomutov@hse.ru)

<sup>2</sup>[karzymatov@hse.ru](mailto:karzymatov@hse.ru)

Геномные данные являются богатым источником информации об истории популяции. В частности, для активно рекомбинирующих видов время до последнего общего предка (LCA) между двумя хромосомами может быть разным в разных хромосомных локусах. Оценка локального времени LCA важна для многих задач: ее можно использовать для определения генов, подвергающихся отбору или для определения эффективных изменений численности популяции. Современный метод PSMC для определения локального времени LCA и эффективного размера популяции основан на Скрытой Марковской модели. В этой работе мы предлагаем новый метод с использованием глубокого обучения для определения локального времени LCA в масштабе всего генома. Мы демонстрируем, что наш метод точен как по местному времени LCA, так и, как следствие, по распределению локального времени, что, в свою очередь, приводит к корректному вычислению траектории эффективного размера популяции. В будущем наш подход может быть обобщен для сложных демографических сценариев.

**Ключевые слова:** Глубокое обучение; популяционная геномика; LCA; эффективный размер популяции; демография; геном; хромосома.

## DEEP LEARNING METHODS FOR DETERMINING THE TIME TO THE LAST COMMON ANCESTOR BY GENOME

E. V. Khomutov<sup>a</sup>, K. Arzymatov<sup>b</sup>

*National Research University "Higher School of Economics",  
Myasnitskaya str., 20, 101000, Moscow, Russia*

<sup>a</sup>[ehomutov@hse.ru](mailto:ehomutov@hse.ru)

<sup>b</sup>[karzymatov@hse.ru](mailto:karzymatov@hse.ru)

Genomic data is a rich source of information about the history of the population. In particular, for actively recombining species, the time to the last common ancestor (LCA) between two chromosomes may be different at different chromosomal loci. The estimation of the local LCA time is important for many tasks: it can be used to determine genes undergoing selection, or to determine effective changes in population size. The modern PSMC method for determining the local LCA time and effective population size is based on a Hidden Markov model. In this paper, we propose a new deep learning platform for local

determination of LCA time at the scale of the entire genome. We demonstrate that our method is accurate both in local LCA time and, as a consequence, in LOCAL time distribution, which in turn leads to an effective population trajectory. In the future, our approach can be generalized to complex demographic scenarios.

**Keywords:** Deep learning; population genomics; LCA; effective population size; demography; genome; chromosome.

## Введение

Популяционная генетика - междисциплинарная область исследований, которая опирается на математические и вычислительные методы для определения демографии и структуры популяции во времени на основе геномных данных. Данные секвенирования генома богаты такой информацией, но из-за длины генома и сложной связи между разными участками генома возникают сложности анализа этих данных.

Демографический вывод, который предполагает оценку изменений численности популяции во времени, является одной из ключевых задач популяционной генетики. Например, было показано [1], что все неафриканские популяции прошли через аналогичное узкое место примерно между 30 тыс. лет назад (20 тыс. лет назад) и 100 тыс. лет назад. Африканское население не проявляет признаков такого узкого места. Этот факт подтверждает гипотезу об африканском происхождении современной человеческой популяции.

Современные методы демографического вывода, используемые для млекопитающих и некоторых других животных, основаны на Скрытой Марковской модели (НММ). Такие НММ декодирует генетические варианты вдоль генома при последовательном Марковском слиянии (SMC) [2,3]. SMC — это популяционная модель, которая аппроксимирует слияние с рекомбинацией [4]. При объединении с рекомбинацией генеалогия набора хромосом представляет собой ориентированный ациклический граф с дополнительной структурой данных, отражающей пространственную структуру вдоль этих хромосом. Ограничение этой генеалогии одним генетическим сайтом приводит к древовидной структуре. Эти деревья могут меняться между соседними участками гена из-за рекомбинаций при наследовании. В приближении SMC генеалогические деревья изменяются вдоль генома в соответствии с Марковским процессом. В соответствии с НММ эти генеалогические деревья являются скрытыми состояниями, а генетические варианты - выбросами. Различные методы основаны на этой идее, включая PSMC [1], diCal [5], MSMC [6], SMC++ [7][8], MSMC-im [9], ngsPSMC (неопубликованный). Эти методы различаются структурой входных данных.

Глубокое обучение также используется в популяционной генетике для изучения демографических, популяционных и эволюционных параметров, хотя эти методы широко не используются. Подробный обзор методов глубокого обучения в популяционной генетике представлен в [10], поэтому здесь мы обсудим лишь несколько важных примеров. Мондал и др. [11] использовал глубокое обучение для создания сводной статистики генома для приближенных байесовских вычислений (ABC) [12] для изучения архаичной интрогрессии в Азии и Океании. В [13] глубокое обучение используется для совместного определения демографии и естественного отбора. В [14] для определения горячих точек рекомбинации использовались сменные нейронные сети и моделирование "на лету". Первый метод получения подробной истории популяции с помощью глубокого обучения предложен в [15] и доказывает, что подход, основанный на нейронных сетях, может быть мощным инструментом в популяционной генетике. Хотя на местах необходимо приложить больше усилий для изучения преимуществ и ограничений глубокого обучения, которые будут использоваться для анализа реальных данных.

В этой работе мы предлагаем новый подход с использованием глубокого обучения для прогнозирования времени до общего предка вдоль диплоидного генома аналогично PSMC [1].

## **1. Методология исследования**

В популяционной генетике существуют две важные проблемы для приложений глубокого обучения. Во-первых, это длина генома. Например, геном человека составляет около 3,2 миллиарда нуклеотидов, что на несколько порядков больше, чем любой текст в задачах обработки естественного языка (NLP). Во-вторых, это отсутствие помеченных реальных данных. Эта проблема решается путем моделирования обучающих наборов данных с использованием эффективных тренажеров, доступных в полевых условиях.

Для теоретических изысканий в популяционной геномике мы не можем использовать реальные геномные данные, так как в этом случае мы не знаем истинные таргеты. Вместо реальных данных в популяционной геномике чаще используются смоделированные данные – в данной статье используются данные, полученные с помощью модуля [16]. После обработки выхода генератора имеем две последовательности – бинарный геном (где 0 – означает отсутствие мутации в позиции, 1 - наличие) и дискретное время до общего предка в каждой позиции (мы разбиваем прошлое на временные интервалы с экспоненциально растущей длиной). Такая обработка позволяет нам поставить задачу в терминах машинного

обучения – мы хотим решать задачу классификации с учителем. В качестве архитектуры нейронной сети мы выбрали рекуррентную нейронную сеть с 4 двунаправленной GRU [17]. Двунаправленные сети позволяют объединять информацию, полученную слева и справа от каждой позиции в последовательности, с не разделяемым набором весов для каждого из двух (слева направо и справа налево). Входные данные каждого уровня сети GRU являются выходными данными предыдущего уровня, и он также обрабатывает эти входные данные двунаправленным образом. Полученная модель схематично представлена на рисунке 1.

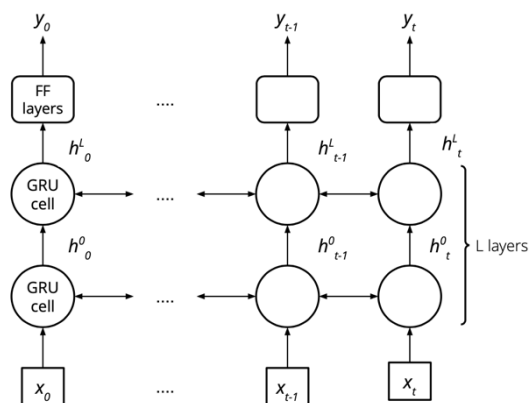


Рисунок 1 – схема архитектуры нейронной сети

## 2. Результаты и их обсуждение

Мы представляем результаты локального прогнозирования времени LCA модели, обученной по набору данных 1 на "постоянной" хромосоме (рисунок 2 левая панель), и модели, обученной по набору данных 2 на хромосоме "бутылочного горлышка". Тепловая карта представляет вероятности каждого временного класса LCA для каждой геномной позиции. Качественная оценка показывает, что в обоих случаях наша нейронная сеть довольно хорошо фиксирует время LCA.

Далее мы вычислили кумулятивное распределение времени до общего предка (сумма по всем позициям генома) из смоделированных геномов и из прогноза нейронной сети. Мы исследовали предсказание моделей dataset 1 и dataset 2 как для геномов "const", так и для геномов "bottleneck". Результаты представлены на рисунке 3. Модель, обученная на наборе данных 1, хорошо работает с геномом "const", а модель, обученная на наборе данных 2, хорошо работает с геномом "bottleneck". Предсказания модели набора данных 1 для генома "узкого места" и модели набора данных 2 для генома "const" менее точны.

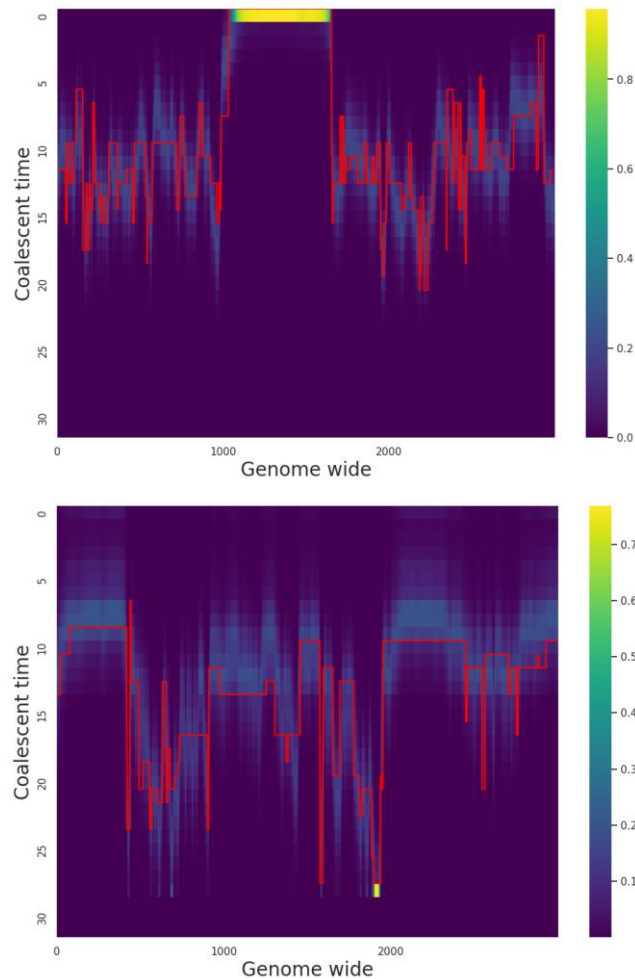


Рисунок 2 - Время до общего предка вдоль хромосомы. Тепловые карты показывают вероятности того, что время до общего предка находится на временном интервале вдоль хромосомы. Левая панель демонстрирует время до общего предка, выведенное из хромосомы, представляющей популяцию постоянного размера, нейронной сетью, обученной на наборе данных постоянного размера. Правая панель представляет время до общего предка вдоль хромосомы из популяции с узким местом, нейронная сеть была обучена на наборе данных со случайными демографическими данными. Красная линия представляет истинное базовое время до общего предка (известное из моделирования).

В то время как в первом случае это неудивительно (демографический сценарий фиксирован, и из него случайным образом извлекаются только хромосомы), во втором случае это менее объяснимо (где демографические сценарии выбираются случайным образом). Эти примеры показывают, что прогноз может быть чувствительным к набору обучающих данных, и необходимы дальнейшие исследования, чтобы понять, как создать оптимальный набор обучающих данных. На самом деле, существует три потенциальных источника сигнала для нейронной сети. Первый — это плот-

ность гетерозигот в геномной области: чем больше время LCA, тем больше гетерозигот присутствует в области. Во-вторых, более длинные области соответствуют более коротким временам LCA. Третий источник информации – это закономерности переходов между различными временами LCA. В терминах Скрытой Марковской модели первая точка определяется матрицей излучения, в то время как вторая и третья определяются матрицей перехода. Более того, они содержат информацию о дополнительной структуре населения, которая станет предметом нашей будущей работы.

Исследование выполнено в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.

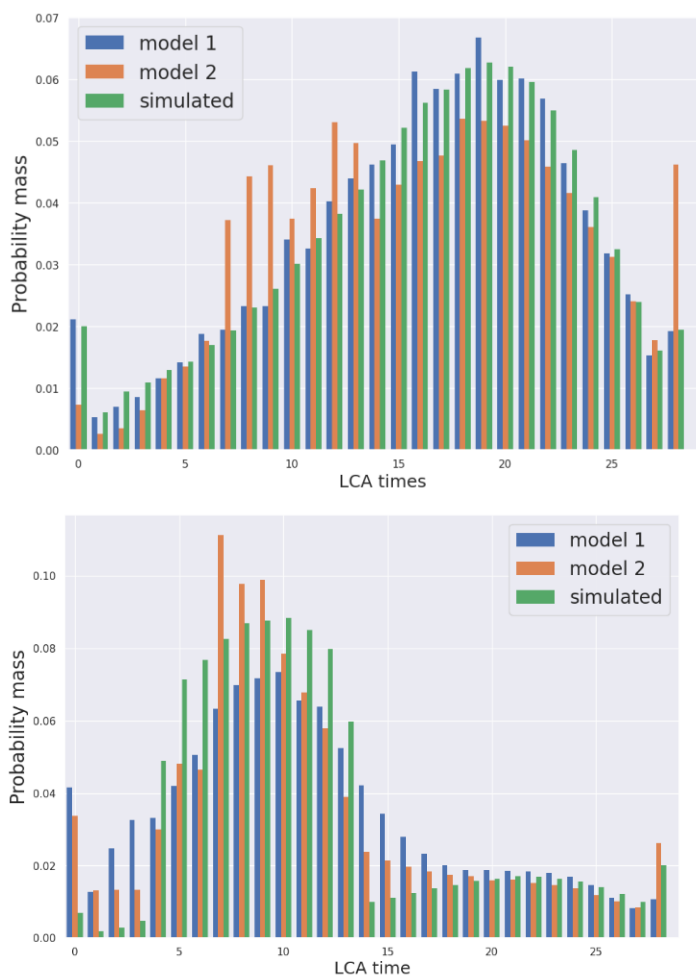


Рисунок 3 – Кумулятивные распределения времен LCA, рассчитанные на основе смоделированного генома (“смоделированный”), оцененные моделью, обученной на наборе данных 1 (“модель 1”), и моделью, обученной на наборе данных 2 (“модель 2”)

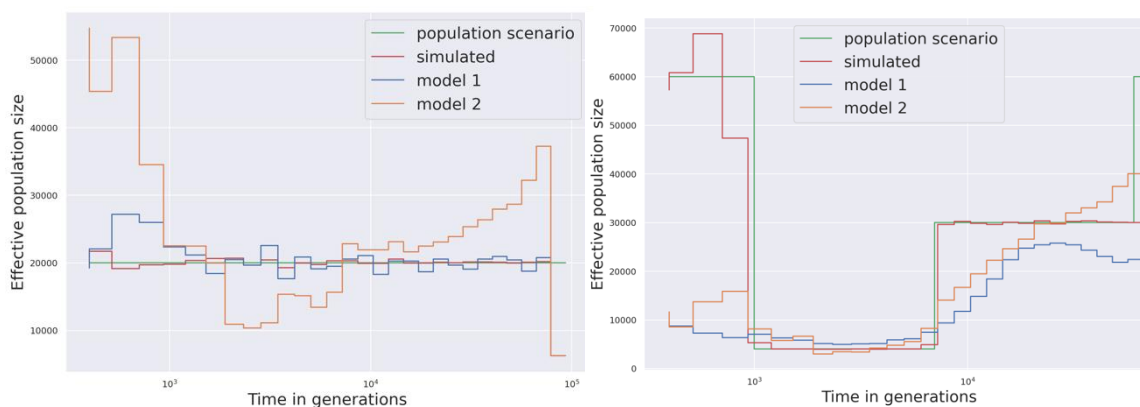


Рисунок 4 – Эффективная численность популяции, оцененная как обратная скорости слияния, рассчитанной на основе смоделированного генома (“смоделированный”), оцененная моделью, обученной на наборе данных 1 (“модель 1”), и моделью, обученной на наборе данных 2 (“модель 2”). Также показана эффективная численность населения в моделируемом демографическом сценарии (“демографический сценарий”).

### Библиографические ссылки

1. Li H. and Durbin R. "Inference of human population history from individual whole-genome sequences," *Nature* **475**, 2011. P. 493–496.
2. G. A. T. McVean and N. J. Cardin, "Approximating the coalescent with recombination," *Philos. Trans. R. Soc. Lond. B. Biol. Sci.*, 2005. P. 1387–1393.
3. P. Marjoram and J. D. Wall, "Fast "coalescent" simulation," *BMC Genetics*. 2006.
4. R. R. Hudson, "Gene genealogies and the coalescent process," *Oxford surveys in evolutionary* , 1990. P. 1–44.
5. S. Sheehan, K. Harris, and Y. S. Song, "Estimating Variable Effective Population Sizes from Multiple Genomes: A Sequentially Markov Conditional Sampling Distribution Approach," *Genetics* , 2013. P. 647–662.
6. S. Schiffels and R. Durbin, "Inferring human population size and separation history from multiple genome sequences," *Nature Genetics* **46**, 2014. P. 919–925.
7. J. Terhorst, J. A. Kamm, and Y. S. Song, "Robust and scalable inference of population history from hundreds of unphased whole genomes. *Nature Genetics*," *Nature Genetics* **49**, 2017. P. 303–309.
8. P. F. Palamara, J. Terhorst, Y. S. Song, and A. L. Price, "High-throughput inference of pairwise coalescence times identifies signals of selection and enriched disease heritability," *Nature Genetics* **50**, 2018. P. 1311–1317.
9. K. Wang, I. Mathieson, J. O’Connell, and S. Schiffels, "Tracking human population structure through time from whole genome sequences," *PLOS Genetics* **16**, 2020. P. 1–24.
10. G. Eraslan, Z. Avsec, J. Gagneur, and F. J. Theis, "Deep learning: new computational modelling techniques for genomics," *Nat. Rev. Genet.* **20**, 2019. P. 389–403.
11. M. Mondal, J. Bertranpetit, and O. Lao, "Approximate bayesian computation with deep learning supports a third archaic introgression in asia and oceania," *Nature Communications* **10** 2019.
12. S. Tavar'e, D. J. Balding, R. C. Griffiths, and P. Donnelly, "Coalescence Times From DNA Sequence Data," *Genetics* **145**, 1997. P. 505–518.

13. S. Sheehan and Y. S. Song, "Deep learning for population genetic inference," *PLOS Computational Biology* **12**, 2016. P. 1–28.
14. J. Chan, V. Perrone, J. P. Spence, P. A. Jenkins, S. Mathieson, and Y. S. Song, "A likelihood-free inference framework for population genetic data using exchangeable neural networks," *Advances in neural information processing systems* **31**, 2018. P. 8594–8605.
15. T. Sanchez, J. Cury, G. Charpiat, and F. Jay, "Deep learning for population size history inference: Design, comparison and combination with approximate bayesian computation," *Molecular Ecology Resources* **21**, 2021. P. 2645–2660.
16. Franz Baumdicker, Gertjan Bisschop, Daniel Goldstein, Graham Gower, Aaron P Ragsdale, Georgia Tsambos, Sha Zhu, Bjarki Eldon, E Castedo Ellerman, Jared G Galloway, Ariella L Gladstein, Gregor Gorjanc, Bing Guo, Ben Jeffery, Warren W Kretzschumar, Konrad Lohse, Michael Matschiner, Dominic Nelson, Nathaniel S Pope, Consuelo D Quinto-Cortés, Murillo F Rodrigues, Kumar Saunack, Thibaut Sellinger, Kevin Thornton, Hugo van Kemenade, Anthony W Wohns, Yan Wong, Simon Gravel, Andrew D Kern, Jere Koskela, Peter L Ralph and Jerome Kelleher (2022), Efficient ancestry and mutation simulation with *[16] 1.0*, *Genetics*, Vol. 220, Issue 3. doi.org/10.1371/journal.pcbi.1004842.
17. K. Cho B. van Merriënboer, D. Bahdanau, and Y. Bengio, "On the properties of neural machine translation: Encoder-decoder approaches," arXiv. 2014. 1409.1259.



## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОПТИМАЛЬНОЙ СЕГМЕНТАЦИИ ИЗОБРАЖЕНИЯ ТОЛПЫ МЕТОДОМ ВОДОРАЗДЕЛОВ

**С.В. Шолтанюк**

*Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск,  
Беларусь, [ssholtanyuk@bsu.by](mailto:ssholtanyuk@bsu.by)*

Описана методика сегментации изображения толпы методом водоразделов с использованием показателя минимальной видимости сегментов, что позволяет решать задачу избыточной сегментации. Показано, что результаты сегментации не зависят от числа людей в толпе или разрешения изображения.

**Ключевые слова:** сегментация изображения; сегментация водоразделами; изображения толпы.

## FINDING THE OPTIMAL SEGMENTATION OF A CROWD IMAGE WITH WATERSHED METHOD

**S.V. Sholtanyuk**

*Belarusian State University, 4 Niezalieznasci Avenue, Minsk 220030, Belarus,  
[ssholtanyuk@bsu.by](mailto:ssholtanyuk@bsu.by)*

In this paper, we described a method for segmentation of a crowd image with watershed method which uses minimal saliency of segments. This approach addresses the oversegmentation problem. We showed segmentation results to depend neither on number of people in a crowd nor on an image resolution.

**Keywords:** image segmentation; watershed segmentation; crowd images.

### **Введение и постановка задачи**

Определение числовых характеристик толпы как в реальном времени, так и на готовых снимках и видеопоследовательностях является задачей, представляющей на сегодняшний день обширный научный интерес. Наиболее распространённым и действенным подходом оказалось использование глубоких нейронных сетей [1, 2]. Однако такие нейронные сети зачастую обладают достаточно сложной архитектурой, поэтому требуется большое количество временных и вычислительных ресурсов для их обучения. Альтернативными подходами, лишёнными этого недостатка, являются использование легковесных нейронных сетей [3], а также использование подходов, основанных на моделировании текстур скоплений людей [4].

Многие текстурные методы подсчёта количества людей в толпе, изображённой на снимке, опираются на сегментацию изображения [5–7]. В данной статье рассматривается сегментация при помощи водоразделов, который является быстрым и достаточно простым в реализации методом, нашедшим широкое применение во многих приложениях обработки изображений [8–9].

## 1. Методология

Сегментация изображения  $I$  методом водоразделов заключается в следующем. Каждому пикселю ставится в соответствие значение его яркости, тем самым задаётся функция  $B: \mathbb{N}^2 \rightarrow [0,1]$ . Затем происходит инициализация сегментов изображения, задаваемая либо явным перечислением исходных пикселей или областей (маркерный алгоритм), либо множеством локальных минимумов функции  $B$ , которые находятся исходя из градиентов (градиентный алгоритм). Сегменты расширяются в направлениях увеличения градиента до тех пор, пока не происходит соприкосновение с другими сегментами. Построение сегментов по такому алгоритму можно схематично описать через наводнение на поверхности, каждая точка которой имеет высоту  $B(i, j)$ , где  $(i, j)$  – её координаты, при источниках в заданных областях, причём по мере наполнения низменностей и впадин будет происходить слияние бассейнов, которые подлежат разделению водоразделами (Рисунок 1).

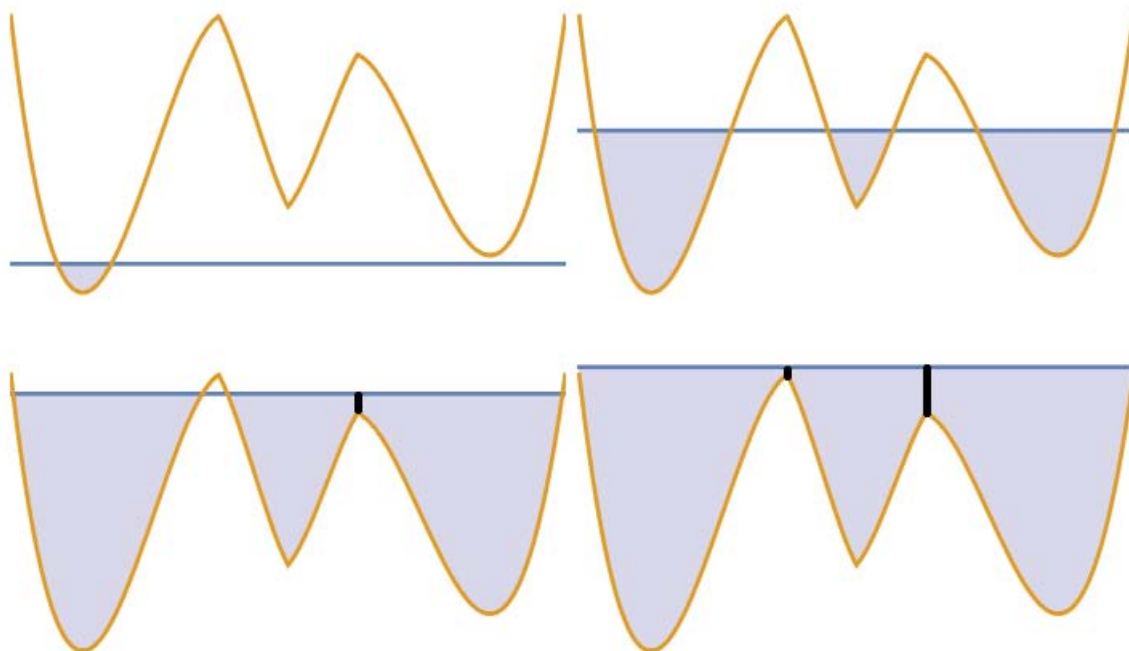


Рисунок 1 – Построение водоразделов по мере наводнения поверхности

В данной статье исследуется градиентный алгоритм сегментации изображения водоразделами. В общем случае он даёт избыточное количество сегментов (Рисунок 2, а). Поэтому следует ввести в рассмотрение понятие видимости сегмента  $S_i$  – величину, равную отношению «глубины бассейна», соответствующего данному сегменту, к «глубине» всего изображения:

$$\mu_i = \frac{\max_{(i,j) \in S_i} B(i,j) - \min_{(i,j) \in S_i} B(i,j)}{\max_{(i,j) \in I} B(i,j) - \min_{(i,j) \in I} B(i,j)}.$$

Нетрудно видеть, что  $\mu_i \in [0,1]$ . Тогда при «заполнении водой» водораздел между двумя сегментами ставится тогда и только тогда, когда у них обоих видимость не меньше некоторой величины  $\mu$ , а иначе они сливаются в единый сегмент. Таким образом, при увеличении  $\mu$  число сегментов уменьшается (Рисунок 2).

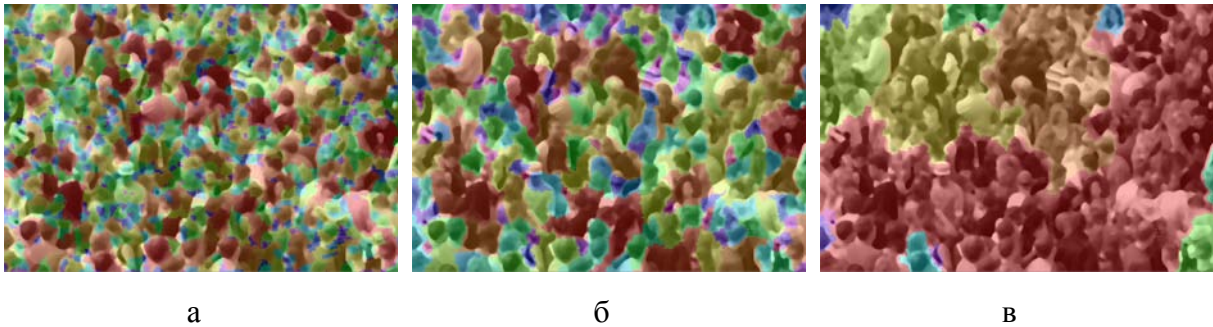


Рисунок 2 – Сегментация изображения при использовании минимальной видимости, равной 0 (а), 0.27 (б), 0.7 (в)

Минимальная видимость  $\mu$  для изображения подбирается таким образом, чтобы все сегменты имели площадь в пикселях, не бóльшую некоторого значения  $s_{\max}$ . Для вычисления  $s_{\max}$  выбирается уровень значимости  $\alpha$ , с которым проверяется гипотеза о том, что в некотором сегменте находится ровно одна метка. Если предположить, что расположение той или иной метки равновероятно во всяком пикселе исходного изображения, то вероятность того, что в сегмент  $S_i$  попало ровно  $k$  меток, равна

$$p_{\lambda_i}(k) = \frac{e^{-\lambda_i} \lambda_i^k}{k!}, \text{ где } \lambda_i \text{ – математическое ожидание количества меток, попавших в сегмент } S_i, \text{ которое пропорционально его площади и равно}$$

$$\lambda_i = \frac{s_i N}{S},$$

где  $s_i$  – площадь сегмента  $S_i$ ,  $N$  – число людей на изображении,  $S$  – разрешение изображения. В частности, при  $k = 1$  получается вероятность, равная  $p_{\lambda_i}(1) = e^{-\lambda_i} \lambda_i$ . Если рассматривать  $\lambda_i$  как случайную величину с функцией распределения  $F(\lambda) = p_{\lambda}(1)$ , то гипотеза о попадании в сегмент ровно одной метки отклоняется на уровне значимости  $\alpha$ , если  $\lambda$  попадает в двустороннюю критическую область  $[0, \lambda_{\min}(\alpha)) \cup (\lambda_{\max}(\alpha), +\infty)$ , где значения  $\lambda_{\min}(\alpha)$  и  $\lambda_{\max}(\alpha)$  можно найти как положительные решения следующих уравнений относительно  $x$ :

$$\int_x^1 e^{-\lambda} \lambda d\lambda = (1 - \alpha) \int_0^1 e^{-\lambda} \lambda d\lambda, \tag{1}$$

$$\int_1^x e^{-\lambda} \lambda d\lambda = (1 - \alpha) \int_1^{+\infty} e^{-\lambda} \lambda d\lambda.$$

Границы  $(1 - \alpha)$ -доверительных интервалов, определяемых из уравнений (1), приведены в таблице 1.

Таблица 1 – Минимальные и максимальные критические значения математического ожидания числа меток, попавших в сегмент

| Уровень значимости $\alpha$ | Минимальное критическое значение $\lambda_{\min}(\alpha)$ | Максимальное критическое значение $\lambda_{\max}(\alpha)$ |
|-----------------------------|---|--|
| 5%                          | 0.172   | 5.113  |
| 1%                          | 0.075   | 6.990  |
| 0.5%                        | 0.052   | 7.777  |
| 0.1%                        | 0.023   | 9.573  |

Таким образом, максимальная площадь сегмента вычисляется по следующей формуле:

$$s_{\max}(\alpha) = \frac{\lambda_{\max}(\alpha)S}{N}. \tag{2}$$

Значение минимальной видимости  $\mu$  для изображения  $I$  при заданном уровне значимости  $\alpha$  определяется по следующему алгоритму:

1. Инициализируется отрезок  $[\mu_{\min}, \mu_{\max}]$ , которому может принадлежать  $\mu$ :  $\mu_{\min} := 0$ ,  $\mu_{\max} := 1$ . Задаётся также точность  $\varepsilon$  определения искомой видимости.
2. Проводится сегментация изображения  $I$  водоразделами при наименьшей видимости  $\mu_{\text{med}} = \frac{\mu_{\min} + \mu_{\max}}{2}$ . Если максимальная пло-

щадь сегмента оказалась больше порога, вычисляемого по формуле (2), то переопределяется правый конец отрезка:  $\mu_{\max} := \mu_{\text{med}}$ , в противном случае – левый:  $\mu_{\min} := \mu_{\text{med}}$ .

3. Алгоритм завершает свою работу либо когда величина отрезка  $[\mu_{\min}, \mu_{\max}]$  стала не больше  $\varepsilon$ , либо когда  $\mu_{\text{med}}$  оказывается меньше некоторого изначально заданного порога  $\mu_0$ . Последнее условие вводится во избежание избыточной сегментации.

## 2. Вычислительный эксперимент и его результаты

Для эксперимента использовались изображения скоплений людей из набора данных ShanghaiTech [10], который для каждого изображения содержит также метки с их расположением. Перед сегментацией изображений водоразделами проводилась предобработка: каждый снимок переводился в чёрно-белый формат, после чего к нему применялась медианная фильтрация. Также сегментации подвергались негативные изображения (Рисунок 3). Таким образом, каждому исходному снимку соответствуют два чёрно-белых изображения, непосредственно подлежащих сегментации.



Рисунок 3 – Пример первоначального снимка (а) и два изображения, полученных после предобработки (б, в)

После предобработки для каждого полученного чёрно-белого изображения при уровнях значимости из таблицы 1 определялась минимальная видимость по описанному выше алгоритму при  $\varepsilon = 0.005$ ,  $\mu_0 = 0.25$ , причём если алгоритм заканчивался по условию  $\mu_{\text{med}} < \mu_0$ , то изображению при заданном уровне значимости пропускалось. Для каждого из исходных изображений в итоге выбиралась сегментация, соответствующая максимальному из двух полученных значений минимальной видимости.

Из полученной сегментации исключались сегменты площадью меньше

$$s_{\min}(\alpha) = \frac{\lambda_{\min}(\alpha)S}{N}.$$

Доля пропущенных пар «изображение – уровень значимости» оказалась равна 69.6%, доля оставшихся пар, где большее значение минимальной видимости получилось при сегментации негативного чёрно-белого изображения, равна 80.8%. Остальные результаты приведены в таблице 2.

Таблица 2 – Результаты эксперимента

|                                 |              |       |
|---------------------------------|--------------|-------|
| Число людей на изображениях     | Минимальное  | 33    |
|                                 | Медианное    | 259   |
|                                 | Максимальное | 2348  |
| Минимальная видимость сегментов | Минимальное  | 0.26  |
|                                 | Медианное    | 0.43  |
|                                 | Максимальное | 0.75  |
| Число кластеров                 | Минимальное  | 18    |
|                                 | Медианное    | 246   |
|                                 | Максимальное | 1551  |
| Среднее число меток в кластере  | Минимальное  | 0.392 |
|                                 | Медианное    | 1.131 |
|                                 | Максимальное | 2.962 |
| Средняя доля исключённых меток  |              | 1.6%  |

Эти результаты не показали зависимости ни от числа людей на изображении, ни от его разрешения.

### Заключение

Сегментация водоразделами снимков с изображением толпы в некоторых случаях может быть улучшена при помощи задания минимальной видимости сегмента, которая может быть оценена при помощи описанной в данной статье методики. При этом, с одной стороны, получается число сегментов, достаточное для дальнейшего локального анализа изображения, а с другой – такая сегментация позволяет исключить сегменты малой площади без значительного сокращения общего числа людей на снимке. Однако во многих случаях имеет место избыточная сегментация в силу того, что остаются кластеры больших размеров. Также показано, что в большинстве случаев результаты сегментации можно улучшить, используя негативное изображение.

## Библиографические ссылки

1. Li Y., Zhang X., Chen D. CSRNet: Dilated Convolutional Neural Networks for Understanding the Highly Congested Scenes // *IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*. 2018. P. 1091–1100.
2. hi-Qi Cheng, Qi Dai, Hong Li, Jingkuan Song, Xiao Wu, Alexander G. Hauptmann. Rethinking Spatial Invariance of Convolutional Networks for Object Counting // *Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*. 2022. P. 19638–19648.
3. Sholtanyuk S., Leunikau A. Lightweight deep neural networks for dense crowd counting estimation // *Pattern Recognition and Information Processing: proceedings of the 15th international conference*. 2021. P. 61–64.
4. Шолтанюк С.В. Текстурные методы подсчёта количества людей в плотной толпе // *Веб-программирование и интернет-технологии WebConf2021 : материалы 5-й Междунар. науч.-практ. конференции*. 2021. С. 173–176.
5. Wang Q., Breckon T.P. Crowd Counting via Segmentation Guided Attention Networks and Curriculum Loss // *IEEE Transactions on Intelligent Transportation Systems*. 2022. P. 1–11.
6. Rahmun M., Deb T., Bijoy S.A., Raha M.H. UAV-CROWD: Violent and non-violent crowd activity simulator from the perspective of UAV. arXiv:2208.06702.
7. Bruno M., Ferjani Z., Sabeur B., Arbab-Zavar D., Cetinkaya L., Johnstone M., Sallal D., Benaouda. High-Level Feature Extraction for Crowd Behaviour Analysis: A Computer Vision Approach // *International Conference on Image Analysis and Processing: revised selected papers of 21st international conference, part II*. 2022. P. 59–70.
8. Vincent L., Soille P. Watersheds in digital spaces: an efficient algorithm based on immersion simulations // *IEEE Transactions On Pattern Analysis And Machine Intelligence*. 1991. № 13(6). P. 583–598.
9. Jackway P. Gradient Watersheds in Morphological Scale-Space // *IEEE Transactions on Image Processing*. 1996. № 5(6). P. 913–921. DOI: 10.1109/83.503908.
10. Zhang Y., Zhou D., Chen S., Gao S., Ma Y. Single-Image Crowd Counting via Multi-Column Convolutional Neural Network // *IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*. 2016. P. 589–597.

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ  
ИНФОРМАТИКА  
И ПРОГРАММНАЯ  
ИНЖЕНЕРИЯ



## DISC SCHEDULER ALGORITHMS PERFORMANCE ANALYSIS USING OBJECT-ORIENTED PROGRAMMING

**M.J. Tufegdžić**

*Academy of professional studies Šumadija, R. Krstića 19, 37240 Trstenik, Serbia*

Corresponding author: mtufegdžic@asss.edu.rs

Disc scheduling, as one of the basic tasks of an operating system, requires applying various conventional techniques and policies, such as First Come First Serve (FCFS), Shortest Seek Time First (SSTF), SCAN, Circular SCAN (C-SCAN), LOOK, and Circular LOOK (C-LOOK). These algorithms will be presented and evaluated in terms of seek time calculated with results obtained for Total Head Movements (THMs) for all algorithms. Input data are randomly generated in the form of sequence of requests in executable files, obtained from scripts written in Python programming language. In order to facilitate running the executable files with a simple button click, a proper Graphical User Interface (GUI) in Python is also developed. The results of the study are compared for all proposed algorithms with the aim to estimate the algorithms' performances.

**Keywords:** FCFS; SSTF; SCAN; C-SCAN; LOOK; C-LOOK; seek time.

### **Introduction**

Managing computer resources such as Central Processing Unit (CPU), memory space, storage space, and Input/Output (I/O) devices is one of the main responsibilities of an operating system. Due to the fact that the most modern computers use Hard Disk Drives (HDDs) and NonVolatile Memory (NVM) devices as an extension of main memory, the efficient and proper management of these devices is very important [1 p30].

HDDs have multiple spinning platters with the magnetic medium, which allows recording data on them. Platters are divided into concentric circles called tracks, further separated into sectors. The set of tracks at one arm position represents a cylinder. The read/write heads, located above the platters, provide reading and writing functions by accessing the proper sectors across the platters. These heads are attached to a disc arm [2 p12, 3 p053].

The time that is necessary to access data stored in HDDs affects computer system performances to a large degree. If this access time is too large, the performances greatly decrease [3 p053]. This is the reason why reducing the number of read/write head movements provides shorter access time and increases efficiency of disk drivers [4 p1]. In order to do this various disk scheduling techniques and policies are applied. The policies are categorized in two groups. The first group uses track's information while the other uses

additional information about requests' deadline or their priority [2 p13]. The policies from the first group use conventional disk scheduling algorithms to allocate the services to the requests, such as FCFS, SSTF, SCAN, C-SCAN, LOOK, and C-LOOK [2 p12].

Some studies include comparisons of basic disc scheduling algorithms according to the average head movement, with implementation of algorithms in Turbo C [5 p24], or in disc scheduling algorithm simulator developed in C# [6 p3]. Simulator in JAVA programming language with six basic modules for conventional disk scheduling algorithms has been developed [7 p111].

In order to evaluate various disc scheduling algorithms a set of criteria had to be established. Seek time, rotational latency, disk bandwidth, transfer time [3 p053, 5 p17] are some examples of these criteria. Some studies include access time as the combination of seek time, latency time and transfer time [3 p053, 5 p17].

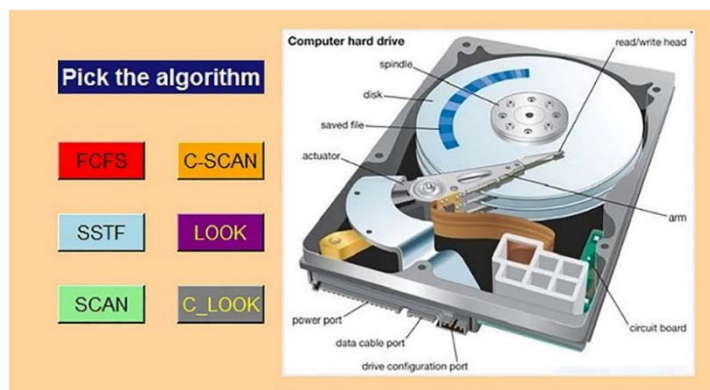
For the purpose of this study, seek time as a main parameter of disc scheduling algorithm is used. It represents the time required to move the head from current position to the right desired track [2 p12, 3 p053, 5 p17] and directly depends from the values of THMs [3 p054]. Values for THMs are taken from the executable files, which are running from proper GUI developed in Python programming language. These executable files are converted from scripts, also written in Python programming language for each algorithm. Proper plots are printed and the results are compared.

## **1. Methodology**

The simplest algorithm from the group of conventional disk scheduling algorithms is FCFS algorithm. I/O requests are processed or served according to their order of arrival [2 p13, 3 p054, 4 p3, 5 p17, 6 p2]. Although it is simple to implement and the overhead is the smallest, it does not provide the fastest service [2 p13]. In SSTF algorithm, the selection of the next request is based on the criteria of the shortest distance from current head position, enabling minimum seek time [2 p14, 3 p054, 4 p4, 5 p18, 6 p2]. The performance is better than in the case of FCFS, but may cause starvation problems for some requests [2 p14, 3 p054]. SCAN algorithm acts as an "elevator" that alternately moves the heads from the beginning to the end of the disk and back again, serving the demands across the entire range of cylinders [2 p14, 3 p055, 4 p4, 5 p19, 6 p2]. This algorithm gives better performance than FCFS and SSTF, with less starvation than SSTF [2 p14]. C-SCAN algorithm, as a variant of SCAN algorithm, serve the requests only in one direction. When the head reaches the last cylinder, it moves to the beginning, without serving the requests along the way. After that, the service continues from the first to the last cylinder [2 p14, 3

p057, 4 p5, 5 p 21, 6 p3]. It provides more uniform waiting time than CSAN algorithm [3 p057]. LOOK and C-LOOK represents modifications of SCAN and C-SCAN algorithms. The heads move only to the last queued request in each direction. LOOK serves requests in both directions, while C-LOOK serves requests in ascending direction until it serves the last request in the queue. After that, it returns to the request that is closest to the beginning of the disk [2 p14, 3 p056-057, 5 p20-22, 6 p3]. LOOK algorithm eliminates unnecessary seek operations avoiding the problem of starvation [5 p20], while C-LOOK provides higher throughput, decreasing the variance of response time [2 p14].

Taking into account different ways to schedule disc requests, scripts for presented algorithms are written in Python programming language, according to their description presented above. These scripts are converted to executable files using PyInstaller. GUI with labels in Python programming language is designed (Picture 1) with the aid of tkinter module and its' methods.



Picture 1 – GUI for algorithms' selection

Simple click on the button named as appropriate algorithm (see Picture 1) allows for input data entry: number of discs, initial header position and sequence. The tested data are as it follows: number of discs 200, initial head position 50, and the sequence, randomly generated, is 82, 170, 43, 140, 24, 16, and 190, for each of the presented algorithms. THMs values are obtained as the results of programs' execution. The proper plots that graphically display the disk head movements are generated with the aid of sub-module pyplot from module matplotlib.

The values of seek time for six basic algorithms (FCFS, SSTF, SCAN, C-SCAN, LOOK, and C-LOOK) are calculated according to expression (1) given in [3 p054]:

$$\text{Seek Time} = \text{THMs} * \text{Seek rate.} \tag{1}$$

In equation (1) Seek rate is equal to 9 millisecond (ms) for modern hard drives [8].

## 2. Results and discussion

The scripts are written and tested in open source editor Visual Studio Code (Version 1.70.2), as well as the script written for GUI and plots printing. Results of code execution for the input data in case of FCFS algorithm, after clicking on proper button is presented in Picture 2, as an example.

```
Enter initial header position: 50
Enter the sequence: 82 170 43 140 24 16 190
82
170
43
140
24
16
190
Total head movements: 642
Seek sequence: [50, 82, 170, 43, 140, 24, 16, 190]
```

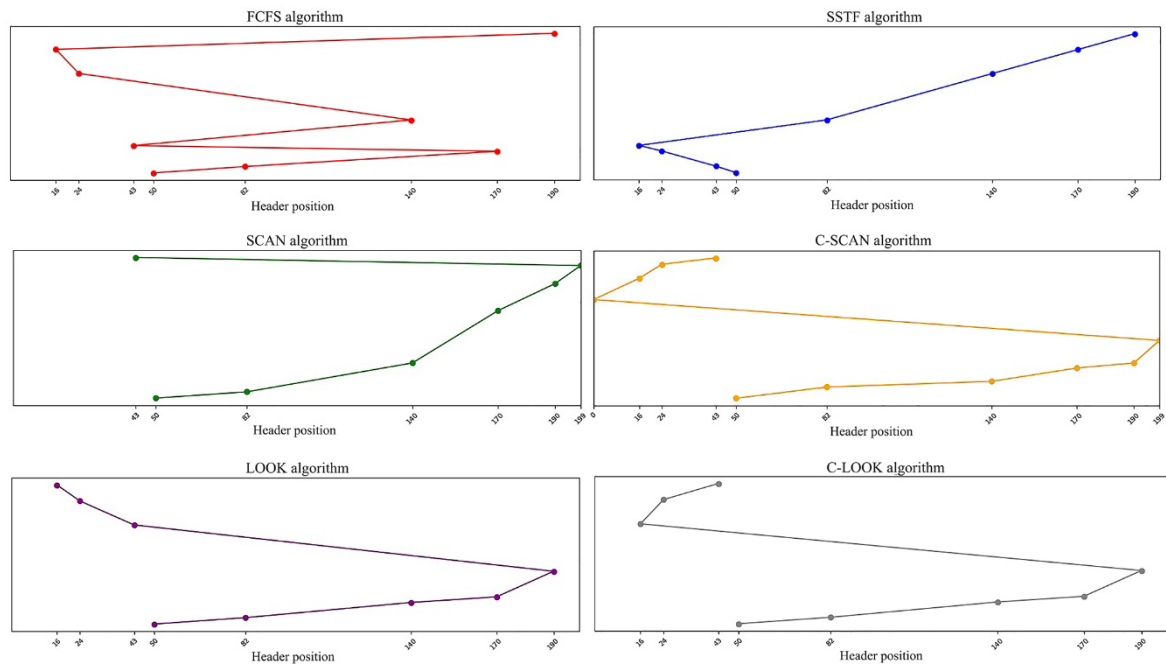
Picture 2 – Results of code execution for the input data for FCFS algorithm

The seek sequence in which requested tracks are serviced using FCFS algorithm is also presented in the form of an ordered array. The results of code executions in the form of THMs as well as the sequences in order of serviced requests are presented on Table 1. The Seek Times are also calculated.

Table 1 – Order of services requests, THMs and Seek Times

| Algorithm | Order of serviced requests                | THMs | Seek Time (ms) |
|-----------|---|------|----------------|
| FCFS      | 50, 82, 170, 43, 140, 24, 16, 19          | 642  | 5778           |
| SSTF      | 50, 43, 24, 16, 82, 140, 170, 19          | 208  | 1872           |
| SCAN      | 50, 82, 140, 170, 190, 199, 43            | 305  | 2745           |
| C-SCAN    | 50, 82, 140, 170, 190, 199, 0, 16, 24, 43 | 391  | 3519           |
| LOOK      | 50, 82, 140, 170, 190, 43, 24, 16         | 314  | 2826           |
| C-LOOK    | 50, 82, 140, 170, 190, 16, 24, 43         | 341  | 3069           |

Plots in the form of graphs, that visualize the head movements are presented in Picture 3.



Picture 3 – Graphical visualization of disc scheduling algorithms

According to the the results of the study, based on seek time as the only easily measured performance, SSTF algorithm shows the best result, followed by SCAN algorithm. The worst performance is in the case of FCFS algorithm.

## Conclusions

Proper management of HDDs implies a reduction in a number of read/write head movements and the time that is necessary to access data stored on them. Different issues of FCFS, SSTF, SCAN, C-SCAN, LOOK, and C-LOOK algorithms, as examples of conventional disc scheduling algorithms, are evaluated and compared in terms of seek time, as one of the main performance parameters. According to the results of the study, SSTF proved to be the algorithm that provides the best performance. The application of proposed methodology is facilitated to a large degree, due to GUI that allows easy and quick testing for different data sets in the form of disc requests. Further analysis should include some other policies for disc scheduling, as well as additional criteria for evaluation, such as access time.

## References

1. Silberschatz A, Gagne G, Galvin PB. Operating System Concepts. N.-Y.: Tenth Edition Wiley, 2018. Chapter 1, Introduction. P. 4-39.

2. Ökdem S, Karaboğa D. Optimal disk scheduling based on ant colony optimization algorithm. Erciyes Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi. 2006. № 22(1-2). P. 11-19, URL: <https://dergipark.org.tr/tr/download/article-file/236632>.
3. Jogamohan M, Partha PG. A comprehensive analysis of disk scheduling algorithms. International Journal of Latest Trends in Engineering and Technology [Internet]. 2018;11(1):053-058, URL: <https://www.ijltet.org/journal/153334449210.%202610.pdf>. DOI: <https://dx.doi.org/10.21172/1.111.10>.
4. Yashvir S, Prakash O. Selection of scheduling Algorithm. International Journal of Latest Trends in Engineering & Technology. 2012. № 1(2). P. 1–9. URL: <https://arxiv.org/ftp/arxiv/papers/1210/1210.6447.pdf>.
5. Shastri S, Sharma A, Mansotra V. A comparative analysis of disk scheduling algorithms. International Journal of Advanced Studies in Computer Science and Engineering. 2016. № 2(IV). P. 16–25. URL: <https://arxiv.org/ftp/arxiv/papers/1210/1210.6447.pdf>.
6. Suranauwarat S. A disk scheduling algorithm simulator. Computers in education journal. 2017. № 8(3). P. 1-9. URL: <https://coed.asee.org/wp-content/uploads/2020/08/8-A-Disk-Scheduling-Algorithm-Simulator.pdf>.
7. Bhade AW, Wankhade SR. File allocation methods performance over disk scheduling algorithms // International Journal of Application or Innovation in Engineering & Management. 2012. № 1(4). P. 109–120. URL: <https://www.ijaiem.org/volume1Issue4/IJAIEM-2012-12-27-034.pdf>.
8. Fisher T. What Does a Hard Drive's Seek Time Mean?. 2022. URL: <https://www.lifewire.com/what-does-seek-time-mean-2626007>.

## ПРОТОТИП АППАРАТНО–ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА УПРАВЛЕНИЯ ПРИЛОЖЕНИЯМИ «УМНОГО ДОМА»

А.А. Андрушевич<sup>1</sup>, А.С. Вардак<sup>2</sup>, И.С. Войтешенко<sup>2</sup>

<sup>1</sup>ООО «Интелиджент семантик системс»,  
ул. Сурганова, 48А, комната 16, Минск, 220013, Беларусь  
E-mail: andrushevich@bsu.by

<sup>2</sup>Белорусский государственный университет,  
пр. Независимости, 4, Минск, 220030, Беларусь

В докладе рассматривается разработанный авторами прототип аппаратно-программного комплекса для применения в сфере интернета вещей. Обоснован выбор аппаратных средств и инструментария разработки: одноплатный компьютер Raspberry Pi; визуальная среда Node-RED, облачная платформа AWS IoT Core. Обоснован выбор сетевого протокола, брокера сообщений, программных библиотек. Сфера применения: «умный дом».

**Ключевые слова:** Raspberry Pi; Node-RED; AWS IoT Core; протокол MQTT; «умный дом»; освещенность жилища; энергопотребление и энергоэффективность жилища.

## PROTOTYPE OF HARDWARE AND SOFTWARE COMPLEX FOR CONTROL OF "SMART HOME" APPLICATIONS

A.A. Andrushevich<sup>a</sup>, A.S. Vardak<sup>b</sup>, I.S. Vojteshenko<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Intelligent Semantic Systems LLC,  
st. Surganova, 48A, office 16, Minsk, 220013, Belarus  
E-mail: andrushevich@bsu.by

<sup>b</sup>Belarusian State University,  
av. Nezavisimosti, 4, Minsk, 220030, Belarus

The paper discusses the prototype of the hardware-software complex developed by the authors for use in the field of the Internet of Things. The choice of hardware and development tools is justified in the paper: single-board computer Raspberry Pi; Node-RED visual flow programming environment, AWS IoT Core cloud platform. The choice of a network protocol, a message broker, software libraries is also justified. Scope of application: "smart home".

**Keywords:** Raspberry Pi; Node-RED; AWS IoT Core; MQTT protocol; smart home; home lighting; power consumption and home energy efficiency.

## Введение

Интернет вещей активно развивается. Исследования и разработки в этой сфере проводятся как организациями-разработчиками и консорциумами разработчиков, так и университетскими учеными и коллективами, включающими студентов, магистрантов и аспирантов. Университетскими научными коллективами Республики Беларусь тоже проводятся такие работы, укажем несколько последних по времени публикаций [1, 2].

Целью настоящей работы является создание прототипа аппаратно-программного комплекса для управления важнейшими приложениями в «умного дома». Прототип должен базироваться на недорогом компьютере и включать следующие приложения:

- приложение для управления освещенностью жилища;
- приложение для управления входом в помещение ("умный замок");
- приложение для управления энергопотреблением и энергоэффективностью жилища.

Предложенное решение должно допускать добавление других приложений.

### 1. Обоснование выбора аппаратных средств и программного инструментария

Состав как аппаратной, так и программной части комплекса определяется решаемыми задачами.

**Состав аппаратной части.** Аппаратная часть аппаратно-программного комплекса включает<sup>1</sup>:

1. Одноплатный компьютер Raspberry Pi без монитора. Его выбор обусловлен, в первую очередь, невысокой стоимостью. Этими же соображениями обосновывают выбор компьютера и авторы схожих по тематике разработок [5,6].

Основные характеристики используемого компьютера:

- 64-битный четырехъядерный процессор ARMv8 Cortex-A72 с тактовой частотой 1.5 ГГц;
- Графический сопроцессор VideoCore VI®;
- Память LPDDR4 SDRAM объемом 4 ГБ;

---

<sup>1</sup> В настоящем докладе аппаратная и программные части аппаратно-программного комплекса рассматривается только применительно к приложениям для управления освещенностью и входом в помещение. Имитационное моделирование с использованием разработанного авторами доклада приложения для управления энергопотреблением и энергоэффективностью жилища рассмотрены в [2].



- Gigabit Ethernet;
- USB 3.0;
- 2 x micro-HDMI;
- 2.4 ГГц и 5 ГГц IEEE 802.11.b/g/n/ac WI-FI + Bluetooth 5.0 Low Energy (BLE).

2. Карта памяти 8 ГБ.

3. Веб камера 4 Мпикс.

4. Замок «Умный дверной замок Volibel Intelligent Lock Tuya X9s» со считывателем RFID-меток

5. Ethernet кабель для подключения замка и компьютера Raspberry Pi к wi-fi.

Часть устройств аппаратной части в настоящей версии прототипа эмулируется программным способом:

1. эмулятор детектора движения, на его основе можно включить/отключить свет;
2. эмулятор “умной” лампы со светорегулятором («диммером»), включение которой зависит от детектора движения;
3. эмулятор датчика освещенности в зависимости от времени суток и яркости умной лампы.

**Программное обеспечение / используемые программные библиотеки.** Основным инструментом разработки является визуальное средство разработки Node-RED, интегрированное с сервисами управляемой облачной платформы AWS IoT Core. Для передачи сообщений внутри системы используется протокол MQTT.

Node-RED<sup>2</sup> — это инструмент потокового программирования для соединения аппаратных устройств, API и онлайн сервисов. В Node-RED приложение представляется как сеть так называемых узлов. Каждый узел имеет определенную цель: на вход поступают некоторые данные, они обрабатываются внутри, после чего передаются дальше по сети.

Для объединения и организации узлов в единую концептуальную единицу в Node-RED используется поток. Поток представляется как отдельная страница в редакторе и предлагает промежуточный уровень контекста между отдельным узлом и всей системой в целом. Не все узлы в рамках потока должны быть связаны между собой, однако слово «поток» также может использоваться для обозначения набора связанных между собой узлов.

Каждый узел в потоке ожидает либо сообщения от предыдущего узла, либо какого-либо внешнего события, не связанного с деятельностью

---

<sup>2</sup> Node-RED [Electronic resource] — Mode of access: <https://nodered.org/> — Date of access: 12.05.2022.

потока. Преимущества использования Node-RED для исследования и проектирования IoT систем:

- Сценарии, которые разрабатываются на Node-Red и правила их реализации не зависят от физической системы, поскольку он предоставляет возможности управления абстрактными устройствами. В то же время абстрактные устройства могут быть связаны с физическими устройствами.
- Визуальное программирование упрощает процесс разработки и создания прототипов.
- Возможности запуска на большом количестве программных платформ «из коробки», так как есть его образ для запуска под Docker.

Поэтому Node-Red уже нашел свое применение при разработке приложений Интернета Вещей, в том числе, относящихся к тематике «умного дома» [4, 5, 8].

Использование приложениями облачных сервисов, к которым относится AWS IoT Core<sup>3</sup>, позволяет значительно уменьшить затраты на инфраструктуру системы, при этом обеспечивая лучшую масштабируемость и отказоустойчивость. Облачные технологии предлагают вычислительные ресурсы, ресурсы для хранения данных и ресурсы коммуникации.

MQTT<sup>4</sup> — сетевой протокол, использующий архитектуру издатель-подписчик и работающий поверх TCP/IP с использованием очередей (Message Queuing Telemetry Transport). Он поддерживается и при невысокой пропускной способности сети. Кроме минимизации количества передаваемой информации и требований к устройствам, данный протокол также старается обеспечить надежность доставки. Эти свойства сделали протокол MQTT подходящим для применения в сфере интернета Интернета Вещей (см., например, [7]).

RabbitMQ<sup>5</sup> – брокер сообщений с открытым исходным кодом. Для передачи данных в низкоскоростных средах с высокой задержкой используется плагин MQTT Plugin RabbitMQ<sup>6</sup>, являющегося реализацией протокола MQTT.

При разработке приложения для управления входом в жилище использовались возможности доступных программных библиотек.

---

<sup>3</sup> AWS IoT Core. — Режим доступа: <https://aws.amazon.com/ru/iot-core>. — Дата доступа: 12.05.2022

<sup>4</sup> MQTT - The Standard for IoT Messaging. — Режим доступа: <https://mqtt.org/>. — Дата доступа: 4.05.2022

<sup>5</sup> RabbitMQ. [Electronic resource] — Mode of access: <https://www.rabbitmq.com/> — Date of access: 12.05.2022

<sup>6</sup> RabbitMQ. MQTT Plugin. [Electronic resource] — Mode of access: <https://www.rabbitmq.com/mqtt.html> / — Date of access: 12.05.2022

## 2. Результаты и их обсуждение

Общая схема разработанного прототипа аппаратно–программного комплекса управления приложениями «умного дома» приведена на рисунке.



Рис. – Схема аппаратно-программного комплекса управления приложениями «умного дома»

**Установка операционной системы и инициализация периферийных устройств.** Установка операционной системы Raspberry Pi OS производится на основе сборки его образа на microSD карту. Операционную систему можно скачать с официального сайта [3]. Однако, к операционной системе нельзя подключиться без монитора. Мы использовали обходной путь посредством автоматической настройки сети на основе использования ssh — сетевого протокола прикладного уровня, позволяющего производить удалённое управление операционной системой и туннелирование TCP-соединений.

Процесс инициализации периферийных устройств работает на основе поэтапной проверки: если устройство не доступно, то процесс прерывается и происходит попытка автоматического исправления. Если попытка оказывается неудачной, то выдается сообщение об ошибке.

**Установка Node-RED под Docker.** При установке стандартного образа без пользовательской конфигурации и настройки, будет установлен весь пакет библиотек и зависимостей, что приведет к большой нагрузке на систему. Поэтому мы собрали свою модифицированную версию, потребляющую меньше ресурсов. Изменения вносились в конфигурационный докер-файл после построения образа. Для этого сначала устанавливали docker и docker-compose. Для нормального функционирования и критических важных зависимостей в образ был установлен python и библиотеки разработки.

### **Разработка приложений**

#### *Приложение для управления освещенностью жилища*

Функциональные требования к приложению: при входе в помещение свет загорается, среагировав на движение, а через 10 секунд после выхода из помещения свет отключается. Яркость освещения должна корректироваться с учетом уровня уличного освещения, проникающего в жилище. Кроме того, освещение с 23-00 до 6-00 утра должно работать в режиме ночника, с пониженной яркостью.

Разработка приложения проведена приблизительно в соответствии со схемой, изложенной в [4] и здесь не излагается подробно.

#### *Приложение для управления входом в помещение ("умный замок").*

Основной частью приложения является созданная в рамках настоящей работы экспериментальная система распознавания лиц. Она использует машинное обучение, разработана и функционирует на основе библиотек dlib, cmake, OpenCV, face-recognition и streamlit. Для управления средой применен кроссплатформенный менеджер пакетов conda.

Текущий вариант приложения следует стандартным процедурам и алгоритмам биометрической аутентификации и не обеспечивает в полной мере защиту от взлома через подмену изображением считываемого с камеры лица пользователя. Для усиления процедуры биометрической аутентификации предполагается применение одного из методов Face Liveness Detection [9, 10], обеспечивающего проверку предъявленного идентификатора (изображения лица) на принадлежность «живому» пользователю.

### **Заключение**

Разработанный прототип базируется на недорогом аппаратном обеспечении и, в основном, для своей разработки использует свободно рас-

пространяемое программное обеспечение, в том числе с открытым исходным кодом.

Прототип прошел первичное тестирование и показал свою начальную работоспособность.

Разработка как отдельных приложений «умного» дома, так и аппаратно-программных комплексов, кроме своей непосредственной ценности, является полигоном для тестирования инструментальных средств разработки, коммуникационных протоколов и подходов к разработке стандартов, применимых в других сферах интернета вещей.

### Библиографические ссылки

1. Vishniakou U.A., Shaya B.H. Modeling the internet of things network for monitoring audio information on the Amazon platform = Моделирование сети интернета вещей для мониторинга звуковой информации на платформе компании Амазон // Системный анализ и прикладная информатика. 2021. № 2. С. 28–33.
2. Андрушевич А.А., Войтешенко И.С., Емельянова О.Ю. О среде имитационного моделирования компонентов и приложений в Интернете вещей на основе инструментов визуального потокового программирования и облачных сервисов // Информатика. 2022. № 19(2). С. 100-116. doi.org/10.37661/1816-0301-2022-19-2-100-116.
3. Raspberry Pi OS. URL: [https://www.raspberrypi.com /software/](https://www.raspberrypi.com/software/). (дата обращения: 4.05.2022.)
4. Програмируем управление освещением по датчикам движения и освещения на Node-RED/ [Electronic resource]. URL: <https://habr.com/ru/post/396985/> (date of access: 12.05.2022.)
5. Zare, Atefeh & Iqbal, Tariq. Low-Cost ESP32, Raspberry Pi, Node-Red, and MQTT Protocol Based SCADA System. 2020. № 1–5. DOI: 10.1109/IEMTRONICS51293.2020.9216412
6. LOW COST WIRELESS HOME SECURITY SYSTEM USING RASPBERRY PI/Adarsh Sawant, IJPRET, 2015. Vol. 3 (9). P. 814–821.
7. Froiz-Míguez, I.; Fernández-Caramés, T.M.; Fraga-Lamas, P.; Castedo, L. Design, Implementation and Practical Evaluation of an IoT Home Automation System for Fog Computing Applications Based on MQTT and ZigBee-WiFi Sensor Nodes. Sensors 2018. 18, 2660. doi.org/10.3390/s18082660
8. Kodali, Ravi & Anjum, Arshiya. (2018). IoT Based HOME AUTOMATION Using Node-RED. 2018. 386–390. 10.1109/ICGCIoT.2018.8753085
9. Shweta Policepatil, Sanjeevakumar M. Hatture Face Liveness Detection: An Overview // International Journal of Scientific Research in Science and Technology. 2021. URL: <https://ijsrst.com/paper/8266.pdf>.
10. Золотарев В.В., Поважнюк А.О., Маро Е.А. Методы усиления // Известия ЮФУ. Технические науки. 2022. № 2. С. 212–225. DOI 10.18522/2311-3103-2022-2-212-225.

## ПРОЕКТИРОВАНИЕ СИСТЕМ, УПРАВЛЯЕМЫХ СОБЫТИЯМИ

**М.И. Давидовская, Е.С. Мойсейчик**

*Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030,  
г. Минск, Беларусь, [davidouskaia@bsu.by](mailto:davidouskaia@bsu.by)*

Ключевые характеристики ПО определяются ещё на этапе проектирования программной системы. От выбранной архитектуры и качества проектирования зависит дальнейшее поддержание и эксплуатация системы. Несмотря на то, что реализовать функциональные требования к ПО зачастую возможно при помощи любой архитектуры, далеко не каждый проект становится коммерчески успешным. Данная работа ставит своей целью рассмотреть ключевые проблемы основных подходов к проектированию архитектуры ПО и выделить случаи, когда уже на этапе проектирования стоит отдать предпочтение более сложным, но и более масштабируемым решениям, основанным на событиях.

**Ключевые слова:** архитектура ПО; распределенные приложения; проектирование; сервисы; события; асинхронное взаимодействие; брокер сообщений.

## EVENT-DRIVEN SYSTEM DESIGN

**М.И. Давидовская, Е.С. Мойсейчик**

*Belarusian State University, 4 Niezalieznasci Avenue, Minsk 220030, Belarus,  
Corresponding author: [davidouskaia@bsu.by](mailto:davidouskaia@bsu.by)*

The key characteristics of the software are determined at the design stage of the software system. Further maintenance and operation of the system depends on the chosen architecture and design quality. Despite the fact that it is often possible to implement functional requirements for software using any architecture, not every project becomes commercially successful. This work aims to consider the key problems of the simplest software architectures and highlight cases when, already at the design stage, it is worth giving preference to more complex, but also more scalable, event-based solutions.

**Keywords:** software architecture; distributed software; design; services; events; asynchronous communication; message broker.

### Введение

Под архитектурой программного обеспечения (ПО) понимают определение основных структурных элементов программы, их интерфейсов и способа взаимодействия. На сегодняшний день разработан и изучен ряд архитектур распределённых приложений. Каждая из них имеет ряд преимуществ и недостатков и в значительной степени опреде-

ляет, насколько быстро и эффективно будет работать приложение, каковы будут затраты на его размещение, какие функции оно сможет реализовать и насколько просто будет внедрять, тестировать и поддерживать их.

Данная работа ставит своей целью проанализировать две основные архитектуры для серверной части распределённого приложения – монолитной и сервисной, – и выделить основные случаи, когда уместно отдать предпочтение последнему из подходов на этапе проектирования системы.

Монолитным приложением или монолитом развертывания называют программную систему, которая может быть развернута только как единое целое [1]. Приложение такой архитектуры внутри может иметь логическое разбиение, но логические модули в таком случае не выступают в качестве самостоятельного приложения и должны разворачиваться как единый проект.

Простейшей распределённой архитектурой является архитектура «клиент – сервер». Абстрагируясь от количества и структуры клиентов такого приложения, можно утверждать, что с точки зрения архитектуры ПО серверной части в общем случае оно также представляет собой монолит развертывания. Приложение на стороне сервера в такой системе разворачивается и исполняется как один исполняемый файл.

Такой подход имеет как ряд преимуществ, так и ряд очевидных недостатков:

1. Необходимость централизованно вносить изменения во все файлы монолитного приложения, чтобы не нарушить целостность и согласованность. Сложность логики приложения возрастает с ростом кодовой базы. Внесение любого даже незначительного изменения в приложение требует инциации всех этапов конвейера непрерывной доставки. Скорость разработки и доставки новых функций замедляется.
2. Сложное масштабирование системы и падение производительности при выполнении трудоёмких операций. При необходимости увеличить вычислительную мощность узла сервера для одной функции необходимо увеличивать количество вычислительных ресурсов для всего приложения. Вынужденная синхронность операций: в случае, когда операция может выполняться асинхронно, то есть клиент может не ожидать результата, монолитное серверное приложение не может обработать следующий запрос до тех пор, пока не завершится предыдущая операция.
3. Затруднены обновление и поддержка системы. Замена или обновление стека технологий требует модификации всей кодовой базы

приложения. Неисправности не локализованы в приложении и также требуют анализа всего приложения.

Работа ставит перед собой следующие задачи для достижения цели:

- Рассмотреть теоретические основы сервисных архитектур ПО.
- Показать, что сервисные архитектуры могут выступать в качестве систем, управляемых событиями.
- Обосновать, почему сервисные архитектуры решают упомянутые проблемы монолитных приложений.
- Выделить случаи, когда уместно использование средств сервисной архитектуры, на примере практической части.

Методы исследования, применяемые в работе:

- Теоретические: изучение литературы и других открытых источников, посвященных архитектуре ПО, тестированию производительности распределённых приложений, а также платформам, предоставляющим возможность написания серверного ПО для распределённых систем, таких как .NET и Java EE.
- Практические: обобщение и систематизация опыта путем проектирования веб-приложения для задач healthcare-области с применением сервисной архитектуры.

## **1. Методология исследования**

Сервис – это независимое приложение, реализующее узкоспециализированные функции. Сервисная архитектура обобщенно определяется как функциональная декомпозиция приложения на отдельные сервисы. Ключевым аспектом здесь является изолированность сервисов, как единиц модульности приложения, и их независимое развертывание, а не размер сервисов [2].

Для взаимодействия с системой сервис предоставляет удаленное API – интерфейс, инкапсулирующий его реализацию. Вызов какого-либо кода сервиса вне API невозможен. Для достижения слабой связанности модулей системы, кроме сокрытия функций сервиса за API, сервисная архитектура часто предлагает отдельное хранение данных для каждого сервиса или части сервисов. В условиях большого количества модулей архитектура предлагает использование примитивных каналов сообщения между модулями и легковесных протоколов взаимодействия.



Таблица 1– Сравнение архитектурных стилей, основанных на сервисах

| <b>Критерий</b>                | <b>COA</b>   | <b>Микросервисы</b>   |
|--------------------------------|--|---|
| Хранение данных                | Единая модель данных, глобальное хранение                  | Собственная модель данных, отдельное хранение                                       |
| Взаимодействие сервисов        | Сервисная шина, сложные протоколы удаленного вызова (SOAP) | Легковесные протоколы удаленного вызова (REST, gRPC), асинхронный обмен сообщениями |
| Внутренняя организация сервиса | Крупное приложение, монолитная архитектура                 | Небольшое приложение, предметно-ориентированная архитектура                         |

Перечисленные черты позволяют выделить ряд преимуществ такой архитектуры в сравнении с другими подходами:

1. Гибкость и расширяемость системы. Легко добавлять и разворачивать новые сервисы и функции. Поддержка системы упрощена, контекст ошибки ограничен сервисом. Небольшие модули с четкими функциями проще поддерживать командам разработки. Возможно заменять сервисы и использовать различные языки программирования (их версии) как для реализации сервисов, так и для хранения данных, если оно отдельное.
2. Баланс производительности и затрат на размещение. Возможность размещать сервисы на различных вычислительных узлах по необходимости. Возможность масштабироваться в рамках одного сервиса.

Из приведённого определения также очевидно, что при наличии в системе многих исполняемых файлов сервисов, развёрнутых отдельно, становится возможным реализовать асинхронный тип взаимодействия с клиентом. Для этого необходимо делегировать вычислительную работу одному сервису, в то время как остальные компоненты системы смогут по-прежнему обрабатывать синхронные запросы клиента.

Для реализации такой функциональности в сервисной архитектуре используется механизм обмена сообщениями между сервисами напрямую или через брокера, основанный на архитектурном шаблоне «издатель – подписчик». Клиент посылает запрос в виде сообщения и продолжает выполнение. Сервис обрабатывает сообщение клиента в период своей доступности и посылает ответ, если он должен это сделать. Это также делает возможным рассылать сообщение одного клиента множеству серви-

сов. Таким образом сервисная архитектура может выступать в качестве системы, управляемой событиями.

Основным стандартом, регламентирующим работу брокеров сообщений, является Advanced Message Queueing Protocol (AMQP) – открытый протокол для передачи сообщений. Он устанавливает наличие в брокере сообщений следующих компонент:

- Сообщения со структурированными заголовками, как единицы передаваемых данных.
- Очереди сообщений, хранящей сообщение клиента до тех пор, пока сервис не обработает его.
- Точек обмена – механизмов разного типа, распределяющих пришедшие в брокер сообщения по соответствующим очередям.

## 2. Результаты

Таким образом, основными теоретическими результатами работы являются:

1. Сравнительный анализ монолитной и сервисной архитектуры распределённых приложений.
2. Обоснование, почему сервисная архитектура ПО подходит для проектирования систем, управляемых событиями.
3. Обоснование, почему сервисная архитектура решает рассмотренные во введении проблемы монолитных приложений.
4. Определение задач, для которых предпочтительно использовать сервисную архитектуру ПО.

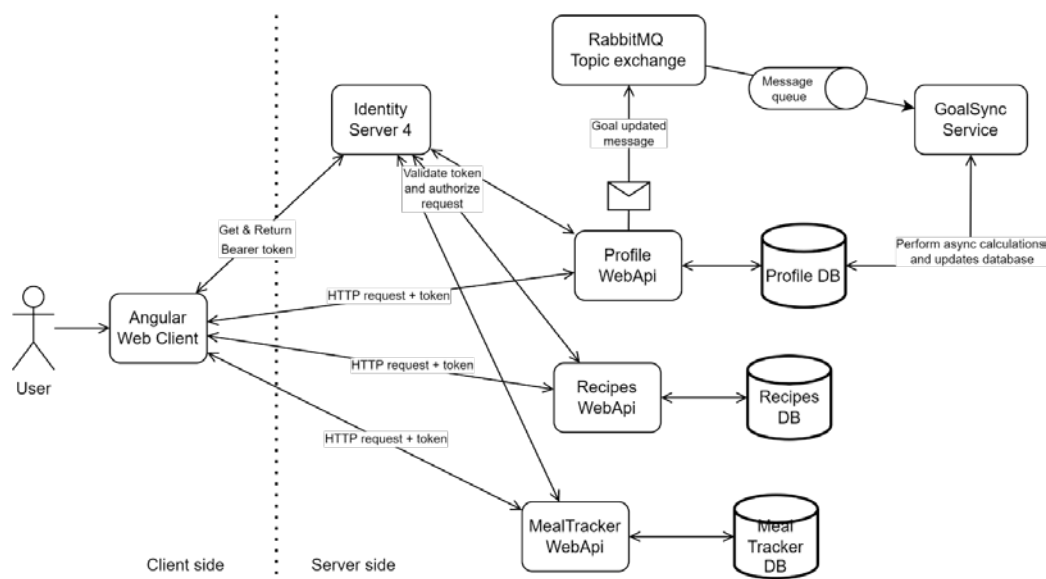


Рисунок – Структурная схема спроектированного приложения

Результатом практической части работы является веб-приложение для решения задач healthcare-задач пользователей, спроектированное в микросервисной архитектуре, реализованное в технологиях стека .NET [3] и готовое для размещения в сети [4]. В качестве брокера сообщений в работе использовался RabbitMQ, реализующий стандарт AMQP [5].

### **Библиографические ссылки**

1. Wolff E. Microservices. Flexible software architectures. London: Pearson Education, 2016. 368 p.
2. Ричардсон К. Микросервисы. Паттерны разработки и рефакторинга. СПб. : Питер, 2019. 544 с.
3. Хордсал К. Микросервисы на платформе. СПб. : Питер, 2018. 352 с.
4. Мойсейчик Е.С., Давидовская М.И. Проектирование модульной архитектуры веб-приложения на примере Healthcare-приложения на основе микросервисов. // Научные исследования XXI века. 2022. № 1(15). С. 71–75.
5. RabbitMQ Features. Documentation [Электронный ресурс]. URL: <https://www.rabbitmq.com/documentation.html>. (дата обращения: 28.08.2022.)

## ОНТОЛОГИЧЕСКИЙ ПОДХОД К РАЗРАБОТКЕ ИНФОРМАЦИОННЫХ СИСТЕМ УПРАВЛЕНИЯ ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РАДИОЧАСТОТНОГО СПЕКТРА

А.А. Карпук<sup>1</sup>, В.В. Краснопрошин<sup>2</sup>, А.В. Говорко<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Учреждение образования «Белорусская государственная академия связи»,  
ул. Ф. Скорины, 8/2, 220076, г. Минск, Беларусь, a\_karpuk@mail.ru

<sup>2</sup> Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030,  
г. Минск, Беларусь, krasnoproshin@bsu.by

Показаны недостатки традиционных подходов к разработке информационных систем управления (ИСУ) использованием радиочастотного спектра (РЧС). Предложен онтологический подход к разработке ИСУ использованием РЧС. Даны формальные определения онтологии предметной области и онтологии задач сетей радиосвязи. Введены понятия канонической и оптимальной канонической формы онтологии предметной области сетей радиосвязи и показаны их преимущества.

**Ключевые слова:** Радиочастотный спектр (РЧС); информационные системы управления (ИСУ); ИСУ использованием РЧС; предметная онтология; онтология предметной области; онтология задач.

## ONTOLOGICAL APPROACH TO THE DEVELOPMENT OF INFORMATION SYSTEMS FOR MANAGING THE USE OF THE RADIO FREQUENCY SPECTRUM

A.A. Karpuk<sup>a</sup>, V.V. Krasnoproshin<sup>b</sup>, A.V. Havorka<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Educational institution «Belarusian state academy of communications»,  
st. F. Skorina, 8/2, 220076, Minsk, Belarus, a\_karpuk@mail.ru

<sup>b</sup> Belarusian State University, Niezalieznasci Avenue, 4, 220030, Minsk, Belarus,  
krasnoproshin@bsu.by

The shortcomings of traditional approaches to the development of information systems for management (ISM) the use of the radio frequency spectrum (RFS) are shown. An ontological approach to the development of ISM for use of RFS is proposed. Formal definitions of the ontology of the subject area and the ontology of tasks of radio communication networks are given. The concepts of canonical and optimal canonical forms of the ontology of the subject area of radio communication networks are introduced and their advantages are shown.

**Keywords:** Radio frequency spectrum (RFS); information systems for management (ISM); ISM for use of RFS; subject ontology; domain ontology; task ontology.

## Введение

Процессы глобализации общества и связанное с ними формирование новой информационно-коммуникационной среды привели к бурному развитию сетей радиосвязи (фиксированной, сухопутной подвижной, спутниковой, радиовещания и телевидения). Сети радиосвязи используют радиочастотный спектр (РЧС), который по своей природе является ограниченным однократно используемым возобновляемым природным пространственно-временным ресурсом. Для управления использованием РЧС в каждой стране применяются информационные системы управления (ИСУ) использованием РЧС.

Все существующие в настоящее время ИСУ использованием РЧС разработаны на основе традиционных методологий разработки автоматизированных информационных систем (АИС): методологии действующего ГОСТ 34.601–90; методологии серии стандартов ISO/IEC (ISO/IEC/IEEE 15288:2015, ISO/IEC/IEEE 12207:2017); методологий серии IDEF (IDEF0, IDEF1, ..., IDEF14). Однако при разработке ИСУ использованием РЧС на основе традиционных методологий разработки АИС невозможно обеспечить выполнение следующих требований к ИСУ использованием РЧС нового класса.

1) Радиолинии и сети радиосвязи, данные о которых должны храниться и использоваться при решении задач ИСУ, отличаются значительным многообразием и находятся в постоянном развитии. В этих условиях состав и структура сущностей и связей между ними в ИСУ использованием РЧС не могут быть жестко фиксированными, а должны изменяться в процессе функционирования ИСУ.

2) Состав задач, решаемых в ИСУ использованием РЧС, должен изменяться. В существующих ИСУ решаются задачи учета заявок на присвоение радиочастот для работы РС, анализа возможности присвоения радиочастот по заявкам; учета всех присвоенных для использования радиочастот и характеристик РС, использующих эти радиочастоты [1]. В ИСУ использованием РЧС нового класса должны также решаться задачи оценки качества радиосвязи на заявленных радиочастотах и оптимизации присвоения радиочастот радиолиниям [2].

3) Математическое и программное обеспечение ИСУ использованием РЧС должны периодически изменяться, поскольку в его основе должны лежать Рекомендации Международного Союза Электросвязи (МСЭ) по математическому и программному моделированию распространения радиоволн, которые регулярно обновляются. При этом после обновления Рекомендаций МСЭ соответствующее программное обеспечение должно

обновиться во всех функционирующих ИСУ использованием РЧС.

Перечисленные требования к ИСУ использованием РЧС можно реализовать при онтологическом подходе к разработке ИСУ [3]. При этом подходе ИСУ использованием РЧС разрабатываются на основе предметной онтологии сетей радиосвязи, в состав которой входят онтологии верхнего уровня, предметной области и задач.

## 1. Теоретические основы

**Формальное определение онтологии предметной области.** Определим онтологию предметной области в виде четверки  $O = \langle K, R, F, I \rangle$  [4], где  $K$  – конечное множество концептов (понятий) предметной области;  $R$  – конечное множество отношений между концептами;  $F$  – конечное множество функций интерпретации, заданных на концептах и отношениях;  $I$  – конечное множество аксиом, каждая из которых представляет собой всегда истинное высказывание на концептах и отношениях. Множество концептов для онтологии предметной области сетей радиосвязи имеет вид  $K = \langle D, A, Q \rangle$  [3], где  $D$  – конечное множество доменов;  $A$  – конечное множество атрибутов;  $Q$  – конечное множество классов предметной области.

Домены используются как множества возможных значений атрибутов. Данные каждого домена имеют один из типов данных, допустимых в языке XML. По количеству элементов данных в значении домены делятся на атомарные (atomic), объединенные (union) и списковые (list). По ограничениям на значение атомарные домены делятся на примитивные (primitive), встроенные (built-in) и производные (constructed). Концепты из множества  $A$  представляют собой свойства (атрибуты) классов предметной области. Каждый атрибут задается своим уникальным именем и доменом, которому принадлежат значения атрибута.

Концепты из множества  $Q$  представляют собой классы (объекты, сущности) предметной области. Каждый атрибут в составе класса может иметь свойства кардинальности (cardinality) и функциональности (functional). Признак функциональности показывает, что в любом индивиде класса может быть не более одного значения атрибута. При построении онтологии предметной области сначала описываются классы, а затем в онтологию записываются знания об индивидах (individuals) каждого класса.

В множество отношений между концептами  $R$  входят отношения между доменами для построения производных доменов, отношения меж-

ду атрибутами и доменами для определения области значений атрибутов, отношения между классами и атрибутами для определения состава атрибутов каждого класса, отношения между классами. Множество функций  $F$  состоит из  $n$ -арных отношений между классами или атрибутами, в которых значение элемента с номером  $n$  однозначно определяется значениями предыдущих  $(n-1)$  элементов. С помощью функций можно описать ключи классов, иерархические связи между классами и атрибутами, любые другие функциональные зависимости между классами и атрибутами, существующие в предметной области. Множество аксиом  $I$  служит для представления в онтологии высказываний о классах, атрибутах, доменах и отношениях, которые всегда истинны.

Онтологии предметной области одновременно разрабатываются и используются многими пользователями. По этой причине в онтологиях предметной области одно и то же свойство понятия может быть представлено различными способами. Такая неоднозначность может привести к затруднениям при решении задач с использованием онтологии предметной области. Для устранения этого недостатка в [5, 6] предложено приводить онтологию предметной области сетей радиосвязи к так называемой канонической форме, которая строится на основе анализа функциональных зависимостей (ФЗ) между понятиями и свойствами понятий онтологии.

**Формальное определение онтологии задач.** Для построения онтологии задач сетей радиосвязи представим множество концептов в виде  $K = \langle T, O, Q, A, D, P \rangle$  [3], где  $T$  – конечное множество задач;  $O$  – конечное множество онтологий предметной области или онтологий верхнего уровня (внешних онтологий), используемых при решении задач;  $Q$  – конечное множество классов из внешних онтологий или онтологии задач, используемых для получения входных данных и хранения выходных данных задач;  $A$  – конечное множество атрибутов из внешних онтологий или онтологии задач, используемых для получения входных данных и хранения выходных данных задач;  $D$  – конечное множество доменов из внешних онтологий или онтологии задач, используемых для представления входных и выходных данных задач;  $P$  – конечное множество программных компонентов, реализующих решение задач.

Задачи из множества  $T$  делятся на атомарные, составные и сложные. К атомарным задачам относятся задачи, решаемые одним программным компонентом без обращения к другим программным компонентам. Решение составной задачи сводится к решению двух или более атомарных задач. В состав сложной задачи входят другие сложные задачи (подзадачи),

составные и атомарные задачи.

**Функциональные зависимости между атрибутами онтологии предметной области.** Пусть  $X \subset A$  – подмножество атрибутов онтологии предметной области,  $Z \in A$  – некоторый атрибут. Будем говорить, что в онтологии предметной области существует ФЗ  $X \rightarrow Z$ , если любой комбинации значений атрибутов из  $X$  всегда соответствует единственное значение атрибута  $Z$ . Очевидно, что из  $Z \in X$  следует, что  $X \rightarrow Z$ . Такая ФЗ, в которой зависимый атрибут входит в состав левой части ФЗ, называется тривиальной. В дальнейшем будем рассматривать только нетривиальные ФЗ между атрибутами.

Выделим в онтологии предметной области все ФЗ между атрибутами и представим их в виде множества ФЗ  $P = \{P_j = X_j \rightarrow Y_j \mid X_j \subset A, Y_j \subseteq A, j = \overline{1, m}\}$ , которое называется системой образующих структуры ФЗ на множестве атрибутов онтологии. Замыканием множества атрибутов  $X \subset A$  относительно структуры ФЗ  $S(P)$  называется множество  $X^+(P) \subseteq A$ , такое, что для любого  $Y \subseteq A$  из  $X \rightarrow Y$  следует  $Y \subseteq X^+(P)$ . Структуры ФЗ  $S(P^1)$  и  $S(P^2)$  на множестве атрибутов  $A$  с системами образующих  $P^1$  и  $P^2$  соответственно называются эквивалентными, если для любого  $X \subset A$  имеет место равенство  $X^+(P^1) = X^+(P^2)$ .

Система образующих  $E = \{H_j \rightarrow T_j \mid H_j \subset A, T_j \subseteq A, j = \overline{1, m}\}$  называется элементарным базисом структуры ФЗ  $S(E)$ , если удаление любого атрибута из левой или правой части любой ФЗ из  $E$  приводит к структуре ФЗ, не эквивалентной  $S(E)$ . Алгоритм построения замыкания множества атрибутов относительно структуры ФЗ, необходимые и достаточные условия эквивалентности структур ФЗ, а также алгоритм построения элементарного базиса структуры ФЗ между атрибутами описаны в [7].

**Каноническая форма онтологии предметной области.** Будем говорить, что онтология предметной области находится в канонической форме, если выполняются следующие условия [5]:

все атрибуты из множества  $A$ , участвующие в определении классов, функций и аксиом онтологии, являются атомарными;

все атрибуты каждого класса имеют признак функциональности и не имеют подчиненных атрибутов;

система образующих структуры ФЗ между атрибутами онтологии является элементарным базисом этой структуры ФЗ.

В [5] предложен алгоритм приведения онтологии предметной области к канонической форме, программная реализация которого описана в



[6]. Используя методы, предложенные в работах [8, 9], каноническую форму онтологии предметной области можно привести к оптимальной канонической форме, содержащей минимальное количество классов с минимальным суммарным количеством атрибутов в классах.

## 2. Результаты и их обсуждение

Приведение онтологии предметной области сетей радиосвязи к канонической форме удаляет многозначные и избыточные атрибуты в классах онтологии. Приведение онтологии предметной области к оптимальной канонической форме минимизирует количество классов и атрибутов в онтологии. В результате обеспечивается однозначное представление онтологии предметной области сетей радиосвязи, фрагменты которой разрабатываются разными пользователями, и суммарный объем данных онтологии уменьшается на 10 – 12%.

На основе полученных теоретических результатов разработаны текущие версии онтологии предметной области и онтологии задач сетей радиосвязи. В состав классов онтологии предметной области вошли базовые классы, соответствующие сущностям предметной области (типы и индивиды передатчиков, приемников, радиосредств и антенн, индивиды объектов связи, радиолинии и радиосети и др.), и производные классы, индивиды которых вычисляются на основе данных базовых классов и используются при решении задач. В состав задач онтологии задач вошли атомарные, составные и сложные задачи учета топографических и метеорологических факторов, оценки качества радиосвязи и оптимизации присвоения радиочастот радиолиниям.

### Библиографические ссылки

1. Справочник по управлению использованием спектра на национальном уровне. М.: МСЭ-Р, 2015. 364 с.
2. Карпук А.А., Говорко А.В. Новые задачи управления использованием радиочастотного спектра и пути их решения // Проблемы инфокоммуникаций. 2021. № 1(13). С. 56–63.
3. Карпук А.А., Говорко А.В. Построение прикладной онтологии сетей радиосвязи // Веснік сувязі. 2021. № 6(170). С. 56–60.
4. Палагин А.В., Крытый С.Л., Петренко Н.Г. Онтологические методы и средства обработки предметных знаний: монография. Луганск: изд-во ВНУ им. В. Даля, 2012. 324 с.
5. Карпук А.А., Говорко А.В. Приведение онтологии предметной области сетей радиосвязи к канонической форме // Проблемы инфокоммуникаций. 2021. № 2(14). С. 25–30.
6. Navorka A.V., Karpuk A.A. Reduction the Subject Domain Ontology to Canonical

- Form // International Journal of Information and Communication Technologies. Special Issue. 2022. May. P. 43–47.
7. Karpuk A.A., Krasnoproshin V.V. Methodology of Data Domain Description for Databases Design in Complex Systems // International Academy Journal Web of Scholar. 2017. Vol. 1, № 4(13). P. 11–20.
  8. Карпук А.А. Анализ структуры функциональных зависимостей между атрибутами реляционной базы данных // Экономика и менеджмент систем управления. 2017. № 3(25). С. 64–70.
  9. Карпук А.А., Краснопрошин В.В. Циклы в структурах функциональных зависимостей // International Journal of Open Information Technologies. 2017. Vol.5, № 7. С. 38–44.

## СТРУКТУРНЫЕ И АЛГОРИТМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ СЛАБЫХ РЁБЕРНЫХ ПОКРЫТИЙ В ГРАФАХ

Ю.Л. Орлович<sup>1</sup>, А.Д. Суравежкин<sup>1</sup>, Ю.А. Картынный<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030,  
г. Минск, Беларусь, orlovich@bsu.by

<sup>2</sup>Корпорация Гугл, 1600 Амфитеатр Паркуэй, 94043 Маунтин-Вью,  
Калифорния, США, kartynnik@gmail.com

Подмножество рёбер графа называется слабым рёберным покрытием, если каждая вершина графа инцидентна некоторому ребру из данного подмножества или лежит в треугольнике, содержащем такое ребро. В работе предлагаются некоторые оценки для наименьшего числа рёбер в слабом рёберном покрытии графа. Доказано, что в классах расщепляемых графов и кубических графов задача нахождения слабого рёберного покрытия наименьшей мощности является NP-трудной. Рассматривается наследственный класс графов, в которых у каждого порождённого подграфа без изолированных вершин все минимальные (по включению) слабые рёберные покрытия имеют одинаковую мощность.

**Ключевые слова:** Граф; рёберное покрытие; слабое рёберное покрытие; доминирующее множество; вычислительная сложность; NP-полная проблема; наследственный класс графов.

## STRUCTURAL AND ALGORITHMIC ASPECTS OF WEAK EDGE COVERINGS IN GRAPHS

Y.L. Orlovich<sup>a</sup>, A.D. Suraveshkin<sup>a</sup>, Y.A. Kartynnik<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Belarusian State University, 4 Niezalieznasci Avenue, Minsk 220030, Belarus,  
orlovich@bsu.by

<sup>b</sup>Google LLC, 1600 Amphitheatre Parkway, 94043 Mountain View, CA, USA,  
kartynnik@gmail.com

Corresponding author: orlovich@bsu.by

A subset of edges of a graph is called weak edge cover if each vertex of the graph is incident to an edge of this subset or is lying in a triangle containing such an edge. Estimates for the minimum number of edges in a weak edge cover of a graph are proposed. It is proved that for the classes of split graphs and cubic graphs the problem of finding a weak edge cover of minimum cardinality is NP-hard. The hereditary class of graphs in which for every isolate-free induced subgraph all its minimal (by inclusion) weak edge covers have the same cardinality is considered.

**Keywords:** Graph; edge cover; weak edge cover; dominating set; computational complexity; NP-complete problem; hereditary class of graphs.

## Введение

Подмножество рёбер графа называется *рёберным покрытием* [1], если каждая вершина графа инцидентна по крайней мере одному ребру из этого подмножества. Понятно, что только графы с изолированными вершинами не имеют рёберных покрытий. Число рёбер в наименьшем (по мощности) рёберном покрытии графа  $G$  называется *числом рёберного покрытия* этого графа и обозначается через  $\rho(G)$ . Рёберные покрытия широко изучаются в теории графов и дискретной математике, находя приложения в самых разнообразных областях науки и практики [2–4].

Данная работа продолжает начатое в [5] исследование следующего релаксированного варианта понятия рёберного покрытия. Подмножество  $M$  рёбер графа называется *слабым рёберным покрытием*, если каждая вершина графа инцидентна некоторому ребру из  $M$  или лежит в треугольнике, содержащем ребро из  $M$ . Число рёбер в наименьшем (по мощности) слабом рёберном покрытии графа  $G$  называется *числом слабого рёберного покрытия* этого графа и обозначается через  $\rho'(G)$ . Понятно, что в графе, не содержащем треугольников, понятия слабого рёберного покрытия и рёберного покрытия совпадают и, следовательно, для любого такого графа  $G$  выполнено равенство  $\rho'(G) = \rho(G)$ . В общем случае, каждое рёберное покрытие является слабым рёберным покрытием и, значит, для графа  $G$ , не содержащего изолированных вершин, верно  $\rho'(G) \leq \rho(G)$ .

Слабые рёберные покрытия находят разнообразные применения. Рассмотрим одно из таких применений, относящееся к сфере информационной безопасности в мультиагентных системах. Мультиагентная система состоит из взаимодействующих интеллектуальных агентов (далее агентов), каждый из которых преследует свои цели. Обычно под агентами понимаются программные объекты, которые могут взаимодействовать друг с другом, обмениваясь сообщениями, анализировать полученные сообщения, принимать решения в условиях неопределенности и отсутствия информации. Рассмотрим граф  $G$ , в котором роль вершин играют агенты, и две вершины смежны тогда и только тогда, когда соответствующие агенты могут обмениваться друг с другом данными, т. е. рёбра графа – это коммуникационные возможности между агентами. Чтобы атака (неисправность) на какого-то из агентов не была критичной для системы, решение агенту нельзя принять без электронной подписи двух общающихся заверяющих агентов, которые для установления взаимной подлинности используют дорогой защищённый канал передачи данных. Требуется, чтобы у каждого агента была возможность заверить своё решение у двух общающихся между собой заверяющих агентов, связавшись с ними на-

прямую, что является дополнительным требованием безопасности. Нас интересует наименьшее число неупорядоченных пар общающихся между собой заверяющих агентов, способных выполнить описанные выше требования безопасности. Такое множество пар в точности соответствует наименьшему слабому рёберному покрытию графа  $G$ .

Стандартные понятия теории графов, не определяемые далее, можно найти в [6]. Пусть  $G$  – конечный неориентированный граф без петель и кратных рёбер с множеством вершин  $V(G)$  и множеством рёбер  $E(G)$ . Число  $|V(G)|$  вершин графа  $G$  называется его *порядком*. Граф порядка больше 1 называется *нетривиальным*. Множество вершин графа  $G$ , смежных с вершиной  $v$ , называется *окружением вершины  $v$*  в графе  $G$  и обозначается через  $N(v)$ .

## 1. Результаты исследования

Следующее полезное наблюдение содержит эквивалентное определение слабого рёберного покрытия.

**Наблюдение.** Пусть  $G$  – граф и  $M \subseteq E(G)$ . Множество  $M$  является слабым рёберным покрытием графа  $G$  тогда и только тогда, когда каждая вершина графа лежит в клике (можно считать её максимальной по включению) с некоторым ребром из  $M$ .

Рассмотрим некоторые оценки параметра  $\rho'(G)$ .

**Теорема 1.** Для любого графа  $G$  без изолированных вершин верно неравенство  $\gamma(G) \leq \rho'(G)$ , где  $\gamma(G)$  – число доминирования графа  $G$ .

Доказательство. Согласно приведенному выше наблюдению каждая вершина графа  $G$  входит в клику вместе с некоторым ребром из слабого рёберного покрытия этого графа. Поэтому, произвольно выбирая по одной концевой вершине в каждом из рёбер наименьшего слабого рёберного покрытия графа, получим доминирующее множество. Теорема 1 доказана.

Равенство  $\gamma(G) = \rho'(G)$  верно, например, для графов, каждая компонента которых представляет собой нетривиальный полный граф.

Для ребра  $e \in E(G)$  обозначим через  $\tau(e)$  число треугольников графа  $G$ , содержащих ребро  $e$ . Другими словами,  $\tau(e) = |N(u) \cap N(v)|$ , где  $u$  и  $v$  – концевые вершины ребра  $e$ . Положим  $\tau(G) = \max_{e \in E(G)} \tau(e)$ .

**Теорема 2.** Для любого графа  $G$  порядка  $n$  без изолированных вершин верны неравенства

$$\left\lceil \frac{n}{2 + \tau(G)} \right\rceil \leq \rho'(G) \leq n - \tau(G) - 1. \quad (1)$$

Доказательство. Сначала докажем левое неравенство в (1). Пусть  $M$  – наименьшее слабое рёберное покрытие графа  $G$ , т. е.  $|M| = \rho'(G)$ . Каждое ребро  $e = \{u, v\} \in M$  покрывает две инцидентные ему вершины  $u$  и  $v$ , и ещё  $\tau(e)$  вершин графа  $G$ , которые вместе с  $u$  и  $v$  образуют треугольники. Значит,  $n \leq \sum_{e \in M} (2 + \tau(e)) \leq (2 + \tau(G)) |M|$ , откуда с учётом  $|M| = \rho'(G)$  и следует нижняя оценка для  $\rho'(G)$ .

Теперь докажем правое неравенство в (1). Рассмотрим ребро  $e \in E(G)$ , для которого  $\tau(e) = \tau(G)$ . Это ребро покрывает  $2 + \tau(G)$  вершин графа. Для каждой из оставшихся  $n - \tau(G) - 2$  вершин произвольно выберем по одному инцидентному ей ребру (такие рёбра существуют, поскольку  $G$  не содержит изолированных вершин). Эти рёбра вместе с ребром  $e$  образуют в графе  $G$  слабое рёберное покрытие мощности не более  $n - \tau(G) - 1$ , что и доказывает верхнюю оценку для  $\rho'(G)$ . Теорема 2 доказана.

Нижняя и верхняя оценки для  $\rho'(G)$  из (1) достижимы. Оценка снизу достигается на квадрате  $P_n^2$  простой цепи  $P_n$ ,  $n \geq 2$ , а оценка сверху – на нетривиальном полном графе.

Нижнюю оценку для  $\rho'(G)$  из (1) можно усилить. Пусть  $G$  – граф с множеством рёбер  $E(G) = \{e_1, e_2, \dots, e_m\}$  и  $\tau_i = \tau(e_i)$ ,  $i = 1, 2, \dots, m$ . Свяжем с графом  $G$  упорядоченную последовательность  $(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_m)$ , в которой, без ограничения общности,  $\tau_i \geq \tau_{i+1}$  для  $i = 1, 2, \dots, m-1$ . В этих обозначениях верно следующее утверждение.

**Теорема 3.** Для любого графа  $G$  порядка  $n$  без изолированных вершин верно неравенство

$$\rho'(G) \geq \min\{k : 2k + \tau_1 + \tau_2 + \dots + \tau_k \geq n\}. \quad (2)$$

Доказательство. Пусть  $k$  – наименьший номер, для которого выполнено неравенство  $2k + \tau_1 + \tau_2 + \dots + \tau_k \geq n$ . Предположим от противного, что  $\rho'(G) = \ell < k$ . Пусть  $M = \{e_{i_1}, e_{i_2}, \dots, e_{i_\ell}\}$  – наименьшее слабое рёберное покрытие графа  $G$ . Тогда  $\sum_{e \in M} (2 + \tau(e)) \geq n$ , что эквивалентно неравенству  $2\ell + \tau_{i_1} + \tau_{i_2} + \dots + \tau_{i_\ell} \geq n$ . Без ограничения общности будем считать, что  $\tau_{i_1} \geq \tau_{i_2} \geq \dots \geq \tau_{i_\ell}$ . Отсюда в силу того, что  $\tau_1 \geq \tau_2 \geq \dots \geq \tau_m$ , имеем  $\tau_j \geq \tau_{i_j}$  для  $j = 1, 2, \dots, \ell$ . Следовательно,  $2\ell + \tau_1 + \tau_2 + \dots + \tau_\ell \geq n$ . Но это с учётом  $\ell < k$  противоречит минимальности номера  $k$ . Значит, исходное предположение неверно, т. е.  $\rho'(G) \geq k$ . Теорема 3 доказана.

Пусть  $n$  – натуральное число. Рассмотрим три не пересекающихся по вершинам графа: соединение  $K_2 + O_n$  и две копии простой цепи  $P_{n+3}$ . В каждой из цепей  $P_{n+3}$  зафиксируем по одной концевой вершине. отождествим теперь вершины степени  $n+1$  графа  $K_2 + O_n$  с выбранными концевыми вершинами цепей  $P_{n+3}$ . Полученный в результате граф порядка  $3(n+2)$  обозначим через  $H_n$ . Для графа  $H_n$  в силу (1) имеем  $\rho'(H_n) \geq 3$ , а из (2) получаем  $\rho'(H_n) \geq n+2$ .

Перейдём к результатам, касающимся вычислительной сложности следующей задачи распознавания.

**СЛАБОЕ РЕБЕРНОЕ ПОКРЫТИЕ.** Заданы граф  $G$  и натуральное число  $k$ . Верно ли, что  $\rho'(G) \leq k$ ? Другими словами, существует ли такое слабое реберное покрытие  $M$  графа  $G$ , что  $|M| \leq k$ ?

Отметим, что в классе графов без треугольников задача СЛАБОЕ РЕБЕРНОЕ ПОКРЫТИЕ разрешима за полиномиальное время. Этот факт следует из полиномиальной разрешимости задачи о наименьшем реберном покрытии.

Граф  $G$  называется *расщепляемым*, если множество его вершин можно представить в виде разбиения  $V(G) = C \cup I$ ,  $C \cap I = \emptyset$ , где  $C$  – клика, а  $I$  – независимое множество (отметим, что каждое из этих множеств по отдельности может быть пустым).

**Теорема 4.** В классе расщепляемых графов задача распознавания СЛАБОЕ РЕБЕРНОЕ ПОКРЫТИЕ является NP-полной.

Схема доказательства. Рассматриваемая задача, очевидно, принадлежит классу NP. Построим полиномиальное сведение от NP-полной задачи ТРЁХМЕРНОЕ СОЧЕТАНИЕ [7], условием которой являются попарно непересекающиеся множества  $X$ ,  $Y$  и  $Z$  конечной мощности  $k$  и множество  $S$  трёхэлементных подмножеств множества  $X \cup Y \cup Z$ , содержащих в точности по одному элементу из каждого множества  $X$ ,  $Y$  и  $Z$ . Требуется выяснить существует ли в  $S$  *трёхмерное сочетание*, т. е. подмножество, объединение элементов которого совпадает с  $X \cup Y \cup Z$ ? Будем говорить, что задача ТРЁХМЕРНОЕ СОЧЕТАНИЕ *разрешима*, если в множестве  $S$  существует трёхмерное сочетание.

Пусть  $Q = (X, Y, Z, S)$  – входные данные задачи ТРЁХМЕРНОЕ СОЧЕТАНИЕ, где  $X = \{x_1, x_2, \dots, x_k\}$ ,  $Y = \{y_1, y_2, \dots, y_k\}$  и  $Z = \{z_1, z_2, \dots, z_k\}$ . Определим граф  $G_Q$  следующим образом. Множество его вершин есть объединение  $X \cup Y \cup Z \cup \{T^1, T^2 : T \in S\}$ , где  $T^1$  и  $T^2$  – две копии подмножества  $T \in S$ . Для каждой вершины  $a \in X \cup Y \cup Z$  добавим рёбра меж-

ду  $a$  и теми вершинами из  $\{T^1, T^2 : T \in S\}$ , которые (как подмножества) содержат элемент  $a$ . Добавим в граф всевозможные рёбра между вершинами множества  $\{T^1, T^2 : T \in S\}$ , т. е. образуем на этом множестве вершин клику.

По построению граф  $G_Q$  является расщепляемым и его порядок равен  $3k + 2|S|$ . На рис. 1 приведен пример графа  $G_Q$ , который соответствует входу  $Q = (X, Y, Z, S)$  задачи ТРЁХМЕРНОЕ СОЧЕТАНИЕ, где

$$X = \{x_1, x_2, x_3\}, Y = \{y_1, y_2, y_3\}, Z = \{z_1, z_2, z_3\} \text{ и } S = \{T_1, T_2, T_3, T_4\},$$

$$T_1 = \{x_1, y_2, z_1\}, T_2 = \{x_2, y_3, z_2\}, T_3 = \{x_3, y_1, z_3\}, T_4 = \{x_1, y_3, z_1\}.$$

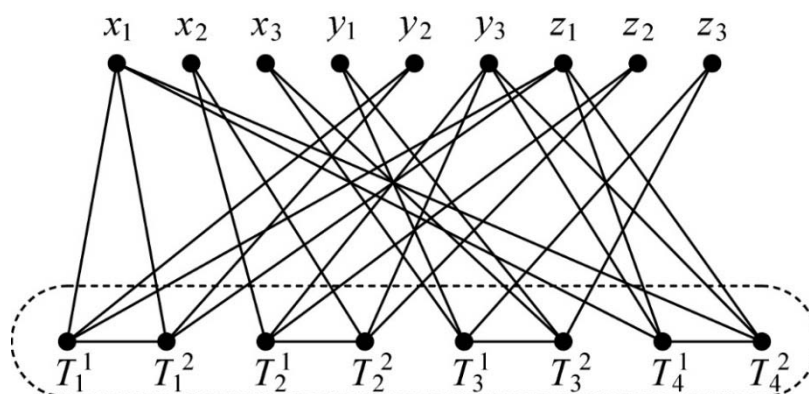


Рисунок 1 – Пример графа  $G_Q$

Нетрудно видеть, что граф  $G_Q$  можно построить за полиномиальное время. Далее остаётся показать, что задача ТРЁХМЕРНОЕ СОЧЕТАНИЕ с входом  $Q = (X, Y, Z, S)$  разрешима тогда и только тогда, когда  $\rho'(G_Q) \leq k$ . Это завершает схему доказательства теоремы 4.

Заметим, что граф  $G_Q$  содержит довольно много треугольников (не меньше чем  $C_{2|S|}^3 + k$ ). Другой крайний случай, когда число треугольников графа невелико, образуют кубические (т. е. 3-регулярные) графы. Однако, и в этом классе графов, как показывает следующий результат, задача СЛАБОЕ РЁБЕРНОЕ ПОКРЫТИЕ остаётся трудной.

**Теорема 5.** В классе кубических графов задача распознавания СЛАБОЕ РЁБЕРНОЕ ПОКРЫТИЕ является NP-полной.

Для доказательства теоремы 5 используется вариант задачи ТРЁХМЕРНОЕ СОЧЕТАНИЕ, в котором каждый элемент из  $X \cup Y \cup Z$  входит ровно в три подмножества из  $S$ . Известно, что данный ограниченный вариант



задачи ТРЁХМЕРНОЕ СОЧЕТАНИЕ также принадлежит классу NP-полных задач.

Напомним, что класс графов  $X$  называется *наследственным*, если вместе с каждым графом  $G \in X$  этому классу принадлежит любой порождённый подграф графа  $G$ . Каждый наследственный (и только наследственный) класс графов  $X$  может быть задан множеством  $F_X$  своих запрещённых порождённых подграфов. Это означает, что  $G \in X$  тогда и только тогда, когда  $G$  не содержит порождённых подграфов, изоморфных любому из графов множества  $F_X$  (см., например, [8]). Граф  $H$  называется *минимальным запрещённым порождённым подграфом* для класса  $X$ , если  $H \notin X$  и каждый порождённый подграф графа  $H$ , отличный от  $H$ , принадлежит классу  $X$ .

Введём в рассмотрение класс *хорошо слабо рёберно покрытых графов* (well-weak-edge-covered graphs), в которых у каждого порождённого подграфа без изолированных вершин все минимальные (по включению) слабые рёберные покрытия имеют одинаковую мощность. Данный класс является наследственным. Как нетрудно проверить, минимальными запрещёнными порождёнными подграфами для этого класса графов являются графы  $K_4 - e$ ,  $\bar{P}_5$  и следующие десять графов порядка 6, изображённых на рис. 2.

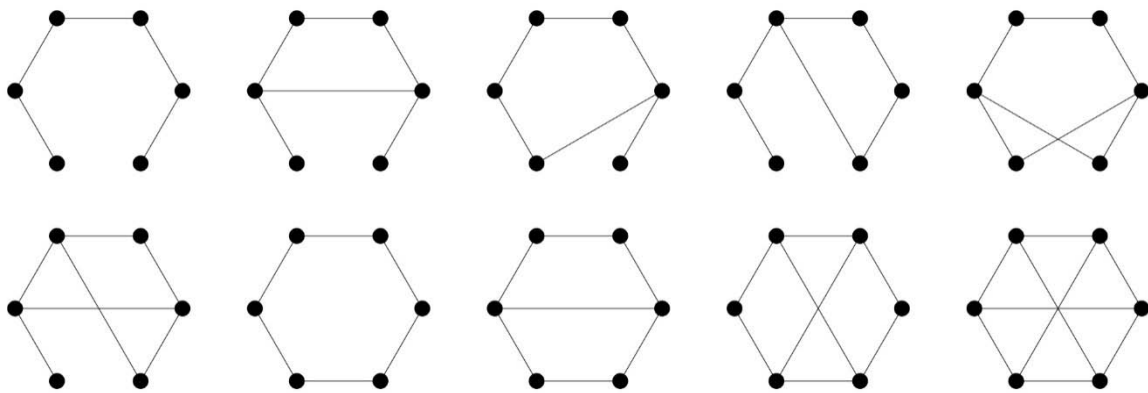


Рисунок 2 – Минимальные запрещённые порождённые подграфы порядка 6 для класса хорошо слабо рёберно покрытых графов

Предполагается, что указанный список из 12 минимальных запрещённых подграфов является исчерпывающим для класса хорошо слабо рёберно покрытых графов.

## Заключение

В работе продолжено изучение понятия слабого рёберного покрытия графа. Доказаны некоторые оценки для наименьшего числа рёбер в слабом рёберном покрытии графа. Для некоторых специальных классов графов (расщепляемые графы, кубические графы) установлена NP-полнота задачи распознавания, связанной с задачей нахождения слабого рёберного покрытия наименьшей мощности. Введён в рассмотрение наследственный класс графов, в которых у каждого порождённого подграфа без изолированных вершин все минимальные (по включению) слабые рёберные покрытия имеют одинаковую мощность. Для этого наследственного класса графов найдены 12 минимальных запрещённых порождённых подграфов и сделано предположение, что рассматриваемый наследственный класс может быть охарактеризован в терминах запрещённых порождённых подграфов, принадлежащих данному списку.

## Библиографические ссылки

1. Gallai T. Uber extreme Punkt- und Kantenmengen // Ann. Univ. Sci. Budap. Rolando Eötvös, Sect. Math. 1959. № 2. P. 133–138.
2. Akbari S., Oboudi M.R. On the edge cover polynomial of a graph // Eur. J. Comb. 2013. № 34(2). P. 297–321. DOI:10.1016/j.ejc.2012.05.005.
3. De Ita G., Marcial-Romero J.R., Montes-Venegas H.A. Estimating the relevance on communication lines based on the number of edge covers // Electron. Notes Discrete Math. 2010. № 36. P. 247–254. DOI:10.1016/j.endm.2010.05.032.
4. Azad A., Langguth J., Fang Y., Qi A., Pothen A. Identifying rare cell populations in comparative flow cytometry. In: Moulton V., Singh M. (eds) Algorithms in Bioinformatics. WABI 2010 // Lect. Notes Comp. Sci. 2010. № 6293. P. 162–175. DOI:10.1007/978-3-642-15294-8\_14.
5. Дыбовская Д.А. Слабые рёберные покрытия и ассоциированные с ними классы графов: 77-я научная конференция студентов и аспирантов Белорусского государственного университета: материалы конф. В 3 ч. Ч. 1, Минск, 11–22 мая 2020 г. Минск: БГУ, 2020. С. 58–61.
6. Емеличев В.А., Мельников О.И., Сарванов В.И., Тышкевич Р.И. Лекции по теории графов. М.: УРСС, 2021. 390 с.
7. Гэри М., Джонсон Д. Вычислительные машины и труднорешаемые задачи. М.: Мир, 1982. 416 с.
8. Kitaev S., Lozin V. Words and graphs. Monographs in Theoretical Computer Science. Springer, 2015. 264 p.

## **О ПОДХОДАХ К РЕАЛИЗАЦИИ ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ИСТОРИЧЕСКИХ ПАМЯТНИКОВ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ**

**Л.В. Рудикова-Фронхёфер, А.И. Жвалецкий**

*Гродненский государственный университет имени Янки Купалы,  
ул. Ожешко, 22, 230023, г. Гродно, Беларусь  
lada.rudikowa@gmail.com, zhvaleuski.andrei@gmail.com*

В статье приведены основные теоретические и практические аспекты разработки информационно-аналитической системы исторических памятников и достопримечательностей Республики Беларусь с использованием технологии контейнеризации, принципов предметно-ориентированного проектирования и шаблона разделения ответственности команд и запросов. В разработке используется нейронная сеть BERT от Google для обработки запросов пользователей на естественном языке и последующего формирования релевантных результатов. Описывается процесс построения системы, а также приводятся основные характеристики разработки.

**Ключевые слова:** веб-приложение; анализ данных; исторические памятники; семантический поиск.

## **ON APPROACHES TO THE IMPLEMENTATION OF THE INFORMATION AND ANALYTICAL SYSTEM OF HISTORICAL MONUMENTS OF THE REPUBLIC OF BELARUS**

**L.V. Rudikova-Fronhoefer, A.I. Zhvaleuski**

*Yanka Kupala State University of Grodno,  
Ozheshko str., 22, 230023, Grodno, Belarus,  
lada.rudikowa@gmail.com, zhvaleuski.andrei@gmail.com*

The article presents the main theoretical and practical aspects of the system necessary for the development of an information and analytical system of historical monuments in the Republic of Belarus using containerization technologies, the principles of subject-oriented design and a template for the division of responsibility of teams and requests. The development uses Google's BERT neural network to process user requests in natural language and then produce relevant results. The process of building the system is described, the characteristics of the application are given.

**Keywords:** web application; data analysis; historical monuments; semantic search.

## **Введение**

Проектирование и разработка универсальной информационно-аналитической системы предусматривает сбор, обработку и анализ данных об исторических памятниках, достопримечательностях и других ценных объектах Республики Беларусь. Обработка собранных данных, их анализ и структурированное представление позволит упростить процесс изучения и временные затраты на поиск информации об исторических памятниках и достопримечательностях. Аналитическая система предполагает также открытый интерфейс в виде веб-API для взаимодействия с данными, позволяя производить интеграцию с внешними системами.

Цель исследования – выбор эффективных технологий и инструментов для создания информационно-аналитической системы исторических памятников и достопримечательностей в Республике Беларусь. Предлагаемая разработка будет предоставлять средства для взаимодействия с информацией, расширенного поиска и анализа хранимых данных.

Задачи исследования: провести анализ имеющихся инструментов разработки; выявить требования и функциональность, предъявляемые к системе; выбрать оптимальный набор средств разработки; спроектировать архитектуру системы; разработать модель данных; разработать программное решение для информационно-аналитической системы (серверная и клиентская часть); провести тестирование и отладку системы; сделать выводы и подготовить техническую документацию.

### **1. Методология исследования / теоретические основы**

Объектами исследования являются данные об исторических памятниках, а также связанными с ними места, объекты, события, личности и т.д. Предмет исследования – алгоритмы сбора и обработки исторических данных, визуализация, анализ и их использование. Методами исследования являются структурная методология проектирования и объектно-ориентированный анализ.

Научная новизна и практическая значимость обусловлена разработкой программных решений, алгоритмов сбора, обработки и визуализации данных информационно-аналитической системы исторических памятников и достопримечательностей Республики Беларусь. В дальнейшем разработка может использоваться в образовательном процессе, а также в туристических целях, предоставляя структурированную информацию об исторических памятниках,

связанных событиях и исторических личностях, а также документацию и модели проектирования систем подобного рода

## 2. Результаты и их обсуждение

Рассмотрим некоторые аспекты предметной области, связанной с историческими памятниками и достопримечательностями. Историко-культурный объект характеризуется следующими параметрами: название; описание; фото- и видео- материалами; классификацией по критериям всемирного наследия ЮНЕСКО: культурные (I, II, III, IV, V, VI), природные (VII, VIII, IX, X); категория историко-культурной ценности Республики Беларусь (0, 1, 2, 3, А, Б и без категории); место расположения. В зависимости от типа историко-культурного объекта, ему могут быть назначены различные свойства. Например, материал изготовления, скульптор, высота скульптуры для памятника, или конфессия, архитектурный стиль для храма.

Историко-культурный объект является основной сущностью в системе при проведении инфологического моделирования предметной области исследования [1]. Однако в системе будет храниться и информация связанного плана (например, местоположение, география места, исторические события, связанные с местом и т.д.), а также информация о посещениях данного объекта и мероприятиях, связанных с данным объектом. Кроме того, следует также учитывать и взаимосвязи всех выделенных объектов и ограничения, накладываемые предметной областью. На рисунке представлен фрагмент концептуальной модели, связанной с объектами исторической ценности и их основными свойствами [2].

Что касается подходов к реализации, предлагаемая система разрабатывается на основе микросервисного подхода, а также с использованием технологий контейнеризации и оркестрации, что значительно упрощает процесс внедрения изменений в систему и её тестирование. В данном случае используются Docker и Kubernetes, а для управления инфраструктурой (запуск, обновление контейнеров и т.д.) – Terraform [3].

Таким образом, проект разрабатывается на основе различных технологий, которые позволяют решать поставленные задачи наилучшим образом. Часть подсистем, отвечающих за реализацию бизнес-логики, не связанной с анализом данных, реализована на платформе ASP.NET и языке программирования C#. Данные хранятся в базе данных PostgreSQL [4]. Для построения графического пользовательского интерфейса используется Next.js фреймворк для React и библиотека компонентов

Materiel UI. Подсистема, отвечающая за анализ данных, реализуется на языке Python с применением его различных библиотек, например, TensorFlow, OpenCV, pandas.

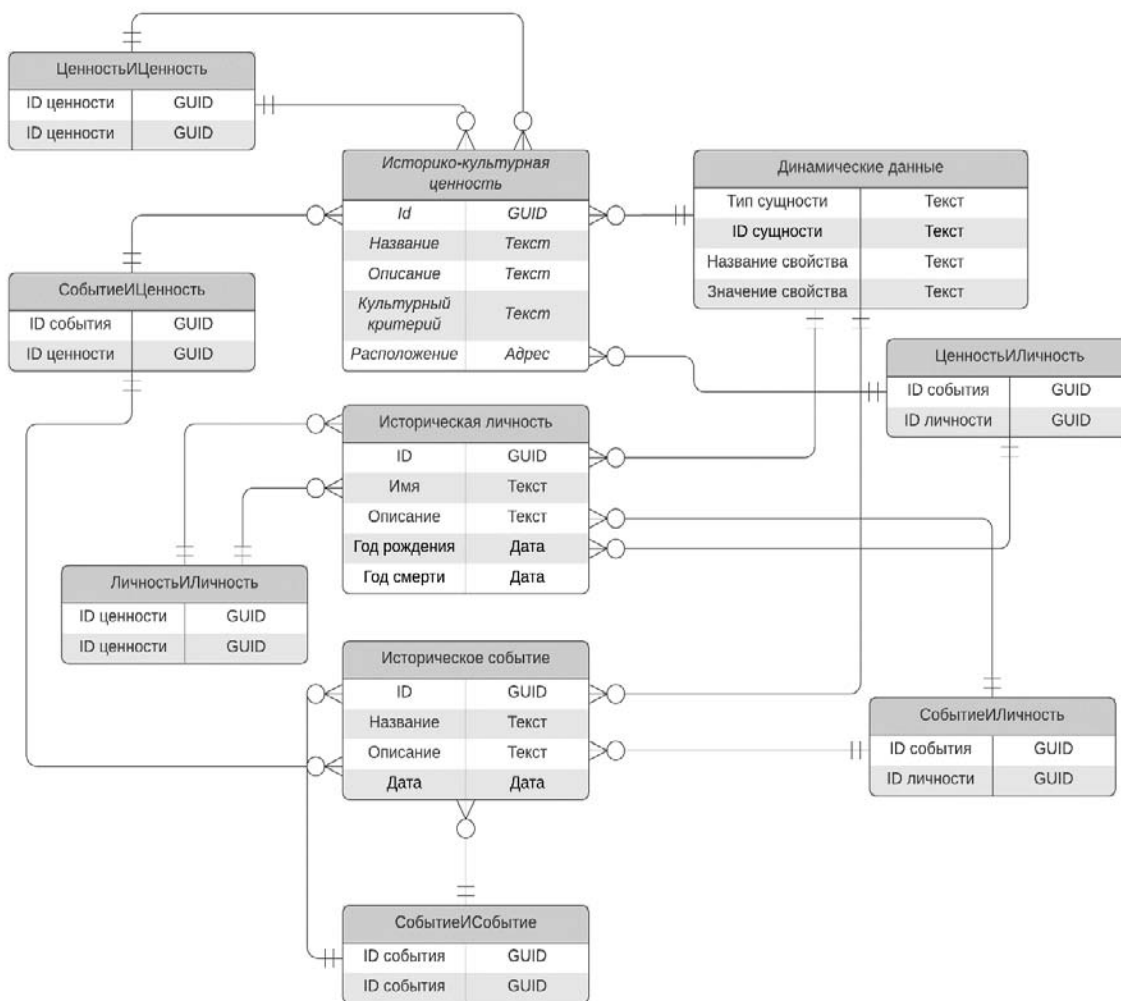


Рисунок – Фрагмент концептуальной модели, связанной с объектами исторической ценности

Основой подсистемы анализа исторических данных является алгоритм обработки запросов на естественном языке. Каждый запрос проходит через обученную модель и, в результате, выдает список данных (события, исторические личности, памятник), которые соответствуют запросу пользователя. Для решения задачи обработки естественного языка используется языковая модель Bidirectional Encoder Representations from Transformers (BERT) от Google [5].

BERT использует Transformer, attention механизм, который изучает контекстуальные отношения между словами (или вложенными словами) в тексте. В своей vanilla форме Transformer включает в себя два отдельных

механизма – кодер, который считывает вводимый текст, и декодер, который выдает прогноз для задачи. Поскольку целью BERT является создание языковой модели, необходим только механизм кодирования. Подробная работа Transformer описана в статье Google [6]. В отличие от направленных моделей, которые считывают вводимый текст последовательно (слева направо или справа налево), преобразовательный кодер считывает всю последовательность слов сразу. Эта характеристика позволяет модели изучать контекст слова на основе всего его окружения (слева и справа от слова). При обучении языковых моделей возникает проблема определения цели прогнозирования. Многие модели предсказывают следующее слово в последовательности (направленный подход), который, по сути, ограничивает контекстное обучение. Чтобы преодолеть эту проблему, BERT использует две стратегии обучения, которые приводятся ниже.

**Masked LM (MLM).** Перед подачей последовательностей слов в BERT 15% слов в каждой последовательности заменяются токеном [MASK]. Затем модель пытается предсказать исходное значение замаскированных слов на основе контекста, предоставляемого другими, не замаскированными словами в последовательности.

**Next Sentence Prediction (NSP).** В процессе обучения BERT модель получает пары предложений в качестве входных данных и учится предсказывать, является ли второе предложение в паре последующим предложением в исходном документе. Во время обучения 50% входных данных представляют собой пару, в которой второе предложение является последующим предложением в исходном документе, в то время как в других 50% в качестве второго предложения выбирается случайное предложение из корпуса. Предполагается, что случайное предложение будет отсоединено от первого предложения.

## **Заключение**

Таким образом, предлагаемая разработка может представлять, как коммерческую ценность, так и академическую пользу. Авторам работы видится дальнейшая перспектива применения разработанного продукта в роли самостоятельного сервиса с возможностью его дальнейшего развития и внедрения в системы, связанные с обработкой информации различного профиля.

## Библиографические ссылки

1. Рудикова Л.В. Проектирование баз данных: Учебное пособие для студентов высш. учеб. заведений по специальностям «Программное обеспечение информационных технологий», «Экономическая кибернетика», «Прикладная математика (научно-педагогическая деятельность)», «Информационные системы и технологии (в экономике)». Минск: ИВЦ Минфина, 2009. 352 с.
2. Рудикова Л.В. О системе хранения и обработки информации о произведениях художественной ценности на основе технологии складирования данных // Проблемы современной экономики: глобальный, национальный и региональный контекст: сб. науч. ст. / ГрГУ им. Я. Купалы; редкол.: М.Е. Карпицкая (гл. ред.), С.Е. Витун (зам. гл. ред.) [и др.]. Гродно: ГрГУ, 2021. С. 210–216
3. Эванс Э. Предметно-ориентированного проектирования (DDD): структуризация сложных программных систем: Пер. с англ. М.: ООО «И.Д. Вильямс». 2011. 448 с.
4. Backend for Frontend Security Framework Overview (Duende IdentityServer) [Электронный ресурс]. URL: <https://docs.duendesoftware.com/identityserver/v6/bff/overview/> (дата обращения: 20.08.2022.)
5. BERT Explained: State of the art language model for NLP [Электронный ресурс]. URL: <https://towardsdatascience.com/bert-explained-state-of-the-art-language-model-for-nlp-f8b21a9b6270> (дата обращения: 28.08.2022.)
6. Attention Is All You Need [Электронный ресурс]. URL: <https://arxiv.org/pdf/1706.03762.pdf> (дата обращения: 11.08.2022.)



## ОЦЕНКА ПАССАЖИРОПОТОКА И ТРАНСПОРТНОГО ТРАФИКА В ГОРОДСКИХ УСЛОВИЯХ

**Л.В. Рудикова-Фронхёфер, Н.И. Игнатенко**

*Гродненский государственный университет имени Янки Купалы,  
ул. Ожешко, 22, 230023, г. Гродно, Беларусь  
lada.rudikowa@gmail.com, nikolay.ignatenko@outlook.com*

В статье приведены подходы к экстраполяции транспортного трафика в условиях городской среды с использованием машинного обучения, в частности, метода ближайших соседей, градиентного бустинга, графовых и классических нейронных сетей. Модели разрабатывались для пассажирских посадок такси и пассажиропотока метрополитена.

**Ключевые слова:** машинное обучение; графовые нейронные сети; экстраполяция; трафик; анализ данных.

## ESTIMATING OF PASSENGER AND TRANSPORT TRAFFIC IN URBAN CONDITIONS

**L.V. Rudikova-Fronhoefer, N.I. Ihnatsenka**

*Yanka Kupala State University of Grodno,  
Ozheshko str., 22, 230023, Grodno, Belarus,  
lada.rudikowa@gmail.com, nikolay.ignatenko@outlook.com*

The article presents approaches to extrapolation of transport traffic in a megalopolis using machine learning, in particular the nearest neighbor method, gradient boosting, graph and classical neural networks. The models were developed for passenger taxi landings and metro passenger traffic.

**Keywords:** machine learning; graph neural networks; extrapolation; traffic; data analysis.

### **Введение**

Современный мир наблюдает рекордный рост и развитие городов в различных аспектах наравне с большим уровнем урбанизации. Город и его механизмы становятся более комплексными, в силу чего требуются наиболее визуальные и аналитические методы для отображения городских процессов, наблюдаемых на городских территориях. В области урбанистики активно применяется машинное обучение, а также достижения и результаты исследований из других различных сфер науки и техники. Эмпирически оказалось, что структура данных оказывает

ключевое значение для методологии машинного обучения, а появление графовых нейронных сетей влияет на получение корректных результатов в задачах с нерегулярной структурой данных.

Предметом предлагаемого исследования послужили данные посадок пассажиров такси, данные турникетов метрополитена, а также социально-экономические данные о локациях (например, численность населения, его занятость и т.п.) города Нью-Йорка.

Целью исследования являлось изучение регрессионных моделей в задаче экстраполяции, использующих наработки современных подходов к созданию графовых нейронных сетей, таких, как Graph Attention Networks (GAT) [1], GCN [2] и других методов машинного обучения, применимых к графам. Другой частью исследования было сопоставление выразительности моделей, использующих подход Message Passing в сравнении с традиционными детерминированными методами.

Среди работ, успешно применяющих графовые нейронные сети, следует отметить ETA (estimated time arrival) prediction в Google Maps [3]. Так ученые из DeepMind смогли улучшить показатели предыдущих систем на 16-51 % в зависимости от города. Ученые из Китая также вполне успешно использовали комбинацию сверточных и рекуррентных нейронных сетей совместно с методами обучения без учителя с целью получения векторных представлений вершин графа для предсказания скорости автомобильного потока [4].

## **1. Методология исследования / теоретические основы**

Оценка трафика в локации, которая является ненаблюдаемой, является основной задачей работы, вследствие чего определим понятие трафика. В случае такси трафик в локации – это количество посадок в заданном радиусе за определенный временной интервал, а дорожная сеть задает непосредственно граф (вершины – перекрестки либо часть дороги, ребра – дороги). Для данных метрополитена трафик задавался количеством прохождений через турникеты на станции. Данные такси насчитывали около 20000 вершин и 60000 ребер, метрополитена – около 350 вершин и 1500 ребер.

Поставим задачу экстраполяции трафика следующим образом: для части локаций наблюдается трафик (мы знаем его оценку), а для любой ненаблюдаемой локации, на основании ее признаков и наблюдаемого трафика других локаций, необходимо его оценить. В качестве базовой модели, относительно которой можно делать выводы о значимости последующих и более сложных моделей, использовался метод k-ближайших соседей. В данном случае требовалось определить

оптимальное число соседей, для чего использовалась библиотека для поиска оптимальных гиперпараметров. Оценкой трафика было среднее его значение по соседям. За метрику схожести объектов бралось географическое расстояние. Впоследствии, этот метод был модифицирован: определим вес ребра между локациями как  $w(a,b)$  и оценим трафик в локации как уже нормализованное взвешенное среднее (1):

$$T(a) = \sum_{a \neq b} \frac{w(a,b)}{\sum_{a \neq b} w(a,b)} T(b), \quad (1)$$

где  $T(a)$  – трафик в локации. В качестве функции  $w(a,b)$ , которую можно охарактеризовать как релевантность между локациями (использовались несколько альтернатив (2), (3), (4)).

$$w(a, b) = \exp(-k * \text{dist}(a, b)), \quad (2)$$

где параметр  $k$  здесь обучаемый, а  $\text{dist}(a, b)$  – географическое расстояние между локациями.

$$w(a, b) = \cos\_sim(x(a), x(b)), \quad (3)$$

где  $x(a)$  – векторное представление вершины, которые были получены посредством подхода `node2vec` [5], `cos_sim` – косинус между векторными представлениями вершин. `Node2vec` – это алгоритм для генерации векторных представлений узлов на графе. Инфраструктура `node2vec` изучает низкоразмерные представления для узлов в графе с помощью случайных блужданий по графу, начиная с целевого узла. Важной особенностью этого подхода, является тот факт, что векторные представления узлов, находящихся структурно рядом, будут схожи, что выражается непосредственно как косинус между их векторными представлениями. Кроме `cos_sim` использовались и другие методы, но значительных улучшений в результате это не дало.

$$w(a, b) = MLP(x(a) || x(b)), \quad (4)$$

где `MLP` – многослойный перцептрон, `||` – операция конкатенирования векторов. Пробовались различные вариации конфигурации этой модели: векторные представления размером 64, 128 и 256 в тренировке `node2vec` (как и вышеперечисленных подходах), произведение Адамара вместо конкатенации, изменение структуры `MLP` (5).

$$(a, b) = \exp(\text{LeakyReLU}(v^T [Wx(a) || Wx(b)])) \quad (5)$$

где для `LeakyReLU` `negative slope` был 0.2,  $v$  – параметризованный вектор,  $W$  – линейное преобразование.

По сути, данное выражение задаёт механизм «внимания», аналогичный приведенному в статье [1]. Как и в приведенной статье использовались несколько «головок» для получения более стабильных моделей.

Наилучшим вариантом для релевантных весов с случае посадок такси оказалась функция (2), поскольку при своей простоте она значительно не уступает другим более комплексным методам. Для увеличения производительности тренировки и оптимального расхода памяти для обучения использовалась лишь приблизительно шестая часть всей сети, более точно – центральная часть города в радиусе 8 км. На основании испытанных моделей, можно сделать следующий вывод: наиболее успешно описывает оценку трафика в локации наблюдаемый трафик в близлежащих точках. Этот результат, на наш взгляд, можно объяснить во многом следующей причиной: высокая плотность покрытия города дает достаточно большую корреляцию между соседними локациями, вследствие чего следует ожидать ухудшения показателей модели при более разреженном покрытии города. С этим и столкнулись, работая с данными станций метро.

Для метрополитена вышеперечисленные подходы, практически, не работают: R2 держится около нуля. Эти результаты во многом объясняются особенностями данных: средний трафик за день для двух соседних станций метро может разительно отличаться. Для решения этой проблемы для модели были определены коэффициенты масштабирования, которые должны показывать отношение значений целевой переменной локаций. Таким образом, вводим и обучаем функцию масштабирования  $s$  для локации от различных ее социо-экономических показателей (численность населения, его занятость и пр.), которая должна удовлетворять следующему выражению (6) и трафик будем оценивать по уравнению (7).

$$\frac{T(a)}{T(b)} \approx \frac{s(a)}{s(b)} \quad (6)$$

$$T(a) = s(a) \sum_{a \neq b} \frac{w(a,b)}{\sum_{b \in N(a)} w(a,b)} \frac{T(b)}{s(b)} \quad (7)$$

Следует отметить, что можно обучать функцию масштабирования независимо от экстраполяции. Так, обучая MLP вместе со всей моделью, не было получено значимых результатов. Более того, в процессе обучения функции масштабирования отдельно от самой модели, MLP не смог выйти на положительные значения R2. Заметим, аппроксимируя функцию масштабирования, решается следующая задача: по локальным признакам прогнозируется трафик для заданного дня. Наиболее хорошие результаты

в этом случае показал градиентный бустинг (в реализации использовался Catboost): 0.2 по R2. По сути, это говорит о том, что использованных признаков недостаточно, чтобы хорошо выразить зависимость между ними и наблюдаемым трафиком. Так, найдя подходящие признаки и построив точные модели для масштабирования локаций, можно улучшить основную модель. Чтобы искусственно обойти эту проблему использовался средний трафик за все время наблюдений для каждой станции в качестве функции масштабирования, что дало положительные результаты, свидетельствующие о рациональности подхода. Также отметим, что коэффициенты масштабирования должны зависеть как минимум от дня недели из предположения от изменчивости трафика в рабочие и выходные дни. Для этого можно использовать либо день недели как категориальный признак для функции масштабирования, либо для каждого дня недели строить собственную модель.

## 2. Результаты и их обсуждение

В последующей таблице приведены результаты тестирования моделей. Значение метрики вычислялось в среднем для месяца.

Таблица – Результаты тестирования моделей (R2)

| Данные \ Подход                             | kNN  | HBC (2) | HBC (3) | HBC (4) | HBC (5) |
|---|------|---------|---------|---------|---------|
| Такси                                       | 0.75 | 0.88    | 0.8     | 0.82    | 0.86    |
| Метро<br>(с коэффициентами масштабирования) | 0.7  | 0.77    | 0.76    | 0.74    | 0.79    |

Весь код написан на языке Python с использованием фреймворков для машинного обучения: PyTorch, PyTorch Geometric, Sklearn, Numpy. Для эффективной обработки данных применялись библиотеки Pandas и NetworkX. Все обучение проходило на видеокарте NVIDIA GTX 1050M (4 Gb).

### Заключение

Таким образом, предлагаемая разработка предлагает путь к экстраполяции и улучшению качества анализа данных широкого спектра городских сенсорных наблюдений, таких, как качество воздуха. Результаты предиктивной модели могут быть использованы для

улучшения логистики и/или обнаружения аномальных сценариев (путем сравнения фактических наблюдений с прогнозами), чтобы информировать аналитиков о возможных аномалиях, к которым необходимо подготовиться. Кроме этого, работа показывает практическое применение новейших практик и методологий в машинном обучении на городских временных данных.

### **Библиографические ссылки**

1. Veličković P. Graph Attention Networks // ArXiv:1710.10903 [Cs, Stat] [Электронный ресурс]. Feb. 2018. arXiv.org. URL: <http://arxiv.org/abs/1710.10903>. (дата обращения: 24.08.2022.)
2. Kipf Th.N. Semi-Supervised Classification with Graph Convolutional Networks // ArXiv:1609.02907 [Cs, Stat], 4 [Электронный ресурс]. Feb. 2017. arXiv.org. URL: <http://arxiv.org/abs/1609.02907>. (дата обращения: 26.08.2022.)
3. Derrow-Pinion A., et al. ETA Prediction with Graph Neural Networks in Google Maps // Proceedings of the 30th ACM International Conference on Information & Knowledge Management. Oct. 2021. P. 3767–3776.
4. Yu B., et al. Spatio-Temporal Graph Convolutional Networks: A Deep Learning Framework for Traffic Forecasting // Proceedings of the Twenty-Seventh International Joint Conference on Artificial Intelligence. July 2018. P. 3634–3640. [doi.org/10.24963/ijcai.2018/505](https://doi.org/10.24963/ijcai.2018/505).
5. Grover A., Leskovec J. Node2vec: Scalable Feature Learning for Networks // ArXiv:1607.00653 [Cs, Stat] [Электронный ресурс]. July 2016. arXiv.org. URL: <http://arxiv.org/abs/1607.00653> (дата обращения: 24.08.2022.)

## О ПОДХОДАХ К ПОСТРОЕНИЮ СИСТЕМЫ НАКОПЛЕНИЯ И ОБРАБОТКИ ДАННЫХ ПРОИЗВЕДЕНИЙ ХУДОЖЕСТВЕННОЙ ЦЕННОСТИ

**Л.В. Рудикова-Фронхёфер, В.П. Сакута**

*Гродненский государственный университет имени Янки Купалы,  
ул. Ожешко, 22, 230023, г. Гродно, Беларусь  
lada.rudikowa@gmail.com, vadim10sakuta@gmail.com*

В статье приводятся основные теоретические и практические аспекты системы, предназначенной для сбора и анализа произведений художественной ценности. Описывается процесс построения универсальной системы, приводится характеристика приложения и ключевые аспекты проектирования.

**Ключевые слова:** Веб-приложение; анализ данных; система; произведения художественной ценности; общая архитектура; модель данных; модель функций.

## ABOUT APPROACHES TO BUILDING A SAVINGS SYSTEM AND PROCESSING OF THE DATA WORKS OF ARTISTIC VALUE

**L.V. Rudikova-Fronhoefer, V.P. Sakuta**

*Yanka Kupala State University of Grodno,  
Ozheshko str., 22, 230023, Grodno, Belarus,  
lada.rudikowa@gmail.com, vadim10sakuta@gmail.com*

The article presents the main theoretical and practical aspects of the system designed to collect and analyze works of artistic value. The process of building a universal system is described, the characteristics of the application and key aspects of design are given.

**Keywords:** Web-application; data analysis; system; artwork; general architecture; data model; functions model.

### **Введение**

Различные программные разработки в предметных областях приобретают всю большую актуальность. Такие приложения, прежде всего, позволяют решать различные научно-исследовательские, промышленные, социально-культурные, а также бизнес-задачи [1–5]. В рассматриваемой статье предлагается специализированная Интернет-система для сбора, хранения и обработки данных историко-художественного наследия.

Отметим, что разработка единого программного обеспечения, способного обрабатывать произведения искусства является на текущем этапе задачей достаточно сложной. Поэтому в рамках предлагаемой системы будут затронуты лишь произведения художественной ценности, в частности, картины. Это позволит получить набор универсальных подходов для разработки систем такого профиля, который можно будет распространить на создание более широкого класса систем, связанных со сбором и анализом данных произведений искусства и исторической ценности.

Основные пользователи разрабатываемого программного обеспечения – профессиональные историки и искусствоведы, исследователи, связанные с произведениями художественной ценности, а также, агентства, галереи и частные коллекционеры, которые заинтересованы в получении максимально достоверной информации.

## **1. Методология исследования / теоретические основы**

Для решения поставленной задачи необходимо спроектировать общий план работы системы, взаимодействия её составных частей между собой, составить концептуальную модель базы данных и составить требования, предъявляемые к готовой системе.

В качестве источника данных будут выступать информация о произведениях художественной ценности. Кроме того, ведущую роль в системе играют пользователи системы, которые будут работать с информацией, используя веб-интерфейс системы и средства для управления данными.

В качестве основного метода исследования выступает структурная методология проектирования, а также объектно-ориентированный анализ.

Итак, в современном мире живопись является наиболее популярным видом изобразительного искусства. На данный момент нет универсального программного обеспечения, которое могла бы полностью предоставлять необходимую информацию, статистические данные об авторах и их работах, а также производить необходимый расширенный анализ произведений художественной ценности.

Отметим, что предлагаемая универсальная система предполагает сложный и расширяемый функционал, в силу чего информация по конкретным модулям будет предоставляться последовательно. Кроме того, предполагается, что данные будут добавляться из разных источников, необходимая информация в которых представлена в разном



виде, поэтому задача по анализу имеющихся данных, требует большого количества времени.

Для просмотра базовой информации об авторах и их работах, а также получения минимальных возможностей для поиска данных в системе можно работать в качестве незарегистрированного пользователя.

Для получения расширенных возможностей системы пользователь обязан зарегистрироваться и указать требуемые сведения: e-mail, логин и пароль. Отметим, что пользователи системы обладают различными привилегиями. На рисунке 1 представлена диаграмма вариантов использования, которая отражает необходимые функции для поддержки работы модуля системы, связанной с произведениями художественной ценности.

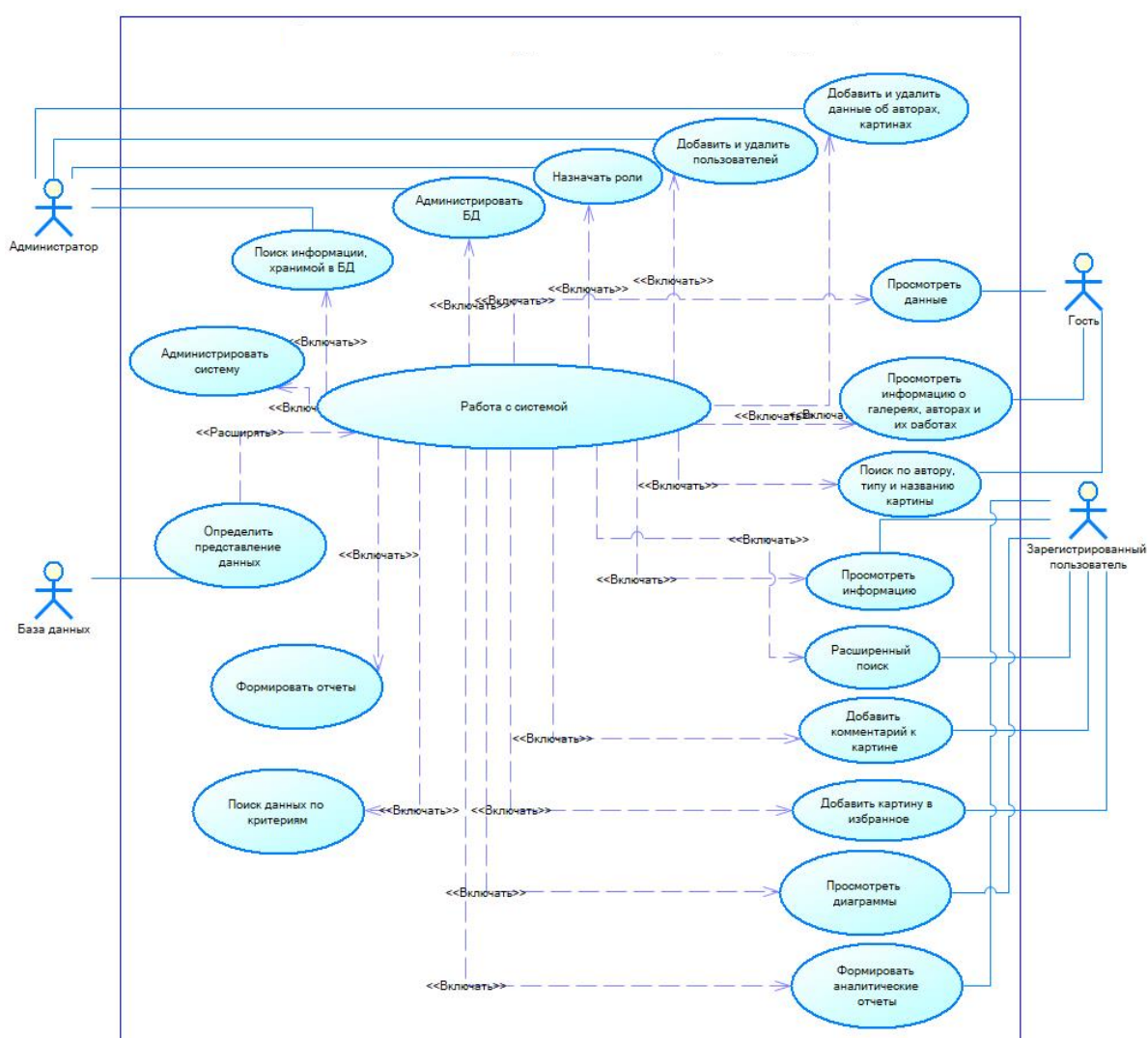


Рисунок 1 – Диаграмма вариантов использования модуля системы, связанной с произведениями художественной ценности

Основными пользователями системы являются: Администратор, Зарегистрированный пользователь и Гость.

Для получения модели данных используется структурная методология и общие принципы концептуального проектирования [6, 7]. Выделяются сущности системы, определяются ограничения на данные, ограничения целостности и пользовательские ограничения.

Разрабатываемый Интернет-ресурс должен накапливать, хранить и обрабатывать информацию по запросу исследователя. Прежде всего, проектируемая система должна содержать информацию о тех объектах, которые находятся либо в частных коллекциях, либо в музеях. Основными объектами системы являются исследуемые образцы (произведения художественной ценности). В силу этого, система будет хранить расширенную информацию о них, которая отражает следующие аспекты: название объекта, его описание, тип, категорию, жанр, информацию об авторе художественного произведения, фотографии объекта и некоторые другие сведения. На этапе создания концептуальной модели (рисунок 2) данных уточнены основные сущности уже существующей универсальной системы.

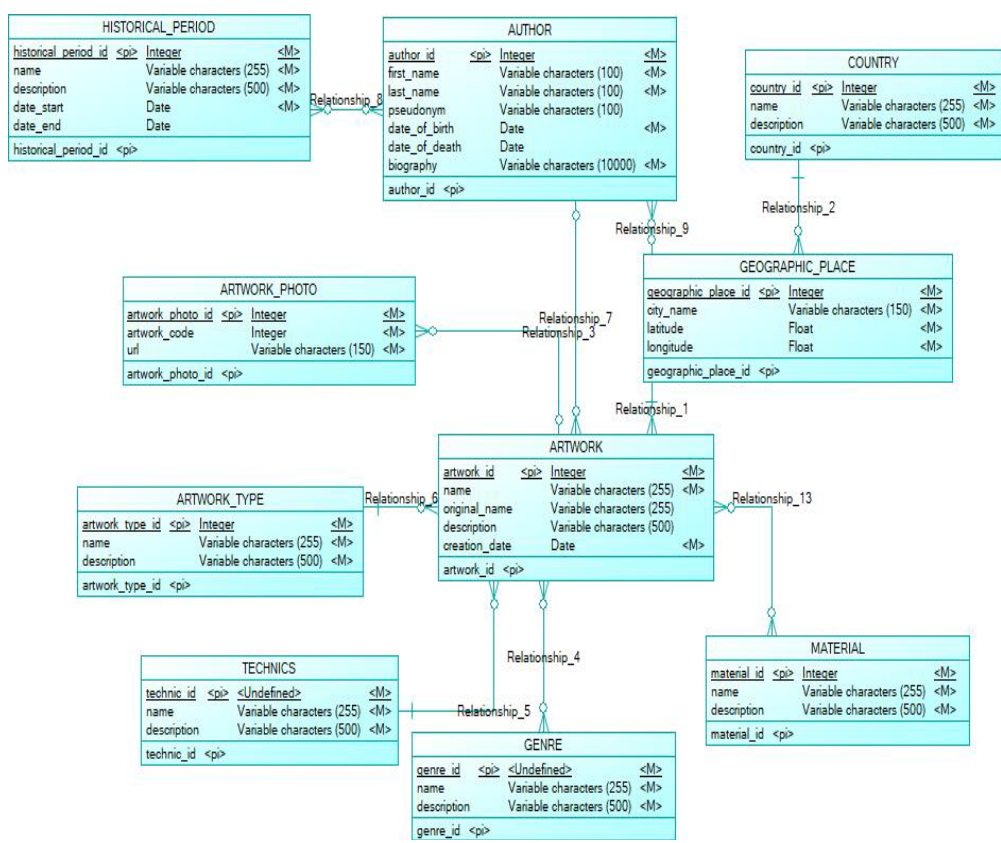


Рисунок 2 – Фрагмент концептуальной модели данных, связанный с исследованием произведений художественной ценности

## 2. Результаты и их обсуждение

Для универсальной Интернет-системы обработки данных произведений художественной ценности были подобраны следующие инструменты разработки: язык программирования JavaScript, программная платформа Node.js (веб-фреймворк Express); реляционная база данных MySQL; библиотека ReactJS для реализации SPA; готовый набор веб-компонентов React-Bootstrap; Redux – для управления состоянием веб-приложения. Для разработки системы была выбрана монолитная архитектура. Разрабатываемое приложения является клиент-серверным. На самом нижнем уровне находится база данных, в которой хранится вся информация о произведениях художественной ценности, а также пользовательские данные. На уровне бизнес-логики находятся контроллеры и внутренние сервисы по взаимодействию с БД. Прикладной уровень содержит набор конечных точек (endpoints), через которые клиентские приложения могут осуществить доступ к данным, используя HTTP запросы. Таким образом, приложение придерживается RESTful архитектуры, предоставляя API клиентскому приложению.



Рисунок 4 – Слайдер с художниками

### Заключение

В рамках исследования был предложен подход для разработки универсальной системы, объединяющей актуальную информацию об авторах и их работах из доступных источников, которая позволит формировать статистические диаграммы и аналитические отчеты, а также

визуализировать необходимые данные в наиболее удобном виде (рисунок 4).

### **Библиографические ссылки**

1. Cory Althoff. The Self-Taught Programmer: The Definitive Guide to Programming Professionally. New York: Triangle Connection LLC, 2016. 302с.
2. Eric Freeman, Elisabeth Robson, Bert Bates, Kathy Sierra. Head First Design Patterns: A Brain-Friendly Guide. New York: O'Reilly Media, 2004. 694с.
3. Robert C. Martin. Clean Code: A Handbook of Agile Software Craftsmanship. New York: Prentice Hall, 2008. 646с.
4. Mityagin S.A. City Information Modeling: Designing a Conceptual Data Model // Electronic Governance and Open Society: Challenges in Eurasia: papers from the 7th International Conference, EGOSE 2020, St. Petersburg, Russia, November 18–19, 2020 / ed.: A. Chugunov [et al.]. Springer, 2020. P. 219–231.
5. Рубаков С.В. Современные методы анализа данных // Управление наукой и наукометрия. 2008. № 7. С. 165–176.
6. Рудикова Л.В. Об общей архитектуре универсальной системы хранения и обработки данных практико-ориентированной направленности // Системный анализ и прикладная информатика. Мн.: БНТУ, 2017. № 2. С. 12–19.
7. Рудикова Л.В. Проектирование баз данных / Учебное пособие для студентов высш. учеб. заведений по специальностям «Программное обеспечение информационных технологий», «Экономическая кибернетика», «Прикладная математика (научно-педагогическая деятельность)», «Информационные системы и технологии (в экономике)». Минск: ИВЦ Минфина, 2009. 352 с.

## ИНФОРМАЦИОННАЯ СИСТЕМА УЧЕТА ИСТОЧНИКОВ ИОНИЗИРУЮЩЕГО ИЗЛУЧЕНИЯ, ЯДЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ И РАДИОАКТИВНЫХ ОТХОДОВ

**С.Н. Сытова, В.В. Гавриловец, А.П. Дунец,  
А.Н. Коваленко, С.В. Черепица**

*Институт ядерных проблем Белгосуниверситета,  
ул. Бобруйская 11, 220006, г. Минск, Беларусь, [sytova@inp.bsu.by](mailto:sytova@inp.bsu.by)*

Рассмотрены цели, задачи и алгоритмы, лежащие в основе создания информационной системы учета источников ионизирующего излучения, ядерных материалов и радиоактивных отходов для предприятий и организаций Республики Беларусь.

**Ключевые слова:** Свободное программное обеспечение; источники ионизирующего излучения; ядерные материалы; система учета; информационная система.

## INFORMATION SYSTEM FOR ACCOUNTING OF SOURCES OF IONIZING RADIATION, NUCLEAR MATERIAL AND RADIOACTIVE WASTE

**S.N. Sytova, V.V. Haurilavets, A.P. Dunets,  
A.N. Kavalenka, S.V. Charapitsa**

*Institute for Nuclear Problems, Belarusian State University,  
st. Bobruiskaya 11, 220006, Minsk, Belarus, [sytova@inp.bsu.by](mailto:sytova@inp.bsu.by)*

The goals, tasks and algorithms underlying the creation of an information system for accounting for sources of ionizing radiation, nuclear material and radioactive waste for enterprises and organizations of the Republic of Belarus are considered.

**Keywords:** Free software; sources of ionizing radiation; nuclear materials; accounting system; information system.

### **Введение**

Для эффективной реализации функций регулятора в области ядерной и радиационной безопасности, которым является Департамент по ядерной и радиационной безопасности Министерства по чрезвычайным ситуациям Республики Беларусь (Госатомнадзор), в 2016–2020 гг. разработана и внедрена Интеллектуальная информационная система сотрудника Госатомнадзора для обеспечения контроля (надзора) в области ядерной и радиационной безопасности на основе фреймворка eLab [1]. Эта система

(ИИСН ГАН или eLab-Control) разработана в рамках задания 1-02 ГНТП «Интеллектуальные информационные технологии» и содержит Модуль №1 контроля (надзора) за обеспечением безопасности при сооружении, вводе в эксплуатацию и эксплуатации Белорусской АЭС, Модуль №2 по контролю (надзору) за радиационной безопасностью источников ионизирующего излучения, Модуль №3 учета и контроля ядерных материалов и радиоактивных отходов [2]. Эксплуатация ИИСН ГАН подтвердила корректность функционирования внедренного программного продукта, его устойчивость и надежность в работе.

Данная статья посвящена обзору проводимых работ по созданию на базе системы eLab-Control информационной системы учета источников ионизирующего излучения (ИИИ), ядерных материалов (ЯМ), а также радиоактивных отходов (РАО) для внедрения на предприятиях и в организациях Республики Беларусь. Такая система должна обеспечить ведение учета ИИИ, ЯМ и РАО в соответствии с требованиями законодательства Республики Беларусь и Международного агентства по атомной энергии (МАГАТЭ) с возможностью автоматизированной передачи данных по учету ИИИ, ЯМ и РАО в информационную систему Госатомнадзора.

## **1. Основания для создания системы**

Согласно Соглашению от 14 апреля 1995 года между Республикой Беларусь и МАГАТЭ о применении гарантий в связи с договором о нераспространении ядерного оружия (INFCIRC/495), в государственной системе учета и контроля ЯМ Республики Беларусь учету и контролю подлежит ядерный материал массой более 0 грамм плутония, урана (обедненного, обогащенного, природного) и тория. Данные элементы широко используются не только в различных ядерных установках и реакторах эксплуатирующих организаций (ЭО), таких как Белорусская АЭС, институт "ОИЭЯИ – Сосны" НАН Беларуси, но и в небольших количествах в различных приборах медицинской техники, транспортных контейнерах, в составе контрольно-измерительной аппаратуры, радиоизотопных дымовых извещателей и т.д. В Республике Беларусь организаций, работающих с таким оборудованием, достаточно много.

Что касается пользователей ИИИ в Республике Беларусь, то число таких предприятий и организаций составляет порядка двух с половиной тысяч. Общее число различных ИИИ (закрытых, открытых), генерирующего ИИИ и содержащего обедненный уран оборудования равно нескольким десяткам тысяч. Используемые ИИИ и ЯМ с течением времени автоматически переходят в категорию РАО, которые с

соблюдением прописанных в нормативных документах процедур должны быть переданы на захоронение.

Причем нужно понимать, что организации-пользователи могут кардинально отличаться друг от друга – иметь в своем распоряжении от нескольких штук до сотен и тысяч источников, находящихся в эксплуатации как годами, так и передаваемых на баланс других организаций почти ежедневно (в случае их производства). Также следует помнить о различной потенциальной опасности ИИИ, что влияет на ведение их учета.

На уровне эксплуатирующих организаций и организаций с ЯМ малых количеств, организаций-пользователей ИИИ в Республике Беларусь программное обеспечение (ПО) по учету ИИИ, ЯМ, РАО даже в одной организации представляет собой разрозненные, не связанные между собой программные продукты, разработанные в разное время разными производителями на разных платформах. Зачастую – это просто документация, появляющаяся в процессе работы, которая набирается силами сотрудников организации в офисных приложениях Microsoft Office, и, как показывает практика, которая может сохраняться в организации просто в распечатанном на бумаге виде.

Программное обеспечение по учету для ЭО отличается от ПО для других организаций и от ПО национального ядерного регулятора – Госатомнадзора – обязательным наличием в своем составе лабораторной информационной системы. ПО регулятора ее не содержит, но включает большие блоки, реализующие контролирующие функции в области ядерной и радиационной безопасности.

Набор необходимых журналов по учету на уровне предприятий и организаций и на уровне Госатомнадзора отличается. Все такие организации в требуемые сроки должны представлять в Госатомнадзор необходимую информацию на бумажных носителях. Далее сотрудники Госатомнадзора вводят полученные на бумажных носителях данные в свою информационную систему. Очевидна необходимость автоматизации данного процесса, когда организации присылают необходимые данные в формате, пригодном для автоматического импорта в ИИСН ГАН.

Унификация и использование одного программного продукта для ведения учета ИИИ и ЯМ в большом количестве организаций позволяет автоматизировать процесс подачи данных этих организаций в Госатомнадзор, что увеличивает прослеживаемость и достоверность данных, а также снижает вероятность аномалий (обнаруженных недостатков) материалов, ошибок в учетных и отчетных документах,

повреждений, нарушений порядка производства, использования и т.д.) в учете ИИИ, РАО, ЯМ и повышает контроль за ними.

## **2. Требования к ПО**

Создаваемое ПО должно базироваться на современных компьютерных технологиях и оригинальном белорусском программном обеспечении на основе свободного программного обеспечения (СПО). Достоинства СПО и недостатки проприетарного ПО применительно к задачам разработки учета источников ионизирующего излучения, ядерного материала и радиоактивных отходов для предприятий и организаций Республики Беларусь рассматриваются авторами в [1, 2]. Использование СПО снимает множество формальных и технических препятствий для сертификации создаваемой информационной системы.

Фреймворк eLab, на основе которого создана ИИСН ГАН (eLab-Control) [1], – это система клиент-серверной архитектуры, работающая под управлением операционных систем Windows и Linux на основе СПО: Debian GNU/Linux, Web-server Apache, сервер баз данных Firebird, сервер приложений PHP. Работа в системе осуществляется через Web-интерфейс в многопользовательском режиме с разделением прав доступа посредством стандартных браузеров: Mozilla Firefox, Google Chrome и др.

В свое время выбор оригинальной белорусской разработки для создания такой сложной системы как ИИСН ГАН был обоснован необходимостью и возможностью строгого контроля над отечественными разработчиками, в случае необходимости оперативной доработки и дальнейшего развития ПО в соответствии с запросами и потребностями национального регулятора в области ядерной и радиационной безопасности. Понятно, что такой сложный программный продукт, как фреймворк eLab, должен постоянно активно развиваться в соответствии с мировыми тенденциями в области информационных технологий.

Система по учету ИИИ и РАО, передаваемых на захоронение после использования ИИИ и ЯМ, содержит информацию, которая определена в Законе Республики Беларусь от 18 июня 2019 г. № 198-3 «О радиационной безопасности», Указе Президента Республики Беларусь 5 апреля 2021 г. № 137 «О регулировании деятельности в области использования атомной энергии и источников ионизирующего излучения», Постановлениях Министерства по чрезвычайным ситуациям Республики Беларусь от 19 октября 2020 г. № 42 «Об утверждении норм и правил по обеспечению ядерной и радиационной безопасности», от 21 сентября 2021 г. № 64 «О требованиях к составу и содержанию документов, обосновывающих обеспечение ядерной и радиационной



безопасности», от 13 апреля 2020 г. № 16 «Об учете и контроле источников ионизирующего излучения» и других документах.

### 3. Реализованные алгоритмы

Для эффективной реализации создаваемой Информационной системы учета ИИИ, ЯМ, РАО для предприятий и организаций Республики Беларусь в рамках фреймворка eLab разработаны алгоритмы формирования записи произвольного формата в базе данных в СУБД Firebird с использованием инструмента «дерево» и инструмента «атрибуты». Они позволяют осуществить импорт данных в ИИСН ГАН с предприятия. Разработаны и реализованы алгоритмы повышения производительности ядра системы с использованием библиотеки jQuery. Для обеспечения максимально быстрой обработки данных на стороне клиента (в контексте браузера) разработаны алгоритмы на основе библиотеки Tabulator. Разработаны новые элементы интерфейса информационной системы, например, кнопка «Дублировать», оптимизирована работа с инструментом «Дерево». Создан прототип информационной системы на примере данных по радиоактивным отходам (РАО) УП «Экорес».

Структура журналов и справочников для БД по ИИИ и РАО соответствует Постановлению Министерства по чрезвычайным ситуациям Республики Беларусь № 16 от 13 апреля 2020 г.

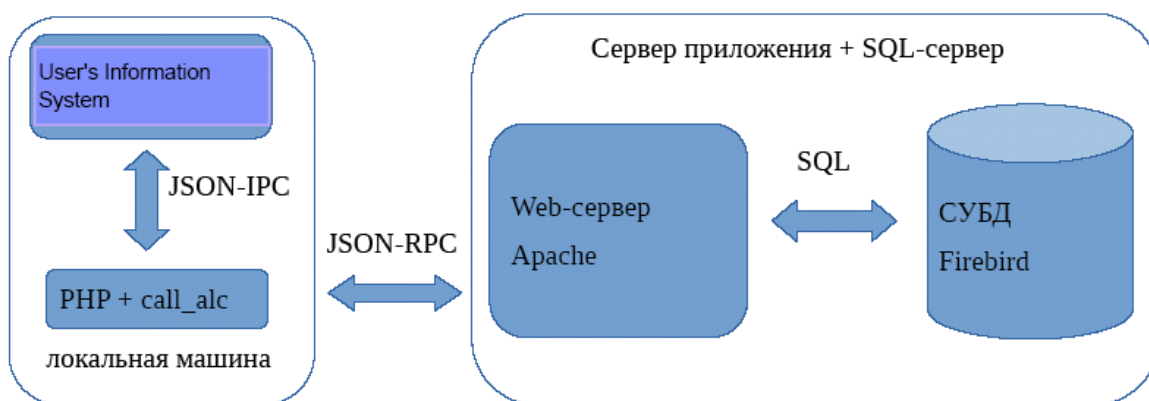


Рисунок – Общая схема взаимодействия в рамках сценария передачи данных

Также разработаны алгоритмы использования единого прикладного протокола JSON-RPC в рамках создаваемой информационной системы учета для облегчения подключения и взаимодействия существующих пользовательских информационных систем (возможно, систем обработки данных), которые используются на разных этапах учета ИИИ и РАО, с

создаваемой системой, которая являясь веб-системой, использует протокол JSON-RPC (Remote procedure call) для взаимодействия пользовательской части веб-приложения (frontend) с серверной частью (backend). На рисунке приведена общая схема взаимодействия в рамках разработанного сценария передачи данных из пользовательской информационной системы с использованием протокола JSON-IPC (Interprocess communication) в создаваемую систему, работающую на Web-сервере Apache и СУБД Firebird.

### **Заключение**

Развитие фреймворка eLab показало, что он может быть использована для решения разнообразных задач из разных сфер деятельности и различных отраслей знаний. Эффективно организованный учет ЯМ, ИИИ, РАО способствует обеспечению безопасности и минимизации чрезвычайных ситуаций и аварий (аномалий) с данными материалами. Также он гарантирует надежность и достоверность цифровой информации по ЯМ, ИИИ, РАО. Унификация ведения учета и создание системы учета в области ядерной и радиационной безопасности в Республике Беларусь, состоящей из программного обеспечения национального регулятора и программного обеспечения по учету ИИИ, ЯМ и РАО на уровне организации-пользователя ИИИ и организации с ЯМ малых количеств, а в перспективе и эксплуатирующих организаций, будет способствовать повышению эффективности государственного управления.

Работа выполняется в рамках задания 1.8.2. подпрограммы «Цифровые технологии и космическая информатика» государственной программы научных исследований «Цифровые и космические технологии, безопасность человека, общества и государства» на 2021-2025 годы.

### **Библиографические ссылки**

1. Sytova S. Information tool for multifarious scientific and practical research // Engineering of Scintillation Materials and Radiation Technologies. Springer Proceedings in Physics. 2019. № 227. P. 281–292. DOI: 10.1007/978-3-030-21970-3.
2. Sytova S., Charapitsa S., Dunets A., Kavalenka A. Belarusian software for nuclear material accounting at the level of regulatory body // Nuclear Physics and Atomic Energy. 2021. № 22(4). P. 400–408. DOI: 10.15407/jnpae2021.04.400.

ГЕОИНФОРМАТИКА  
И ДИСТАНЦИОННОЕ  
ЗОНДИРОВАНИЕ  
ЗЕМЛИ

## ANALYSIS AND VISUALIZATION OF NUMERICAL RESULTS OF SURFACE FOREST FIRES MODELING

**D.V. Barovik, V.B. Taranchuk**

*Belarusian State University, 4 Niezalieznasci Avenue, Minsk 220030, Belarus*

Corresponding author: [taranchuk@bsu.by](mailto:taranchuk@bsu.by)

The problem of computer modelling of the spread of surface forest fires in a twodimensional formulation is considered. The results of numerical experiments investigating possible scenarios of how fire spreads in different directions and its behaviour near fuelbreaks are presented. Several qualitative differences in geometry and dynamics of temperature density maps and oxygen concentration stream plots are determined and illustrated with graphics for various shapes and sizes of fuelbreaks and wind velocities.

**Keywords:** surface forest fire; wildfire; fire front dynamics; fuelbreak shape; fuelbreak size; wind velocity; software; oxygen concentration stream plot.

### Introduction

The influence of forest fires on the ecology and the environment is well known. It has negative social and economic consequences ([1]). In the territories of many regions, emergency situations caused by forest fires occur at regular intervals, and at the same time, the success in their prevention and extinguishing does not increase. Therefore, it is important to search for new solutions, technologies to reduce the intensity and duration of fires. The development of mathematical, computer models of forest fires began in the middle of the last century and continues throughout the world nowadays ([2]).

In most of the computer models, the process of forest fire propagation is described and analyzed only for homogeneous environments. However, in reality, a homogeneous distribution of forest fuel (mosses, litter, grasses, shrubs, trees, etc.) is extremely rare. It is known that some observed effects of forest fires are caused precisely by heterogeneity. In this work, the features of forest fires spread in case of the inclusion of fuelbreaks [3–4] of various shapes and sizes are modelled, visualized, and discussed.

Forest fires are a multiscale phenomenon both in space and time. The article ([5]) suggests three scales: flame, wildfire, and fire regime. We can define the triangle: (Topography/Forest Fuel/Weather).

Most of the currently used computer models of forest fires, as a rule, set as their ultimate goal the answer to the question, what are the velocities and directions of the spread of forest fires at the macro level. At this scale, the velocity is determined by comparing the positions of the fronts of burned forest

regions at successive time points. The novelty of this work is the emphasis on the study of not only the areas of burnt vegetation, but also on related factors and causal processes that can be detected in specific areas. Here we study the dynamics of the appearance (or loss) of gases, changes in their position and temperature. Physicochemical processes of combustion and pyrolysis, heating and evaporation of liquids from wood micropores, convective and buoyancy-driven flow of gases, thermal radiation, and other factors are taken into account. At the same time, emphasis is placed on the method of analysis and interpretation of results implemented by the use of cognitive graphics, which makes it possible to establish new qualitative features of the processes. By visualizing the oxygen concentration gradient lines superimposed over the temperature isolines and the density distribution of combustible vegetation, it is possible to recognize trends in the movement of fire fronts on a smaller scale. It becomes possible to determine the influence of such factors as the presence, size, and shape of fuelbreaks, and wind velocities on the speed and direction of the fire front.

In the presented research, the theoretical model of professor A.M. Grishin is used. It is considered to be the most complete mathematical description of the spread of fires in forests and peat bogs. After the publication of the mentioned monograph, many researchers ([4–6]), including the authors of this work, use Grishin’s descriptions as a basis and modify them for practical use [7], ensuring that the specific conditions of the territories and climate are taken into account.

According to the existing reviews [2], mathematical (computer) models of forest fires are usually classified as physical, semi-empirical (including statistical), and simulation. The authors of this article use a physical model describing processes in the form of a system of partial differential equations of mathematical physics – the mathematical model of forest fires spread described in detail in [8–9]. In some aspects, the tools used are special: modelling and visualization are performed in the computer algebra system *Wolfram Mathematica*, the results are partly stored in a relational database, partly in files. The implemented numerical methods are almost traditional, but we use adaptable grids both in space and in time.

## **1. Summary of the main results of numerical experiments**

During a discussion session at CSIST’22 congress the authors of this work will demonstrate animations and video materials illustrating the dynamics of fire front spread, the evolution of scalar and vector digital fields of characteristics calculated in the model. Here we note just the most important conclusions which are identified during the analysis of experiments results [9–11].

**Modelling the influence of glade sizes.** Mathematical model considers the options for the development of fires on areas of a forest with the uniform density of forest fuel with inclusions in which there is no forest combustible material – round glades of various sizes.

Small glades have an area of 2.25 square meters, the medium size is 4.5 square meters (twice as large), and large is 18 square meters, i.e., four times the area of the middle glade.

Calculations are held at an equilibrium wind speed at the middle of the flame height  $V = 1.5 \text{ m / s}$  for three different sizes of fuelbreaks. The geometry differs only in the area of the clearings. The contour of the boundaries of the fuelbreaks and the positions of their centers relative to the combustion centre are the same for all three options. The distributions are rendered at the same points in time.

The results can be interpreted as follows. During the first stage, the line of the fire contour breaks after meeting the glades. In the second stage, the fire “goes around” the glades. Fire propagation stops in the direction opposite to the direction of the wind. In the direction of the wind and across (perpendicular) to the direction of the wind, independent flanks meet together and the fire continues to spread as a united front. There is an evident difference in the front configurations after overcoming fields of different sizes. During the second stage the “upper front” began to move upward and to the direction opposite to the wind direction.

Using vectors, the software visualizes stream plots that illustrate current flow directions for oxygen concentrations. Note that only the directions are significant, the relative lengths of the vectors do not indicate the magnitude of the rate of change in concentration. The vectors are shown only in the fire zone, in areas not affected by the fire, the values of the simulated gas concentrations and temperatures are constant, the gradient is zero.

Let’s note the features of the results. During the second stage (at times 140 and 195) “middle” streamline runs from right to left through the centre of the “left” fuelbreak. However, when the size of each fuelbreak increased, the corresponding “middle” streamline passes “below” the centre of the glade. This effect can be interpreted by the fact that there is no glade at the bottom (contrary to the top) and the process of combustion (disappearance of oxygen) in above and below areas does not occur symmetrically.

Let’s point out a general pattern. Because combustion (increase in temperature) is a process inextricably linked with a decrease in oxygen concentration, then near the combustion fronts [5], oxygen stream plots are collinear with the directions of movement of the edges of the fire.

### **Modelling the influence of fuelbreak forms on forest fire processes.**

These particular series of computational experiments are intended to demonstrate the difference in the behavior of a forest fire depending on the shape of the glades [10] encountered in the path of the fire: rectangles, squares, and circles.

Please note that the difference is in the shapes of fuelbreaks, but the areas are the same. The time points shown in the figures also coincide. The calculations were carried out at an equilibrium wind speed at the middle of the flame height  $V = 1.5$  m/s.

The following interpretation of the results seems to be justified. While passing the glades, the fire front breaks into independent parts, which go around them. In the direction opposite to the wind speed the propagation stops. Along the wind direction and “perpendicularly” to it, the autonomous parts of the fire front close again, and the fire spreads as a united front. There is a noticeable difference in the resulting configuration of the front isotherms after overcoming different forms of glades. The question of whether these differences will grow in time, or whether the fronts will take the same configuration, requires a separate study.

Let us note the differences in the dynamics of the fire, which are noticeable when analyzing the stream plots. At the time of final stage of process, in the case of square and circle fuelbreaks, the stream plots are directed from right to left. However, for rectangular fuelbreaks, this direction is not observed in the evolution of oxygen concentration. Apparently, this is because the left front of the fire is “more closed” in comparison with the cases considered.

**Taking into account the influence of wind speed.** The influence of the wind speed on the nature of the forest fire spread is discovered. In the performed computational experiments, in terms of geometry, the case of circular fuelbreaks of “small” size is considered. In addition to the calculation for the wind speed  $V = 1.5$  m/s, we provide the results of two additional series of calculations, which differ only by the wind speeds  $V$ , which are equal to 1 and 2 meters per second, respectively. Result for  $V = 1$  m/s is of particular interest. At low wind speeds, fire fronts overcome the glades in all directions, including the direction against the wind. It should also be noted that the width of the burning line in the direction of the wind is narrower than on the flanks, and in the rear this width is maximum. At time of concluding stage of process, it is noticeable that the point of the minimum oxygen concentration is shifted to the right (to the direction of the wind), relative to the centre of the initial fire occurrence. The most likely reason is the influence of convective transport due to wind force.

## **2. Discussion and future research**

The results presented illustrate the dynamics of the distributions of temperatures and bulk density of combustible forest materials. In general, the developed computer model calculates the distributions of six variables, which make it possible to estimate, in particular: the amount of released water vapour, the formation of polluting gases, coal, and ash.

It should be noted that due to the complexity of the calculations, the use of this computer model in real-time is impossible. At the same time, since all the results obtained in computational experiments are recorded into the database, the collections of typical process scenarios are automatically filled with the appropriate means of the software complex. Intelligent data processing is possible [12], including the creation of electronic catalogues, the introduction of identifiers-classifiers of scenarios for calculating the development of fires in terms of attribution to typical territories and climatic conditions. The corresponding catalogues of representative scenarios can be used in conjunction with semi-empirical models [13].

The main direction of the software package improvement will be the addition of tools with clustering and neural network functions, their application in the preprocessing of initial distributions data, and interpretation of calculation results. Special attention will be paid to recommendations and presentation of options for using artificial intelligence tools [14] for the following tasks: a) creation of test cases for training a neural network based on the database of numerical results of forest fires propagation; b) neural network usage for prediction in real-time the propagation velocity of the fire contour depending on the categories of territories, climatic conditions, density of distribution of forest vegetation; c) classification of forest areas into categories (density of forest fuel material, or its absence, moisture content, height of the forest canopy and other characteristics) using satellite or aerial images.

### **Conclusion**

Using computer modelling tools, we estimated the influence of each of the following factors on the speed and direction of fire propagation: a) the presence or absence of fuelbreaks in the fire path; b) several shapes of fuelbreaks; c) the area of the fuelbreaks; d) wind velocities and direction.

The lines of oxygen concentration gradients in forest fire regions are calculated and visualized. The detected features of their configuration near the fuelbreaks are discussed.

Many computational experiments have been carried out, and the database with forest fires modelling results has been accumulated. The future research directions including the use of neural network tools are outlined.



## References

1. Dvornik A., Shamal N., Bachura Y., Seglin V., Korol R., Kurilenko R., et al. Post-fire redistribution of <sup>137</sup>Cs and algal communities in contaminated forest soils in Belarus // *Journal of Environmental Radioactivity*. 2020. № 227. P. 106505. DOI: 10.1016/j.jenvrad.2020.106505.
2. Sullivan A. Wildland surface fire spread modelling. (In 3 parts) // *International Journal of Wildland Fire*. 2009. № 18(4). P. 349–368. DOI: 10.1071/WF06143, arXiv: 0706.3074.
3. Antonov D., Zhdanova A., Kuznetsov G., Kopylov N., Khasanov I., Shlegel, N.. Characteristics of the flying of forest combustible materials upstream of a fire barrage under the action of an air flow // *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*. 2020. № 93(1). P. 114–121. DOI: 10.1007/s10891-020-02097-5.
4. Perminov V., Marzaeva V. Mathematical modeling of crown forest fire spread in the presence of fire breaks and barriers of finite size // *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. 2020. № 56(3). P. 332–343. DOI: 10.1134/S0010508220030107.
5. Frangieh N., Accary G., Morvan D., Meradji S., Bessonov O. Wildfires front dynamics: 3D structures and intensity at small and large scales // *Combustion and Flame*. 2020. № 211. P. 54–67. DOI: 10.1016/j.combustflame.2019.09.017.
6. Kuleshov A.A., Myshetskaya E.E., Yakush S. E. Simulation of forest fires based on a two-dimensional three-phase model // *Journal of Physics: Conference Series*. 2019. № 1336(1). P. 012002. DOI: 10.1088/1742-6596/1336/1/012002.
7. Barovik D., Taranchuk V. Mathematical modelling of running crown forest fires // *Mathematical Modelling and Analysis*. 2010. № 15(2). P. 161–174. DOI: 10.3846/1392-6292.2010.15.161-174.
8. Barovik D., Korzyuk V., Taranchuk V. K obosnovaniyu matematicheskikh modelej nizovyh lesnyh pozharov // *Trudy instituta matematiki*. 2013. № 21(1). P. 3–15.
9. Barovik D.V., Taranchuk V.B. Tools for the analysis and visualisation of distributions and vector fields in surface forest fires modelling. *Journal of the Belarusian State University // Mathematics and Informatics*. 2022. №2. P. 82–93. DOI: 10.33581/2520-6508-2022-2-82-93.
10. Barovik D., Taranchuk V. Computer model, examples of analysis of landscape and meteorological factors affecting the dynamics of surface forest fires // *Economics. Information technologies*. 2020. № 47(3). P. 610–622. DOI: 10.18413/2687-0932-2020-43-3-610-622 (in Russian).
11. Barovik D.V., Taranchuk V.B. Computer model, examples of analysis of the spread of ground forest fires // *Problems of physics, mathematics and technics*. 2020. № 4(45). P. 113-120.
12. Taranchuk V. Tools and examples of intelligent processing, visualization and interpretation of geodata // *Journal of Physics: Conference Series*. 2020. № 1425. P. 012160. DOI: 10.1088/17426596/1425/1/012160.
13. Pavlova A., Rubtsov S., Telyatnikov I. Using cellular automata in modelling of the fire front propagation through rough terrain // *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*. 2021. № 579. P. 012104. DOI: 10.1088/1755-1315/579/1/012104.
14. Wu Z., Wang B., Li M., Tian Y., Quan Y., Liu J. Simulation of forest fire spread based on artificial intelligence // *Ecological Indicators*. 2022. № 136. P. 108653. DOI: 10.1016/j.ecolind.2022.108653.

## ОБРАБОТКА ИЗОБРАЖЕНИЙ ГИБРИДНЫМИ НЕЙРОННЫМИ СЕТЯМИ

**В.В. Ганченко<sup>1</sup>, А.А. Дудкин<sup>1</sup>, А.В. Инютин<sup>1</sup>, Е.Е. Марушко<sup>1</sup>,  
М.М. Камиллов<sup>2</sup>, Ш.Х. Фазылов<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*Объединенный институт проблем информатики НАН Беларуси,  
Минск, Беларусь e-mail: [avin@lsi.bas-net.by](mailto:avin@lsi.bas-net.by)*

<sup>2</sup>*Научно-инновационный центр информационно-коммуникационных технологий при  
Ташкентском университете информационных технологий имени Мухаммада аль-  
Хорезми, Ташкент, Узбекистан*

Приводится обзор гибридных нейросетевых методов и архитектур, предназначенных для обработки и анализа изображения дистанционного зондирования Земли: нечетких нейронных сетей и нейронных сетей с гибридной архитектурой.

**Ключевые слова:** нечеткие нейронные сети; гибридные нейронные сети; дистанционное зондирование Земли.

## CLASSIFICATION OF OBJECTS IN IMAGES OBTAINED USING SPACECRAFT AND UAV

**V.Ganchenko<sup>a</sup>, A.Doudkin<sup>a</sup>, A.Inyutin<sup>a</sup>, Ya.Marushko<sup>a</sup>,  
M.Kamilov<sup>b</sup>, S.Fazilov<sup>b</sup>**

<sup>a</sup>*United Institute of Informatics Problems of NAS of Belarus, Minsk, Belarus*

<sup>b</sup>*Scientific and Innovative Center of Information and Communication Technologies  
at Tashkent University Of Information Technologies Named After Muhammad Al-  
Khwarizmi, Tashkent, Uzbekistan*

The report describes an overview of hybrid neural network methods and architectures designed to process and analyze images of Earth remote sensing: fuzzy neural networks and neural networks with a hybrid architecture.

**Keywords:** fuzzy neural networks; hybrid neural networks; remote sensing of the Earth.

### Введение

Основные трудности, связанные с построением нечетких отношений и организацией нечеткого вывода в задачах обработки изображений дистанционного зондирования Земли (ДЗЗ), связаны с определением функций принадлежности условной части правил, а также с выбором решающего правила из совокупности кандидатов. Для решения подобных проблем возможно объединение средств нечеткого логического вывода и нейросетевого подхода в рамках гибридных систем. В их основу заложена

идея использования в качестве механизма вывода аппарата нечеткой логики и способность нейронных сетей к обучению, что выражается в подстройке параметров, соответствующих функциям принадлежности. В связи с этим гибридные нейронные сети не только используют априорную информацию, предоставленную экспертом, но и способны приобретать новые знания, при этом оставаясь логически прозрачными [1].

Главная особенность сети с самоорганизацией на основе конкуренции – это очень высокая скорость обучения, многократно большая, чем у сетей, тренируемых с учителем. Их недостатком считается сложность отображения пар обучающих данных  $(x, d)$ , поскольку сеть с самоорганизацией, выполняющая обработку только входного вектора  $x$ , не обладает свойствами хорошего аппроксиматора, присущими многослойному персептронному или сети радиально-базисных функций. Очень хорошие результаты удается получить при объединении самоорганизующегося слоя и персептронной сети, что позволяет совместить способности сети Кохонена к локализации и возможности аппроксимации, свойственные многослойному персептронному. Подобная структура далее будет называться гибридной сетью. Она представляет собой каскадное подключение слоя Кохонена и персептронной сети.

### **1. Гибридные нейросетевые структуры в идентификации объектов ДЗЗ**

Идентификация объектов ДЗЗ – одна из самых фундаментальных и сложных проблем компьютерного зрения. Она направлена на обнаружение объектов на реальных изображениях из большого количества установленных категорий. Предварительно обработанное изображение подвергается сегментации на основе энтропии, которая отделяет важные области изображения, чтобы различать отдельные входения. Задача классификации решается предлагаемой гибридной оптимизированной плотной сверточной нейронной сетью (Hybrid Optimized Dense Convolutional Neural Network, HODCNN). Основная цель этой структуры – помочь в точном распознавании отдельных элементов из собранных входных кадров. Производительность предлагаемой системы оценивается путем сравнения ее с существующими методологиями машинного и глубокого обучения. Экспериментальные данные показывают, что предлагаемая структура имеет точность обнаружения 0,9864. Это выше, чем у существующих методов. В результате предлагаемая модель обнаружения объектов превосходит другие существующие методы [2].

Классификация земного покрова по изображениям ДЗЗ является сложной задачей из-за высоких различий внутри классов, низкого сходства между классами и типов вариаций изображений. Авторы [3] предлагают каскадную остаточную расширенную сеть (cascaded residual dilated network, CRD-Net) для классификации земного покрова с использованием изображений с очень высоким пространственным разрешением для решения этих проблем. Предлагаемая гибридная сеть основана на концепции кодера-декодера с блоком пространственного внимания, чтобы направлять сеть по обучаемым отличительным признакам в сочетании с использованием функции потерь на внутренних слоях для улучшения процесса обучения. Кроме того, каскадный остаточный расширенный модуль увеличивает рецептивное поле сети для дальнейшего обогащения многоконтекстных функций, тем самым улучшая результирующий дескриптор функции. Обширные экспериментальные результаты показывают, что предложенная CRD-Net превзошла современные методы, достигнув точности 90,73 и 90,51 % в наборе данных ISPRS Potsdam и ISPRS Vaihingen соответственно.

Для решения проблемы идентификации авторы [4] разработали новый метод классификации сельскохозяйственных культур, сочетающий выбор оптимальных признаков (Method Based on Optimal Feature Selection, OFSM) с гибридными сетями сверточной нейронной сети и случайного леса (Convolutional Neural Network and Random Forest, CNN-RF) для многовременных изображений оптического дистанционного зондирования. Для извлечения признаков данных ДЗЗ с меньшими затратами времени было предложено использовать OFSM с результатами, сравниваемыми с двумя традиционными методами выбора признаков: выбор важности признаков случайного леса (random forest feature importance selection, RF-FI) и исключение рекурсивных признаков случайного леса (random forest recursive feature elimination, RF-RFE).

На основе получения эффективной информации об особенностях для дальнейшего повышения точности классификации сельскохозяйственных культур были разработаны две гибридные сети CNN-RF, чтобы использовать преимущества одномерной свертки (Conv1D) и группы визуальной геометрии (Visual Geometry Group, VGG) со случайным лесом (RF) соответственно. На основании выбранных оптимальных признаков с помощью OFSM для сравнения были протестированы четыре сети: Conv1D-RF, VGG-RF, Conv1D и VGG. Conv1D-RF достиг самого высокого уровня точности на уровне 94,27 % по сравнению с VGG-RF (93,23 %), Conv1D (92,59 %) и VGG (91,89 %). Это указывает на то, что метод Conv1D-RF с оптимальным вводом признаков обеспечивает эффективное и действенное

представление временных рядов для многовременной классификации типов культур.

Предлагаемый в работе [5] метод идентификации областей по данным ДЗЗ разделен на четыре процесса. Используется полностью сверточная сеть для создания всех областей-кандидатов, содержащих возможные области объекта. Этот процесс позволяет избежать исчерпывающего поиска входных изображений. Затем признаки всех регионов-кандидатов извлекаются структурой сверточной нейронной сети на основе быстрых регионов. В конце, чтобы повысить точность поиска области, используется итеративный алгоритм регрессии ограничивающей рамки для нормализации таких рамок, в которых области содержат объекты-кандидаты. Полученные результаты показывают, что предложенный метод поиска области постоянно достигает лучших результатов независимо от типа тестируемых изображений. Предлагаемый метод демонстрирует лучшую надежность при работе со сложной контекстной семантической информацией и фоном.

Обнаружение мелких объектов, таких как транспортные средства, на спутниковых снимках является сложной задачей. Авторы [6] представляют гибридную глубокую сверточную сеть (Hybrid Deep Convolutional Neural Networks, HDNN), основанную на разделении карт последнего сверточного слоя и слоя максимального объединения DNN на несколько блоков с переменным размером рецептивного поля или размером поля максимального объединения, чтобы позволить HDNN извлекать переменный масштаб. Сравнительные экспериментальные результаты показывают, что предложенная HDNN значительно превосходит традиционную DNN при обнаружении транспортных средств.

Различные гибридные структуры для задачи распознавания образов исследованы в [7]. Для этого выделены гибридные алгоритмы распознавания объектов, которые могут быть созданы для распознавания объекта на изображении. В то время как алгоритмы каскада Хаара, локального бинарного шаблона (Local Binary Pattern, LBP) и градиентов, ориентированных на гистограмму (Histogram Oriented Gradients, HOG), используются для обнаружения объектов, алгоритмы сверточной нейронной сети (CNN) и глубокой нейронной сети (DNN) используются для классификации. В результате были разработаны шесть гибридных структур, таких как каскад Хаара+CNN, LBP+CNN, HOG+CNN и каскад Хаара+DNN, LBP+DNN, HOG+DNN. В данном исследовании шесть гибридных алгоритмов были проанализированы с точки зрения процента успеха и времени, а затем сравнены друг с другом. Для обучения и тестирования этих гибридных алгоритмов использовался набор данных Microsoft COCO (Common

objects in context.). Точность распознавания объектов CNN составила 76,33 %. Точность распознавания объектов с помощью каскада Хаара+CNN, одного из рекомендуемых авторами гибридных методов, достигает 78,6 %, что выше, чем у CNN и других гибридных методов.

В статье [8] предлагается гибридная нейронная сеть с полной загрузкой (Fully Spiking Hybrid Neural Network, FSHNN) для энергоэффективного и надежного обнаружения объектов на платформах с ограниченными ресурсами. Архитектура сети основана на Spiking Convolutional Neural Network с использованием моделей нейронов с утечкой-интеграцией-возгоранием (leaky-integrate-fire neuron models). Модель сочетает в себе неконтролируемое обучение пластичности, зависящей от времени (Spike Time-Dependent Plasticity, STDP), с методами обучения обратного распространения (spatio-temporal backpropagation, STBP), а также использует отсев Монте-Карло для оценки ошибки неопределенности. FSHNN обеспечивает лучшую точность по сравнению с детекторами объектов на основе DNN, будучи более энергоэффективным. Он также превосходит эти детекторы объектов при обработке зашумленных входных данных и хуже размеченных обучающих данных с меньшей ошибкой неопределенности.

Авторами [9] рассмотрена гибридная глубокая сверточная нейронная сеть (HDCNN), разработанная для обнаружения людей и объектов на видеокдрах. Сеть HDCNN представляет собой CNN с оптимизацией методом императорских пингвинов (Emperor Penguin Optimization, EPO). Здесь EPO используется для увеличения системных параметров структуры CNN. Для проверки предлагаемой методологии рассматриваются три различных типа баз данных. Предлагаемый метод обоснован статистическими измерениями, такими как точность, прецизионность, полнота и F-мера соответственно.

## **Заключение**

В ходе проведенного анализа гибридных нейросетевых методов для идентификации объектов на изображениях ДЗЗ были изучены различные структуры обработки данных, основанные на нейронных сетях. Были определены существующие подходы к реализации гибридной архитектуры за счет использования нечеткой логики и объединения разных структур для решения поставленной задачи. Также было установлено, что подобные структуры могут повысить точность получаемых результатов при решении идентификации объектов на изображениях ДЗЗ.

Работа выполнена при поддержке БРФФИ (договор № Ф22УЗБ-068 от 04 мая 2022 г.).

## Библиографические ссылки

1. Гридина Н.В., Евдокимов И.А., Солодовников В.И. Построение гибридных нейронных сетей с использованием элементов нечеткой логики // Искусственный интеллект и принятие решений. 2019. № 2. С. 91–97.
2. Beri V. Hybrid Optimized Deep Convolution Neural Network based Learning Model for Object Detection [Electronic resource]. URL: <https://arxiv.org/pdf/2203.00869.pdf>. Date of access: 08.07.2022.
3. A hybrid deep convolutional neural network for accurate land cover classification / N. Wambugu [et al.] // Intern. J. of Applied Earth Observation and Geoinformation. 2021. Vol. 103. 11 p.
4. Crop Classification Method Based on Optimal Feature Selection and Hybrid CNN-RF Networks for Multi-Temporal Remote Sensing Imagery / S. Yang [et al.] // Remote Sens. 2020. № 12(19), 3119. 23 p.
5. Region Search Based on Hybrid Convolutional Neural Network in Optical Remote Sensing Images [Electronic resource] / Sh. Yin, [et al.] // Intern. J. of Distributed Sensor Networks. 2019. 12 p. URL: <https://journals.sagepub.com/doi/full/10.1177/1550147719852036>. Date of access: 08.07.2022.
6. Vehicle Detection in Satellite Images by Hybrid Deep Convolutional Neural Networks [Electronic resource] / X. Chen [et al.] // Geoscience and Remote Sensing Letters, IEEE, 2014. URL: <http://www.nlpr.ia.ac.cn/2013papers/gjhy/gh72.pdf>. Date of access: 08.07.2022.
7. Taspinar Y.S. Object Recognition with Hybrid Deep Learning Methods and Testing on Embedded Systems / Y.S. Taspinar, M. Selek // Intern. J. of Intelligent Systems and Applications in Engineering IJISAE. 2020. № 8(2). P. 71–77.
8. Chakraborty, B. A Fully Spiking Hybrid Neural Network for Energy-Efficient Object Detection / B. Chakraborty, X. She, S. Mukhopadhyay // IEEE Trans Image Process. 2021. Vol. 30. P. 9014–9029.
9. Mukilan P. Human and object detection using Hybrid Deep Convolutional Neural Network [Electronic resource] / P. Mukilan, W. Semunigus // Signal, Image and Video Processing. URL: <https://link.springer.com/article/10.1007/s11760-022-02151-0>.

# КЛАССИФИКАЦИЯ ОБЪЕКТОВ НА ИЗОБРАЖЕНИЯХ, ПОЛУЧЕННЫХ С ПОМОЩЬЮ КОСМИЧЕСКИХ АППАРАТОВ И БПЛА

В.В. Ганченко<sup>1</sup>, А.А. Дудкин<sup>1</sup>, А.В. Инютин<sup>1</sup>, Е.Е. Марушко<sup>1</sup>,  
В.Г. Писаренко<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Объединенный институт проблем информатики НАН  
Беларуси, Минск, Беларусь  
e-mail: [avin@lsi.bas-net.by](mailto:avin@lsi.bas-net.by)*

<sup>2</sup>*Институт кибернетики имени В. М. Глушкова НАН Украины, Киев, Украина*

Для идентификации и классификации объектов на изображениях, полученных с помощью съемочных средств БПЛА и орбитального базирования, предложена нейросетевая модель классификации, основанная на использовании автоэнкодера и построенная по архитектуре ансамбля многослойных перцептронов. Использование предложенной модели для классификации на четыре класса: «Пожар», «Задымление», «Расительность» и «Строения», позволяет достичь точности классификации выше 99 %.

**Ключевые слова:** автоэнкодер; ансамбль многослойных перцептронов; классификация.

## CLASSIFICATION OF OBJECTS IN IMAGES OBTAINED USING SPACECRAFT AND UAV

V.Ganchenko<sup>a</sup>, A.Doudkin<sup>a</sup>, A.Inyutin<sup>a</sup>, Ya.Marushko<sup>a</sup>, V.Pisarenko<sup>b</sup>

<sup>a</sup>*United Institute of Informatics Problems of NAS of Belarus, Minsk, Belarus*

<sup>b</sup>*V.M. Glushkov Institute of Cybernetics of the National  
Academy of Sciences of Ukraine, Kiev, Ukraine*

This report presents a neural network model for identifying and classifying objects in images obtained using UAV and orbital-based imaging equipment. The model is based on the use of an autoencoder and is built on the architecture of an ensemble of multilayer perceptrons. The model has an accuracy above 99% when classified into four classes: "Fire", "Smoke", "Vegetation" and "Building".

**Keywords:** autoencoder; an ensemble of multilayer perceptrons; classification.

### Введение

Мониторинг земной поверхности с целью обнаружения стихийных бедствий и оценки их последствий, контроля природопользования и экологической безопасности является актуальной задачей. Ряд стихийных бедствий, таких как паводковые наводнения, лесные пожары и засухи, аварии на техногенных объектах, затрагивают территории приграничных стран.



Для своевременного обнаружения на конкретном участке территории фактов возникновения и развития неблагоприятных явлений, ситуаций и стихийных бедствий необходимо с целью скорейшей ликвидации этих последствий использовать информацию от разных источников: космические снимки, данные аэросъемки, включая полученные с беспилотных летательных аппаратов (БПЛА), а также специальные данные от наземных средств мониторинга, включая мобильные.

Задачей, решаемой представленными нейросетевыми моделями, является выделение параметров объектов на изображениях для их идентификации и классификации. Идентификация и классификация объектов осуществляются для участков исходных цветных изображений размером 128 x 128 пикселей. Идентификация и классификация участка изображения разделяются на два этапа:

- 1) выделение информативных признаков, позволяющих идентифицировать содержимое изображения;
- 2) выбор класса, которому согласно выделенным признакам максимально соответствует анализируемый участок изображения.

## **1. Нейросетевая модель АВТОЭНКОДЕРА**

Основой рассматриваемого подхода к выделению признаков является использование нейросетевой модели автоэнкодера, который формирует дескриптор изображения в виде массива из 512 элементов (числа с плавающей запятой). Получаемый массив нормируется по L2-норме.

Автоэнкодеры состоят из двух частей: энкодера  $g$  и декодера  $f$ . Энкодер переводит входной сигнал в его представление (дескриптор)  $h = g(x)$ , а декодер восстанавливает сигнал по его коду  $x = f(h)$ . Автоэнкодер, изменяя  $g$  и  $f$ , стремится выучить тождественную функцию  $x = f(g(x))$ , минимизируя функционал ошибки  $L(x, f(g(x)))$ . При этом семейства функций энкодера  $g$  и декодера  $f$  ограничены так, чтобы автоэнкодер был вынужден отбирать наиболее важные свойства сигнала.

Кодировщик представляет собой набор из трех сверточных блоков с понижением размерности и одного полносвязного слоя. Каждый сверточный блок состоит из двух сверточных слоев (например, Conv2D\_1.1 и Conv2D\_1.2 для первого блока) и слоя понижения пространственной размерности (например, MaxPooling2D\_1 для первого блока). Сверточные слои выполняют функцию выделения признаков заданного размера и формирования карт признаков, по одной на каждый фильтр. Полносвязный слой выполняет функцию преобразования полученного набора карт признаков в одномерный вектор чисел с плавающей запятой.

Декодировщик также состоит из одного полносвязного слоя и трех сверточных блоков с повышением размерности. Каждый сверточный блок состоит из слоя повышения пространственной размерности (например, `UpSampling2D_2` для первого блока) и двух сверточных слоев (например, `Conv2D_4.1` и `Conv2D_4.2` для первого блока).

Многозональное изображение может быть представлено в виде трехмерного куба, две оси которого имеют пространственную, а третья – спектральную размерность (непосредственно связанную с излучательной и отражательной характеристиками объекта).

Для получения дескриптора участка исходного цветного изображения размером  $128 \times 128$  пикселей достаточно подать это изображение на вход автоэнкодера и получить выходные значения указанного скрытого слоя.

Т.к. вектор размерностью 512 отобразить не представляется возможным, то для вывода данных был использован алгоритм понижения размерности – метод главных компонент. С помощью указанного метода размерность дескрипторов была уменьшена с 512 до двух, что уже может быть отображено на плоскости.

## 2. Вариативные информативные признаки

Текстурные характеристики выражают разность значений интенсивности соседних пикселей изображения, при этом значения оценок этой разности отличаются для различных типов подстилающей поверхности. Примеры вычисленных текстурных характеристик приведены в таблице 1. Для оценки текстуры используются текстурные характеристики Харалика.

Таблица 1 – Примеры вычисленных текстурных характеристик

| <i>Объект</i>   | <i>Характеристика</i> |                    |
|-----------------|-----------------------|--------------------|
|                 | <i>ASM</i>            | <i>Contrast</i>    |
| Дым             | $5.262 \cdot 10^{-3}$ | 4.249              |
| Лес             | $2.215 \cdot 10^{-4}$ | $2.681 \cdot 10^2$ |
| Строения        | $3.915 \cdot 10^{-4}$ | $1.560 \cdot 10^2$ |
| Очаг возгорания | $2.594 \cdot 10^{-3}$ | $1.656 \cdot 10^2$ |

Построение дескрипторов объектов основано на использовании комбинированных информативных признаков многоспектральных изображений. Важной характеристикой признаков является вариативность, которая оценивается их текстурными характеристиками. Значения текстурных характеристик собираются в матрицы, которые преобразовываются к целочисленным значениям в диапазоне от 0 до 255. Полученная матрица пред-

ставляет собой полутоновое изображение, которое позволяет сравнить значения оценок текстурных характеристик для различных участков изображений.

При выделении информативных признаков дополнительно добавляется цветовая информация, инвариантная к масштабу и поворотам изображения. Для этого для каждого обрабатываемого участка изображения строится его поканальная гистограмма. При этом для сокращения объема данных применяется квантование значений яркости не на 256 уровней, а на 16. Далее полученные гистограммы объединяются в один массив размером 48 элементов: [16 значений синего канала, 16 значений зеленого канала, 16 значений красного канала]. Полученный массив также нормируется по L2-норме.

Таким образом, результатом идентификации является массив из 560 элементов, который и используется для классификации.

### 3. Обучение моделей

Для классификации разработана нейросетевая модель, состоящая из двух многослойных перцептронов, объединенных в виде нейросетевого ансамбля. Каждый перцептрон в отдельности анализирует входной массив данных, после чего выходные слои формируют взвешенное общее решение по классу входных данных. Сама модель реализована на языке Python с использованием библиотеки Keras [1].

Для обучения модели классификации использовалась функция потерь (loss) – categorical cross entropy; обучающая и валидационная выборки – 4000 и 800 изображений (не включая аугментацию); обучающий алгоритм Adam [2] с параметрами  $lr = 0,0001$ ,  $beta\_1 = 0,9$ ,  $beta\_2 = 0,999$ ,  $epsilon = 1 \cdot 10^{-8}$ ,  $decay = 0,0$ . Результирующая точность на валидационной выборке – 99,19 %.

### 4. Тестирование

Для тестирования использовалась видеосъемка с БПЛА пожара на нефтебазе. Пример кадра приведен на рис. 1. Также использовались данные Sentinel Hub: съемки спутника Landsat 8 в диапазоне, полученном комбинацией красного, синего, зеленого и панхроматического каналов, и в тепловом инфракрасном диапазоне [3]. Разрешение цветных каналов составляет 30 м на пиксел, разрешение панхроматического канала – 15 м на пиксел, разрешение теплового инфракрасного канала – 100 м на пиксел.

Классификация осуществляется на четыре класса: «Пожар», «Задымление», «Растительность» и «Строения». Пример изображений для каждо-

го класса приведен на рис. 2. На рис. 3 показан пример отображения 16 дескрипторов (для четырех различных групп изображений, включающих различные типы поверхностей).

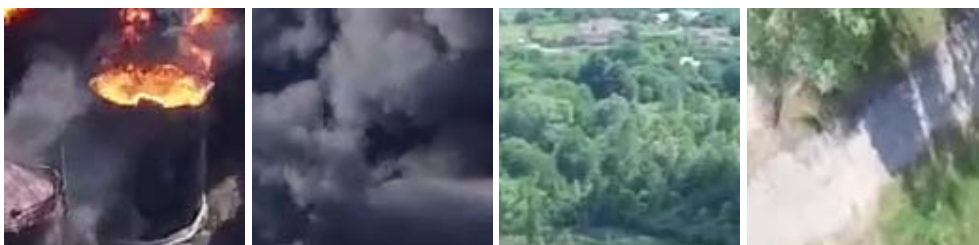
Для расширения набора данных, используемых для обучения моделей, были использованы следующие аугментации (в случайных комбинациях):

- поворот изображения на углы 0, 90, 180 и 270°;
- отражение по вертикали и горизонтали;
- масштабирование на случайную величину из диапазона [0,9; 2].

Тестирование осуществлялось на валидационной выборке. При этом оценивалась точность как для каждого класса в отдельности, так и для всех классов в целом (таблица 2). Для оценки качества классификации были вычислены соответствующие значения точности (precision), полноты (recall) и F1-меры [4]. Общая точность составила 99,19 %. Наибольшее количество ошибок возникало на участках, соответствующих границе задымления и пожара, а также в случае горения строений.



Рисунок 1 – Пример кадра видеосъемки БПЛА



а)

б)

в)

г)

Рисунок 2 – Примеры участков изображений для идентификации и классификации на классы:

а) «Пожар»; б) «Задымление»; в) «Растительность»; г) «Строения»

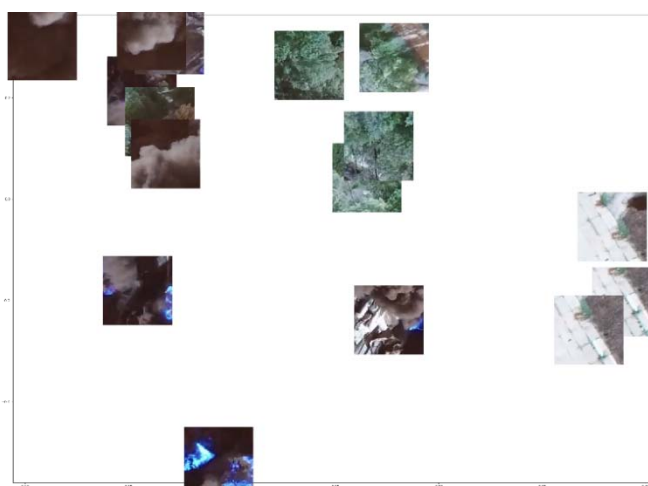


Рисунок 3 – Расположение двумерных проекций дескрипторов на плоскости в виде миниатюр

Таблица 2 – Результаты тестирования сегментаторов и значения полноты и F1-меры

| <i>Классы</i>  | <i>Точность</i> | <i>Полнота</i> | <i>F1-мера</i> |
|----------------|-----------------|----------------|----------------|
| Задымление     | 0,869           | 1,000          | 0,930          |
| Растительность | 0,997           | 0,981          | 0,989          |
| Строения       | 1,000           | 0,848          | 0,918          |
| Пожар          | 0,989           | 0,994          | 0,991          |

### **Заключение**

Для идентификации и классификации объектов на изображениях, полученных с помощью съемочных средств БПЛА и орбитального базирования, предложена нейросетевая модель классификации, основанная на использовании оригинального автоэнкодера и построенная по архитектуре ансамбля многослойных персептронов.

Дескрипторы представляют собой массив из 512 чисел с плавающей запятой. В качестве основы для построения дескрипторов использован нейросетевой автоэнкодер, архитектура которого зависит от модальности и цветности исследуемых данных. Отличительными чертами разработанных моделей является применение как многомодальных и разноцветных данных, так и дополнительных информативных признаков вариативности данных. Для оценки вариативности данных использованы текстурные признаки Харалика, построенные для локальных участков изображения. При выделении информативных признаков дополнительно добавляется

цветовая информация, инвариантная к масштабу и поворотам изображения и основанная на построении поканальных гистограмм.

Использование предложенной модели для классификации на четыре класса: «Пожар», «Задымление», «Растительность» и «Строения» – позволяет достичь точности классификации выше 99 %.

Работа выполнена при поддержке БРФФИ (договор № Ф21УКРГ-007 от 30.04.2021).

### Библиографические ссылки

1. Keras optimizers: Adam [Electronic resource]. URL: <https://keras.io/api/optimizers/adam/> Date of access: 28.05.2022.
2. Kingma, D. P. Adam: A Method for Stochastic Optimization / D. P. Kingma, J. Ba // 3rd Intern. Conf. for Learning Representations, 7–9 May, 2015, San Diego. San Diego, 2015. Vol. 1412. P. 6980.
3. Sentinel Hub EO Browser [Electronic resource]. URL: [https://apps.sentinel-hub.com/eo-browser/?zoom=13&lat=50.20921&lng=30.23931&themeId=DEFAULT-THEME&visualizationUrl=https%3A%2F%2Fservices.sentinel-hub.com%2Fogc%2Fwms%2Fe35192f-e-33a1-41f3-b798-b755e771c5a5&datasetId=AWS\\_LOTL1&fromTime=2015-06-09T00%3A00%3A00.000Z&toTime=2015-06-09T23%3A59%3A59.999Z&layerId=1\\_TRUE\\_COLOR](https://apps.sentinel-hub.com/eo-browser/?zoom=13&lat=50.20921&lng=30.23931&themeId=DEFAULT-THEME&visualizationUrl=https%3A%2F%2Fservices.sentinel-hub.com%2Fogc%2Fwms%2Fe35192f-e-33a1-41f3-b798-b755e771c5a5&datasetId=AWS_LOTL1&fromTime=2015-06-09T00%3A00%3A00.000Z&toTime=2015-06-09T23%3A59%3A59.999Z&layerId=1_TRUE_COLOR). Date of access: 28.05.2022.
4. Sokolova, M. Beyond accuracy, F-score and ROC: a family of discriminant measures for performance evaluation / M. Sokolova, N. Japkowicz, S. Szpakowicz // Advances in Artificial Intelligence: 19th Australian Joint Conf. on Artificial Intelligence, Hobart, 4–8 Dec., 2006. Hobart, 2006. P. 1015–1021.

ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ  
И РАСПРЕДЕЛЕННАЯ  
ОБРАБОТКА ДАННЫХ

## СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ РАСЧЕТА ЗАДАЧ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ С УРАВНЕНИЕМ ВЛАГОПЕРЕНОСА

**Н.Г. Абрашина-Жадаева**

*Беларусь, Минск zhadaeva282@gmail.com*

Обсуждается новый класс численных методов для решения задач математической физики, возникающих в теории влагопереноса, в том числе и учитывающих фрактальные свойства среды. Исследована корректность метода построения разностных задач в классе достаточно гладких решений рассматриваемых уравнений.

**Ключевые слова:** Уравнение влагопереноса; корректность; априорная оценка.

## IMPROVEMENT OF NUMERICAL METHODS FOR CALCULATING MATHEMATICAL PHYSICS PROBLEMS WITH THE HEAT-MOISTURE TRANSFER EQUATION

**N.G. Abrashina-Zhadaeva**

*Minsk, Belarus zhadaeva282@gmail.com*

A new class of numerical methods for solving problems of mathematical physics arising in the theory of moisture transfer, including taking into account the fractal properties of the medium, is discussed. The correctness of the method of constructing difference problems in the class of sufficiently smooth solutions of the equations under consideration is investigated.

**Keywords:** Moisture transfer equation; correctness; a priori estimation.

### **Введение**

В настоящее время имеется большое число публикаций, посвященных исследованию различных математических моделей физических процессов и их численной реализации. Мы рассматриваем модель влагопереноса, где известно, что влажность может возрастать в более сухих слоях по диффузионному закону, если среда (почва) в начальный момент времени имеет неравномерное по глубине распределение влажности. В таких условиях наблюдается, так называемый, эффект Аллера [1]. Эффект, когда направление градиента влажности почвы будет соответствовать слоям, где влажность ниже. Для описания этого явления обычно используют концентрацию трещиноватого пористого грунта. В этой связи в уравнение



влагопереноса вводится поправочный член, который в почвогрунтах учитывает его влагоперенос.

Базовая модель Аллера имеет вид:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial u}{\partial x} + \aleph \frac{\partial^2 u}{\partial t \partial x} \right),$$

где  $D = D(u)$ ,  $\aleph$  – соответственно коэффициент диффузии и коэффициент Аллена. В основе таких моделей лежат дифференциальные уравнения в частных производных и их конечно-разностные аналоги, которые хорошо себя зарекомендовали при решении больших прикладных задач. Этим и продиктовано внимание исследователей к анализу важной в приложениях задачи в аграрном секторе страны, описывающих процесс влагопереноса в средах различной структуры [1-4], и развитию численных методов решения смешанных задач математической физики, которые должны быть универсальными.

В работе для решения задачи с уравнением влагопереноса предлагаются модифицированные методы переменных направлений, основанные на аддитивном представлении оператора исходной задачи. Причем операторы расщепления обладают свойствами самосопряженности и положительной определенности [4]. Предложенные при этом разностные схемы просты в реализации позволяют проводить как последовательные, так и распараллеленные вычисления [6-9].

### 1. Постановка задачи.

В цилиндрической области  $G_T = \bar{G} \times (0, T]$ , где  $\bar{G} = G \cup \partial G$ ,  $G = \{x = (x_1, \dots, x_p), 0 < x_\alpha < l_\alpha, \alpha = 1, \dots, p\}$  –  $p$ -мерный параллелепипед с боковой поверхностью  $\partial G_T = \partial G \times [0, T]$ , будем исследовать процесс движения влаги против градиента влажности, рассматривая многомерную математическую модель влагопереноса Аллера вида:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = Lu + f(x, t), \quad x \in G, t \in (0, T], \quad (1)$$

$$u|_{\partial G_t} = 0, \quad u(x, 0) = u_0(x), \quad (2)$$

где

$$Lu = \sum_{\alpha=1}^p L_\alpha u + \aleph \frac{\partial}{\partial t} \sum_{\alpha=1}^p L_\alpha u,$$

$$L_\alpha u = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left( k_\alpha(x) \frac{\partial u}{\partial x_\alpha} \right), \quad 0 < C_1 \leq k_\alpha \leq C_2$$

$\aleph$  – коэффициент Аллера, который мал при впитывании влаги и велик при испарении [1 с.159]. Основные обозначения используем из [5].

Следуя [8,9], для (1), (2) переходим к соответствующей абстрактной задаче Коши [6-9]:

$$\frac{du}{dt} + A \left( u + \aleph \frac{du}{dt} \right) = f(t), \quad (3)$$

$$u(0) = u_0, \quad (4)$$

где  $A = \sum_{\alpha=1}^p A_{\alpha}$ ,  $A: H \rightarrow H$  - положительно определенный оператор в гильбертовом пространстве  $H$  со скалярным произведением  $(u, v) = \int_G uv dx$ , и  $A_{\alpha}$  – постоянные, самосопряженные положительно определенные операторы, порожденные дифференциальными выражениями  $-L_{\alpha}u$  и граничными условиями из (2).  $u(t) \in D(A)$ ,  $D(A)$  – область определения оператора  $A$ .

Вместо скалярного решения  $u(t)$ , рассмотрим вектор решений  $U(t) = (u_1(t), u_2(t), \dots, u_{\alpha(t)}, \dots, u_p(t))$  и перейдем к системе однотипных подзадач:

$$\frac{du_{\alpha}}{dt} + \sum_{\beta=1}^p A_{\beta}(u_{\beta} + \aleph \frac{du_{\beta}}{dt}) = f(t), \quad (5)$$

$$u_{\alpha} = u_0, \quad \alpha = 1, \dots, p, \quad (6)$$

## 2. Корректность перехода к (5), (6) и априорная оценка.

**Теорема.** *Задача (5),(6), полученная в результате перехода от (3),(4), поставлена корректно и справедлива оценка*

$$\left\| \sum_{\alpha=1}^p A_{\alpha} u_{\alpha} \right\|^2 \leq M \|f\|_2^2 + \|Au_0\|^2, \quad (7)$$

$M > 0$  – постоянная и  $u_{\alpha}(t) = u(t)$ ,  $\forall \alpha = 1, \dots, p$ .

Доказательство методологически аналогично [6-9]: пусть  $z_{\alpha} = u_{\alpha} - u$ , тогда из (5) будем иметь

$$\frac{dz_{\alpha}}{dt} + \sum_{\beta=1}^p A_{\beta}(z_{\beta} + \aleph \frac{dz_{\beta}}{dt}) = 0, \quad z_{\alpha}(0) = 0, \quad (8)$$

$$\alpha = 1, \dots, p,$$

Каждое уравнение из (8) умножим скалярно на  $A_\alpha \frac{dz_\alpha}{dt}$  и просуммируем их по  $\alpha=1, \dots, p$ , тогда получим

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha=1}^p \left( \frac{dz_\alpha}{dt}, A_\alpha \frac{dz_\alpha}{dt} \right) + \sum_{\alpha=1}^p \left( \sum_{\beta=1}^p A_\beta z_\beta, A_\alpha \frac{dz_\alpha}{dt} \right) + \\ + \varkappa \sum_{\alpha=1}^p \left( \sum_{\beta=1}^p A_\beta \frac{dz_\beta}{dt}, A_\alpha \frac{dz_\alpha}{dt} \right) = 0. \end{aligned} \quad (9)$$

В (9), учитывая, что для второго выражения в нем справедливо представление вида  $(v, \frac{dv}{dt}) = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} (v, v)$ , а первое - в силу линейности и положительной определенности оператора будет положительным, - третье представимо как  $\varkappa \left\| \sum_{\alpha=1}^p A_\alpha \frac{dz_\alpha}{dt} \right\|^2$ , получим выражение, которое после интегрирования по  $t$  от нуля до произвольного  $t^* \in ]0, T]$  будет иметь вид

$$\frac{1}{2} \left\| \sum_{\alpha=1}^p A_\beta z_\beta \right\|^2 + \varkappa \int_0^{t^*} \left\| A_\alpha \frac{dz_\alpha}{dt} \right\|^2 dt = 0,$$

Тогда в (8), следуя [8], [9], получаем  $\frac{dz_\alpha}{dt} = 0$ ,  $z_\alpha(0) = 0$ ,  $\alpha = 1, \dots, p$  и таким образом, для любых

$$t \in [0, T], z_\alpha(t) = 0, \rightarrow u(t) = u_\alpha, \alpha = 1, \dots, p.$$

Покажем, что каждая из компонент векторного решения непрерывно зависит от входных данных, т.е. от  $f(t)$ ,  $u_0$ . Для этого умножим скалярно каждое из уравнений системы (5) на  $\frac{dA_\alpha u_\alpha}{dt}$  и просуммируем по  $\alpha = 1, \dots, p$ , с первыми тремя выражения поступим, как при доказательстве корректности, а к последнему выражению применим  $\varepsilon$  - неравенство и получим

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \left\| \sum_{\alpha=1}^p A_\alpha u_\alpha \right\|^2 + \varkappa \left\| A_\alpha \frac{dz_\alpha}{dt} \right\|^2 \leq \frac{1}{4\varepsilon} \|f\|^2 + \varepsilon \left\| A_\alpha \frac{dz_\alpha}{dt} \right\|^2.$$

Положим  $2\varepsilon = \varkappa$  и проинтегрируем по  $t$  от нуля до произвольного  $t^* \in ]0, T]$  будет иметь неравенство вида

$$\left\| \sum_{\alpha=1}^p A_\alpha u_\alpha \right\|^2 \leq \frac{1}{\varkappa} \|f\|_2^2 + \|Au_0\|^2, \quad \|f\|_2^2 = \int_0^{t^*} \|f(t)\|^2 dt$$

из которого, обозначив  $\frac{1}{\varkappa} = M$ , получим оценку, которая и доказывает справедливость утверждения теоремы.

Для решения задачи (5), (6) построим модифицированные многокомпонентные схемы [9], так называемые векторно-аддитивные схемы, последовательной реализации [8], следующего вида:

$$\frac{\widehat{y}_\alpha - y_\alpha^*}{\tau} + \sum_{\beta=1}^{\alpha} A_\beta(\widehat{y}_\beta + y_{\beta t}) + \sum_{\beta=\alpha+1}^p A_\beta(y_\beta + \check{y}_{\beta t}) = f, \quad (10)$$

$$y_\alpha(0) = u_0, \quad \alpha = 1, \dots, p,$$

$$y_1^* = y_1, \quad y_\alpha^* = \frac{1}{2}(y_{\alpha-1} + y_\alpha), \quad \alpha = 2, \dots, p.$$

и параллельной реализацией [7], [8]:

$$\frac{\widehat{y}_\alpha - \tilde{y}}{\tau} + \sigma A_\alpha(\widehat{y}_\alpha + y_{\alpha t}) - \sigma A_\alpha(y_\alpha + \check{y}_{\alpha t}) + \sum_{\beta=1}^p A_\beta(y_\beta + \check{y}_{\beta t}) = f, \quad (11)$$

причем  $\sigma \geq 0,5$ ,  $\tilde{y} = \frac{1}{p} \sum_{\alpha=1}^p y_\alpha$ ,  $y_\alpha(0) = y_0$ .

Для (10), когда  $f \neq f(t)$  и для (11) доказана безусловная устойчивость алгоритмов для всех  $\tau < \tau_0$  и, например, для (10) справедлива оценка

$$\|v^{n+1}\|^2 = \sum_{\alpha=1}^p (v^{\alpha, \alpha-1}, v^{\alpha, \alpha-1}) \leq \tau^2 (1 + \tau C_0)^{-1} \left\| \sum_{\alpha=1}^p A_\alpha y_\alpha(0) - f(0) \right\|^2,$$

$$v^{\alpha, \alpha-1} = y_\alpha - y_{\alpha-1}, \quad C_0 > 0.$$

Подробным доказательствам будет посвящена отдельная статья. С методологией исследования устойчивости и сходимости векторно-аддитивных схем вида (10), (11) можно ознакомиться, например в работах [7,8] (см. цитируемую там литературу). Наличие члена в предложенных алгоритмах вида  $\sum_{\beta=\alpha+1}^p A_\beta(y_\beta + \check{y}_{\beta t})$  не вносит дополнительных трудностей в исследования.

Аналогичные алгоритмы строятся для задачи, описывающей процесс влагопереноса в средах с фрактальной структурой. В этом случае за базовую модель принимают уравнение вида

$$\partial_{0t}^\gamma u(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial u}{\partial x} + \kappa \partial_{0t}^\gamma \frac{\partial u}{\partial x} \right), \quad 0 < \gamma \leq 1,$$

$u(x, t)$  — влажность в точках  $0 \leq x \leq l$  в момент времени  $t$ .

$\partial_{0t}^\gamma$  – регуляризованный оператор Римана – Лиувилля,  $0 < \gamma \leq 1$ , представляет собой оператор дробного дифференцирования [9].

Это модель обобщается, по образцу данной статьи, на многомерный случай. В качестве численного метода нахождения решения поставленной задачи можно выбрать, например, алгоритмы, предложенные в работах [11–14].

### **Заключение**

Результаты, представленные в работе, ориентированы на применение информационных технологий в мелиорации [4]. Предложенные методы строились на основе известных аналогов [6 - 9] и представляют собой уже усовершенствованные численные методы решения многомерных задач математической физики для конкретного типа задач и могут быть использованы для улучшения информационного обеспечения задач автоматизации управления водным режимом почвы в случае соответствующих средств дистанционного зондирования.

### **Библиографические ссылки**

1. Чудинов А.Ф. Теплофизика почвы. М.: Наука, 1976. 352.
2. Абрашина-Жадаева Н.Г., Зеленков В.И., Тимощенко И.А. Математическое моделирование физических процессов. М.: Ривш, 2022. 174 с.
3. Шхануков-Лафишев. Векторные аддитивные схемы для некоторых классов уравнений гиперболического типа. Шхануков-Лафишев М.Х., Архестова С.М., Тхамоков М.Б. // Владикавказский математический журнал. 2013. Т.15. С. 71–84.
4. Якушев В.П. Автоматизация принятия решений при орошении / В.П.Якушев, Л.В., Козырев, Ю.Р. Сигдикова и др. // Вестник российской сельскохозяйственной науки. 2015. № 5. С. 8–10.
5. Самарский А.А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1989. 161 с.
6. Жадаева Н.Г. Об одном методе разбиения области в нестационарных задачах математической физики // Дифференциальные уравнения, 1995. Т. 31(7). С. 1217–1221.
7. Жадаева Н.Г. Многокомпонентный вариант метода переменных направлений для эволюционных задач // Дифференц. уравнения, 1997, Т. 33, № 7. С. 998–1000.
8. Абрашина-Жадаева Н.Г., Романова Н.С. Многокомпонентные векторные схемы решения многомерных задач математической физики // Дифференциальные уравнения. 2006. Т. 42, №7. С. 883–894.
9. Абрашина-Жадаева Н.Г. Многокомпонентные векторные схемы расщепления в методах математической физики. Автореферат диссертации на соискание ученой степени доктора физико-математических наук. Казань, 2008. 33 с.
10. Самко С.Г., Килбас А.А., Маричев О.И. Интегралы и производные дробного порядка и некоторые их применения. Минск: Наука и техника, 1987.

11. N.Abrashina-Zhadaeva, N.Romanova. A splitting type algorithm for numerical solution of PDEs of fractional order // *Mathematical Modelling and Analysis*. 2007. № 12(4). С. 399–408.
12. Абрашина-Жадаева Н.Г., Тимощенко И.А. Конечно-разностные методы для уравнения диффузии с производными дробных порядков в многомерной области // *Дифференциальные уравнения*. 2013. Т. 49, № 7. С. 819–825.
13. Meerschaert M., Tadjeran C. Finite difference approximations for two-sided space-fractional partial differential equations // *Applied Numerical Mathematics*. 2006. V. 56, №1, С. 80–90.
14. Таукенова Ф.И., Шхануков М.Х. Разностные методы решения краевых задач для дифференциальных уравнений дробного порядка // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 2006. Т. 46, № 10. С. 1871–1881.

## МЕТОД ПАРАЛЛЕЛЬНОЙ МАТРИЧНОЙ ПРОГОНКИ С УМЕНЬШЕННОЙ РЕДУЦИРОВАННОЙ СИСТЕМОЙ

С.В. Баханович<sup>1</sup>, Н.А. Лиходед<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Институт математики НАН Беларуси,  
ул. Сурганова, 11, 220072, г. Минск, Беларусь, bsv@im.bas-net.by*

<sup>2</sup>*Белорусский государственный университет,  
пр. Независимости, 4, 220030 г. Минск, Беларусь, likhoded@bsu.by*

Предложена новая модификация алгоритма параллельной матричной прогонки. Основным отличием предлагаемой версии от известных параллельных алгоритмов матричной прогонки является наличие в возникающей редуцированной системе вдвое меньшего числа матрично-векторных уравнений. Если для исходной системы уравнений справедливы условия устойчивости метода матричной прогонки, то вычисления разработанной модификации также являются устойчивыми.

**Ключевые слова:** параллельные вычисления; матричная прогонка; устойчивость параллельной матричной прогонки.

## THE METHOD OF PARALLEL MATRIX SWEEP WITH A DECREASED REDUCED SYSTEM

S.V. Bakhanovich<sup>a</sup>, N.A. Likhoded<sup>b</sup>

<sup>a</sup>*Institute of Mathematics, National Academy of Science,  
6 Surhanava Street, Minsk 220072, Belarus, bsv@im.bas-net.by*

<sup>b</sup>*Belarusian State University,  
4 Niezalieznasci Avenue, Minsk 220030, Belarus, likhoded@bsu.by*

A new modification of the parallel matrix sweep is proposed. The main difference of the proposed version from the well-known parallel matrix sweep algorithms is the presence in the resulting reduced system of half the number of matrix-vector equations. If the stability conditions of the matrix run method are valid for the initial system of equations, then the calculations of the developed modification are also stable.

**Keywords:** parallel computing; matrix sweep; stability of parallel matrix sweep.

### Введение

Метод матричной прогонки [1] широко применяется для решения систем линейных алгебраических уравнений с блочно-трехдиагональными матрицами. Такие системы часто возникают в практических приложениях при численном решении уравнений в частных производных. Размерность систем и их блочных коэффициентов в ряде

случаев не позволяет использовать последовательные алгоритмы, поэтому нужны параллельные алгоритмы матричной прогонки, эффективные для реализации на многоядерных вычислительных системах.

Известны параллельные алгоритмы матричной прогонки, основанные на разбиении матрицы системы [2, 3]. Эти алгоритмы обобщают на случай блочно-трехдиагональных матриц идеи скалярных алгоритмов параллельной прогонки [4, 5]. Методы, основанные на разбиении матрицы, являются трехфазными. На первой фазе исходная система разбивается на части и после независимых преобразований каждой части составляется редуцированная система (блочно-трехдиагональная в блочном случае). На второй – решая редуцированную систему, находят несколько неизвестных каждой части уравнений. На третьей фазе независимо вычисляются остальные неизвестные каждой части.

В этой работе предложена новая модификация параллельной матричной прогонки, которая также является обобщением на блочный случай скалярного алгоритма параллельной прогонки [6]. Основным отличием предлагаемой версии от известных параллельных алгоритмов матричной прогонки является наличие в редуцированной системе вдвое меньшего числа матрично-векторных уравнений. Обосновано, что если для исходной системы уравнений справедливы известные условия устойчивости метода матричной прогонки, то вычисления разработанной модификации параллельной матричной прогонки являются устойчивыми.

## 1. Матричная прогонка

Пусть  $A_1, \dots, A_N, B_0, B_1, \dots, B_{N-1}, C_0, C_1, \dots, C_N$  –  $M \times M$ -матрицы,  $Y_0, Y_1, \dots, Y_N, F_0, F_1, \dots, F_N$  –  $M$ -мерные векторы. Рассмотрим блочно-трехдиагональную систему линейных алгебраических уравнений вида

$$C_0 Y_0 - B_0 Y_1 = F_0, \quad -A_i Y_{i-1} + C_i Y_i - B_i Y_{i+1} = F_i, \quad i = 1, \dots, N-1, \quad -A_N Y_{N-1} + C_N Y_N = F_N.$$

Приведем формулы матричной прогонки для решения исходной системы [1]:

- прямой ход метода прогонки – вычисление матриц  $\alpha_i$  и векторов  $\beta_i$  по формулам

$$\alpha_1 = C_0^{-1} B_0, \quad \beta_1 = C_0^{-1} f_0,$$

$$\alpha_{i+1} = (C_i - A_i \alpha_i)^{-1} B_i, \quad \beta_{i+1} = (C_i - A_i \alpha_i)^{-1} (F_i + A_i \beta_i), \quad i = 1, 2, \dots, N-1,$$

$$\beta_{i+1} = (C_i - A_i \alpha_i)^{-1} (F_i + A_i \beta_i);$$

- обратный ход прогонки – вычисление решения по формулам  $Y_i = \beta_{i+1}, Y_i = \alpha_{i+1} Y_{i+1} + \beta_{i+1}, i = N-1, \dots, 1, 0.$



## 2. Параллельная матричная прогонка, основанная на разбиении блочной трехдиагональной матрицы

Пусть дана блочно-трехдиагональная система. Разобьем эту систему, состоящую из  $N+1$  матрично-векторных уравнений, на  $K$  частей, т.е. на  $K$  блоков уравнений, где  $K$  – параметр алгоритма. Уравнения в системе будем нумеровать, начиная с нуля; для простоты изложения будем считать, что  $N+1$  нацело делится на  $K$ :  $\frac{N+1}{K}=l$ , где  $l$  – целое число. В  $k$ -й блок уравнений,  $k=0,1,\dots,K-1$ , входят  $l$  матрично-векторных уравнений, начиная с уравнения  $k\cdot l$  и по уравнение  $(k+1)l-1$  включительно. Обозначим  $s_k=k\cdot l$  номер первого уравнения в  $k$ -м блоке,  $f_k=(k+1)l-1$  – номер последнего уравнения в  $k$ -м блоке.

Независимо решить блоки уравнений не представляется возможным, так как первое и последнее уравнения блока содержит переменные, которые входят в соседние блоки. Будем называть такие переменные граничными.

Алгоритмы параллельной матричной прогонки состоят из трех фаз. На первой фазе уравнения каждого из  $K$  блоков независимо преобразуются так, чтобы можно было составить так называемую редуцированную блочно-трехдиагональную систему, содержащую только граничные неизвестные, а остальные неизвестные можно было найти, зная граничные неизвестные. На второй фазе решается редуцированная система (последовательно или параллельно). После чего на третьей фазе, используя найденные на второй фазе неизвестные, независимо вычисляются оставшиеся неизвестные.

Основным отличием предлагаемой версии от известных параллельных алгоритмов матричной прогонки является наличие в редуцированной системе  $K$ , а не  $2K$  матрично-векторных уравнений.

Пусть произведено разбиение системы на  $K$  блоков уравнений. В каждом из блоков, кроме нулевого, в первом уравнении есть ненулевые, вообще говоря, коэффициенты при неизвестных с индексами  $s_{k-1}$  и  $s_k$ ; эти же неизвестные входят также в уравнения предыдущего блока. Кроме того, в каждом блоке, кроме  $(K-1)$ -го, в последнем уравнении есть ненулевые коэффициенты при неизвестных с индексами  $s_{k+l-1}$  и  $s_{k+l}$ , которые входят также в уравнения следующего блока. Это не позволяет решать блоки уравнений независимо.

Неизвестные с индексами  $s_{k-1}$ ,  $s_k$  и  $s_{k+l-1}$ ,  $s_{k+l}$ , где  $k$  – номера внутренних блоков являются граничными. Неизвестные последнего уравнения системы также отнесем к граничным. Рассмотрим способ получения редуцированной системы, в которую для каждого  $k$  войдет уравнение отно-

сительно граничных неизвестных  $k$ -го блока уравнений  $Y_{s_k-1}$  (кроме  $k=0$ ),  $Y_{s_k+l-1}$ , и граничного неизвестного  $(k+1)$ -го блока уравнений  $Y_{s_k+2l-1}$  (кроме  $k=K-1$ ). Граничные неизвестные  $k$ -го блока  $Y_{s_k}$  и  $Y_{s_k+l}$  в редуцированную систему не входят.

Прямой ход первой фазы вычислений состоит в исключении строчными преобразованиями поддиагональных элементов в матрице каждого блока уравнений. В каждом  $k$ -м блоке исключаются все поддиагональные элементы, кроме  $-A_{s_k}$  ( $k \neq 0$ ) в первом уравнении блока (в уравнении с номером  $s_k$  исходной системы). При этом, кроме случая  $k \neq 0$ , возникнет столбец ненулевых коэффициентов при неизвестном  $Y_{s_k-1}$ , т.е. при неизвестном  $Y_{f_{k-1}}$ .

На шаге  $r$ ,  $r=s_k+1, \dots, f_k$ , преобразуется уравнение исходной системы относительно неизвестных с индексами  $r-1, r, r+1$ . Преобразованные коэффициенты-блоки будем хранить в массивах  $L_r^A$  (при неизвестном  $Y_{s_k-1} = Y_{f_{k-1}}$ ),  $L_r^C$  (при неизвестных  $Y_r$ ),  $L_r^F$  (правая часть уравнения с номером  $r$ ); коэффициенты-блоки при неизвестных  $Y_{r+1}$  есть  $-B_{r+1}$ . В случае  $k=0$  столбец, содержащий  $L_{r-1}^A$ , отсутствует.

После шага  $r=f_k$  последнее уравнение в блоке становится уравнением относительно неизвестных с индексами  $s_k-1, s_k+l-1, s_k+l$ , т.е. относительно неизвестных с индексами  $f_{k-1}, f_k, f_k+1$ ,  $k=0, 1, \dots, K-1$ . Новые массивы  $L_r^A, L_r^C, L_r^F$  будут использоваться при выполнении обратного хода первой фазы вычислений и (частично) на второй и третьей фазах.

Обратный ход первой фазы вычислений состоит в исключении строчными преобразованиями наддиагональных элементов в матрице каждого блока уравнений. Исключаются все наддиагональные элементы, кроме  $-B_{f_k-1}$  в предпоследнем уравнении блока (в уравнении с номером  $f_k-1$  исходной системы). При этом в каждом  $k$ -м блоке возникнет столбец ненулевых коэффициентов при неизвестном  $Y_{s_k+l-1}$ , т.е. при неизвестном  $Y_{f_k}$ . Возникнет также ненулевой коэффициент при неизвестном  $Y_{s_k+2l-1}$ , т.е. при неизвестном  $Y_{f_{k+1}}$ , в последнем уравнении  $k$ -го блока (кроме случая  $k=K-1$ ). Это происходит потому, что с помощью преобразованной при обратном ходе первой строки  $(k+1)$ -го блока обнуляется наддиагональный элемент в последнем уравнении  $k$ -го блока.

Из последних уравнений блока, т.е. из уравнений с номером  $f_k$ ,  $k=0,1,\dots,K-1$ , исходной системы, составляется редуцированная блочно-трехдиагональная система относительно неизвестных  $Z_{k-1}$  ( $k \neq 0$ ),  $Z_k$ ,  $Z_{k+1}$  ( $k \neq K-1$ ), где  $Z_{k-1} = Y_{f_{k-1}}$ ,  $Z_k = Y_{f_k}$ ,  $Z_{k+1} = Y_{f_{k+1}}$ .

Рассмотрим вторую фазу вычислений. Обозначим  $-\bar{A}_k = L_{f_k}^A$ ,  $k=1,\dots,K-1$ ;  $\bar{C}_k = \bar{L}_{f_k}^C$ ,  $k=0,1,\dots,K-2$ ;  $-\bar{B}_k = L_{f_k}^B$ ,  $k=0,1,\dots,K-2$ ;  $\bar{F}_k = \bar{L}_{f_k}^F$ ,  $k=0,1,\dots,K-2$ ,  $\bar{F}_{K-1} = \bar{L}_N^F$ . Тогда, с учетом введенного обозначения  $Z_k = Y_{f_k}$  эта система примет вид

$$\begin{aligned} \bar{C}_0 Z_0 - \bar{B}_0 Z_1 &= \bar{F}_0 \quad (k=0), \\ -\bar{A}_k Z_{k-1} + \bar{C}_k Z_k - \bar{B}_k Z_{k+1} &= \bar{F}_k, \quad k=1,\dots,K-2, \\ -\bar{A}_{K-1} Z_{K-2} + \bar{C}_{K-1} Z_{K-1} &= \bar{F}_{K-1} \quad (k=K-1). \end{aligned}$$

На этапе второй фазы решается (например, методом матричной прогонки) полученная относительно  $Z_0, Z_1, \dots, Z_{K-1}$  система. Одновременно с этим можно в качестве предварительного этапа третьей фазы вычислений для каждого из  $K$  блоков независимо получать  $(L_r^C)^{-1}$ ,  $r=s_k, \dots, f_{k-1}$ .

На второй фазе алгоритма найдены  $Y_{f_0}, Y_{f_1}, \dots, Y_{f_{K-1}}$ . На третьей фазе алгоритма для каждого блока уравнений  $k$ ,  $k=0,1,\dots,K-1$ , используя найденные на второй фазе неизвестные, вычисляются оставшиеся неизвестные  $Y_r$ ,  $r=s_k, \dots, f_{k-1}$ .

Рассмотрим в блоке  $k$  преобразованные на первой фазе уравнения, не вошедшие в редуцированную систему. Перенесем в каждом уравнении с номером  $r$  известные произведения  $\bar{L}_r^A Y_{f_{k-1}}$  (кроме случая  $k=0$ ) и  $L_r^B Y_{f_k}$  в правую часть. Тогда независимо для каждого из блоков можно найти  $Y_r$ :

$$Y_r = (L_r^C)^{-1} \left( \bar{L}_{f_k}^F - \bar{L}_r^A Y_{f_{k-1}} - L_r^B Y_{f_k} \right), \quad r=s_k, \dots, f_{k-1}.$$

### 3. Устойчивость параллельной матричной прогонки с уменьшенной редуцированной системой

Говорят, что алгоритм метода матричной прогонки устойчив, если выполнено условие  $\|\alpha_i\| \leq 1$  для  $i=1,2,\dots,N$  (предполагается, что в  $M$ -мерном пространстве введена какая-либо норма). Имеет место следующее утверждение [1]: если  $C_i$ ,  $i=0,1,\dots,N$ , – невырожденные матрицы, а  $A_1,\dots,A_N$ ,  $B_0,B_1,\dots,B_{N-1}$  – ненулевые матрицы и выполнены условия  $\|C_i^{-1}A_i\| + \|C_i^{-1}B_i\| \leq 1$ ,  $i=1,\dots,N-1$ ,  $\|C_0^{-1}B_0\| \leq 1$ ,  $\|C_N^{-1}A_N\| \leq 1$ , причем хотя бы в одном из этих условий выполняется строгое неравенство, то алгоритм метода матричной прогонки устойчив.

Теорема. Если для исходной блочно-трехдиагональной системы выполнены условия устойчивости метода последовательной матричной прогонки причем хотя бы для одного уравнения, не являющегося последним в блоке, неравенство  $\|C_i^{-1}A_i\| + \|C_i^{-1}B_i\| \leq 1$  является строгим, то условия устойчивости выполняются для редуцированной системы и для всех уравнений на третьей фазе вычислений.

Таким образом, разработан и исследован с точки зрения устойчивости новый вариант метода параллельной матричной прогонки для решения систем линейных алгебраических уравнений с блочно-трехдиагональными матрицами.

#### Библиографические ссылки

1. Самарский А.А. Методы решения сеточных уравнений. М.: Наука. 1978. 592 с.
2. Акимова Е.Н. Параллельные алгоритмы решения СЛАУ с блочно-трехдиагональными матрицами на многопроцессорных вычислителях // Вестн. УГАТУ. 2011. № 15(5). С. 87–93.
3. Згировский А.А., Лиходед Н.А. Модифицированный метод параллельной матричной прогонки // Вес. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. 2019. № 55(4). С. 425–434. DOI: 10.29235/1561-2430-2019-55-4-425-434.
4. Яненко Н.Н., Коновалов А.Н., Бугров А.Н., Шустов Г.В. Об организации параллельных вычислений и “распараллеливании” прогонки // Численные методы механики сплошной среды. 1978. № 9(7). С. 139–146.
5. Austin T.M., Berndt M., Moulton J.D. A memory efficient parallel tridiagonal solver. Preprint LA-VR-03-4149. 2004. 13 p.
6. Баркалов К.А. Методы параллельных вычислений. Н. Новгород: Изд-во Нижегородского госуниверситета им. Н.И. Лобачевского. 2011. 124 с.

## ПОСТРОЕНИЕ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ПРОЦЕССОВ НА ОСНОВЕ ГЕКСАГОНАЛЬНОГО ТАЙЛИНГА

С.В. Баханович<sup>1</sup>, Н.А. Лиходед<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Институт математики НАН Беларуси,  
ул. Сурганова, 11, 220072, г. Минск, Беларусь, bsv@im.bas-net.by*

<sup>2</sup>*Белорусский государственный университет,  
пр. Независимости, 4, 220030 г. Минск, Беларусь, likhoded@bsu.by*

Разработан подход к построению вычислительных процессов для реализации алгоритмов решения сеточных задач на суперкомпьютерах с распределенной памятью. Подход использует гексагональный тайлинг. Он позволяет процессам одновременно начинать вычисления, не приводит к перекрытиям вычислений и не требует предварительного преобразования области вычислений.

**Ключевые слова:** параллельные вычисления; многопроцессорная система с распределенной памятью; гексагональный тайлинг; параллельные вычислительные процессы.

## CONSTRUCTION OF PARALLEL COMPUTATIONAL PROCESSES BASED ON HEXAGONAL TILING

S.V. Bakhanovich<sup>a</sup>, N.A. Likhoded<sup>b</sup>

<sup>a</sup>*Institute of Mathematics, National Academy of Science,  
6 Surhanava Street, Minsk 220072, Belarus, bsv@im.bas-net.by*

<sup>b</sup>*Belarusian State University,  
4 Niezalieznasci Avenue, Minsk 220030, Belarus, likhoded@bsu.by*

An approach to the construction of computational processes for implementation of algorithms for stencil computations on supercomputers with distributed memory has been developed. The approach uses hexagonal tiling, so it allows processes to start calculations at the same time, does not lead to overlapping calculations, does not require a preliminary transformation of the computational domain.

**Keywords:** parallel computing; distributed memory parallel computer; hexagonal tiling; parallel computing processes.

### Введение

Тайлинг (tiling) – выделение макроопераций для получения алгоритмов блочного типа – применяется для построения эффективных параллельных алгоритмов и для уменьшения накладных расходов на использование иерархической памяти [1]. При тайлинге производится разбиение

области вычислений (итерационного пространства) алгоритма семейства гиперплоскостей на макрооперации-тайлы.

Для возможности осуществить тайлинг часто необходимо применять предварительное аффинное преобразование алгоритма, например, скос по одной или более координат итерационного пространства.

Без скашивания циклов осуществляется так называемый тайлинг с перекрытием вычислений (*overlapped tiling*) [2]. Тайлинг с перекрытием (тайлинг с дублированием некоторых вычислений), организованный на одном или нескольких итерационных (или временных) слоях, позволяет все вычисления расширенных тайлов производить без обращения к результатам вычислений других тайлов этих слоев. Основным преимуществом получаемых зернистых алгоритмов считается возможность одновременно начинать выполнение операций многих тайлов, в то время как после скашивания происходит, как правило, разгон и торможение вычислений. Недостатком такого подхода являются накладные расходы, часто значительные, связанные с дублированием вычислений.

Гексагональный тайлинг (*hexagonal tiling*) – это тайлинг, при котором макрооперации-тайлы в плоскости первых двух координат имеют очертания (форму) шестиугольников [3–5]. Тайлинг осуществляется без перекрытий вычислений и приводит к минимально возможному числу зависимостей между тайлами по первым двум направлениям. Гексагональный тайлинг позволяет получить макрооперации-тайлы (гексагональные тайлы), причем по координатам, начиная с третьей, производится традиционный тайлинг (в итоге получается так называемый гибридный тайлинг) или по этим координатам тайлинг вообще не производится. Гибридный тайлинг успешно применяется для реализации сеточных задач на графических ускорителях [6, 7].

В этой работе разработан подход к построению на основе гексагонального тайлинга вычислительных процессов для реализации алгоритмов решения сеточных задач на суперкомпьютерах с распределенной памятью. Отметим некоторые особенности подхода: нет перекрытий вычислений, он позволяет процессам одновременно начинать вычисления, соответственно отсутствует разгон-торможение процессов. Подход не требует предварительного преобразования области вычислений, приводящего к скошенной области вычислений и, соответственно, к дисбалансу вычислительной нагрузки).

## 1. Параллельный алгоритм с гексагональными тайлами

Будем рассматривать один из классов алгоритмов, возникающих при решении сеточных задач. Пусть алгоритм имеет вид

**do**  $l = 1, r_{it} // r_{it}$  – некоторое фиксированное число итераций

**do**  $i = 1, N_x-1 // N_x-1$  – число строк матрицы, задающей внутренние узлы сетки

**do**  $j = 1, N_y-1 // N_y-1$  – число столбцов матрицы, задающей внутренние узлы

$$y(i,j)=F((y(i-1,j-1),y(i-1,j),y(i-1,j+1),y(i,j-1), y(i,j),y(i,j+1), y(i+1,j-1),y(i+1,j),y(i+1,j+1)))$$

Здесь параметр внешнего цикла является номером итерации, функция  $F$  считается известной,  $y(i,j)$  – значения неизвестной функции в узлах сетки; если  $i$  и/или  $j$  равны  $0, N_x, N_y$ , то величины  $y(i,j)$  известны – они равны значению некоторой функции в граничных узлах сетки. Все зависимости алгоритма являются однородными и выражаются векторами зависимостей  $(0,1,0), (0,0,1), (1,0,0), (0,1,1), (0,1,-1), (1,-1,1), (1,-1,-1), (1,0,-1), (1,-1,0)$ .

Будем рассматривать две части гексагональных тайлов:  $\Delta$ -тайлы и  $\nabla$ -тайлы; рисунок поясняет дальнейшие рассуждения. Эти тайлы в плоскости первых двух координат имеют форму равнобедренных трапеций. Введём параметры  $h$  и  $w$ , которые имеют следующий смысл: число точек области вычислений на «высоте»  $\Delta$ -тайлов и  $\nabla$ -тайлов равно  $h+1$ , число точек области вычислений на меньшем «основании»  $\Delta$ - и  $\nabla$ -тайлов равно  $w+1$ .

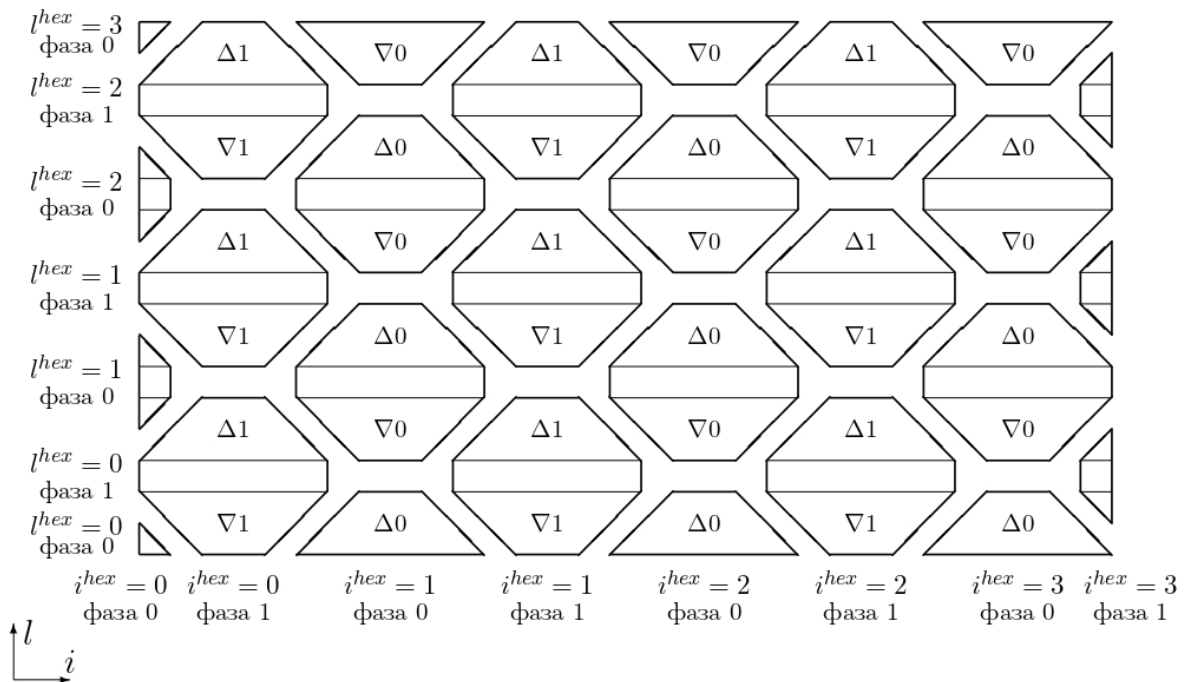


Рисунок – Схематичное изображение гексагональных тайлов ( $h=2, w=2$ )

Для простоты изложения будем предполагать, что числа  $L^{hex} = \frac{r_{it}}{2(h+1)}$  и  $I^{hex} = \frac{N_x - 1 - h}{2(h+w+1)}$  являются целыми. Разделяют две фазы

вычислений уровня тайлов. Соответственно будем рассматривать  $\Delta$ - и  $\nabla$ -тайлы фазы 0 и  $\Delta$ - и  $\nabla$ -тайлы фазы 1. Обозначим эти тайлы через  $\text{Tile}^{\Delta 0}(l^{hex}, i^{hex})$ ,  $\text{Tile}^{\Delta 1}(l^{hex}, i^{hex})$ ,  $\text{Tile}^{\nabla 0}(l^{hex}, i^{hex})$ ,  $\text{Tile}^{\nabla 1}(l^{hex}, i^{hex})$ , где параметры  $l^{hex}$ ,  $0 \leq l^{hex} \leq L^{hex}$ , и  $i^{hex}$ ,  $0 \leq i^{hex} \leq I^{hex}$ , задают нумерацию тайлов.

Если  $0 \leq l^{hex} \leq L^{hex} - 1$ ,  $i^{hex} = 0$ , то  $\Delta$ -тайл фазы 0, обозначим его  $\text{Tile}^{\Delta 0}(l^{hex}, i^{hex})$ , является неполным. Если  $1 \leq l^{hex} \leq L^{hex}$ ,  $i^{hex} = 0$ , то  $\nabla$ -тайл фазы 0, обозначим его  $\text{Tile}^{\nabla 0}(l^{hex}, i^{hex})$ , является неполным. Если  $0 \leq l^{hex} \leq L^{hex} - 1$ ,  $i^{hex} = I^{hex}$ , то  $\Delta$ -тайл фазы 1, обозначим его  $\text{Tile}^{\Delta 1}(l^{hex}, i^{hex})$ , является неполным. Если  $0 \leq l^{hex} \leq L^{hex} - 1$ ,  $i^{hex} = I^{hex}$ , то  $\nabla$ -тайл фазы 1, обозначим его  $\text{Tile}^{\nabla 1}(l^{hex}, i^{hex})$ , является неполным.

Алгоритм (уровня макроопераций) гексагонального тайлинга:

```

 $l^{hex} = 0$ 
dopar  $i^{hex} = 0, I^{hex}$ 
  if  $i^{hex} = 0$  then  $\text{Tile}^{\Delta 0}(l^{hex}, i^{hex})$  else  $\text{Tile}^{\Delta 0}(l^{hex}, i^{hex})$ 
enddopar
dopar  $i^{hex} = 0, I^{hex}$ 
  if  $i^{hex} = I^{hex}$  then  $\text{Tile}^{\nabla 1}(l^{hex}, i^{hex}) \cup \text{Tile}^{\Delta 1}(l^{hex}, i^{hex})$ 
  else  $\text{Tile}^{\nabla 1}(l^{hex}, i^{hex}) \cup \text{Tile}^{\Delta 1}(l^{hex}, i^{hex})$ 
enddopar
do  $l^{hex} = 1, L^{hex} - 1$ 
  dopar  $i^{hex} = 0, I^{hex}$ 
    if  $i^{hex} = 0$  then  $\text{Tile}^{\nabla 0}(l^{hex}, 0) \cup \text{Tile}^{\Delta 0}(l^{hex}, 0)$ 
    else  $\text{Tile}^{\nabla 0}(l^{hex}, i^{hex}) \cup \text{Tile}^{\Delta 0}(l^{hex}, i^{hex})$ 
  enddopar
  dopar  $i^{hex} = 0, I^{hex}$ 
    if  $i^{hex} = I^{hex}$  then  $\text{Tile}^{\nabla 1}(l^{hex}, I^{hex}) \cup \text{Tile}^{\Delta 1}(l^{hex}, I^{hex})$ 
    else  $\text{Tile}^{\nabla 1}(l^{hex}, i^{hex}) \cup \text{Tile}^{\Delta 1}(l^{hex}, i^{hex})$ 
  enddopar
enddo
 $l^{hex} = L^{hex}$ 
dopar  $i^{hex} = 0, I^{hex}$ 
  if  $i^{hex} = 0$  then  $\text{Tile}^{\nabla 0}(l^{hex}, i^{hex})$  else  $\text{Tile}^{\nabla 0}(l^{hex}, i^{hex})$ 
enddopar

```



## 2. Псевдокод вычислительного процесса

Пусть параметр цикла  $i^{hex}$  определяет ранг (номер) процесса. Для каждого процесса  $Pr_p$ ,  $0 \leq p \leq I^{hex}$  можно записать следующий псевдокод:

Сформировать матрицу, задающую начальное приближение во внутренних узлах сетки; граничные узлы сетки заполняются точными значениями.

```
// Итерация  $l^{hex} = 0$ . Получение данных для вычислений фазы 0 не требуется,
// все необходимые для этой фазы данные уже присвоены
if  $p=0$  then  $\text{Tile}^{\Delta 0}(l^{hex}, 0)$  else  $\text{Tile}^{\Delta 0}(l^{hex}, p)$ 
Send( $p-1$ ) // Передача результатов вычислений  $\text{Tile}^{\Delta 0}(l^{hex}, p)$  процессу  $p-1$ ;
Recv( $p+1$ ) // Получение результатов вычислений  $\text{Tile}^{\Delta 0}(l^{hex}, p+1)$  от процесса
 $p+1$ 
if  $p=l^{hex}$  then  $\text{Tile}^{\nabla 1}(l^{hex}, l^{hex}) \cup \text{Tile}^{\Delta 1}(l^{hex}, l^{hex})$  else  $\text{Tile}^{\nabla 1}(l^{hex}, p) \cup \text{Tile}^{\Delta 1}(l^{hex}, p)$ 
Send( $p+1$ ) // Передача результатов вычислений  $\text{Tile}^{\Delta 1}(l^{hex}, p)$  процессу  $p+1$ 
do  $l^{hex} = 1, L^{hex}-1$ 
  Recv ( $p-1$ ) // Получение результатов вычислений  $\text{Tile}^{\Delta 1}(l^{hex}-1, p-1)$ 
  if  $p=0$  then  $\text{Tile}^{\nabla 0}(l^{hex}, 0) \cup \text{Tile}^{\Delta 0}(l^{hex}, 0)$  else  $\text{Tile}^{\nabla 0}(l^{hex}, p) \cup \text{Tile}^{\Delta 0}(l^{hex}, p)$ 
  Send( $p-1$ ) // Передача результатов вычислений  $\text{Tile}^{\Delta 0}(l^{hex}, p)$  процессу  $p-1$ ;
  Recv( $p+1$ ) // Получение результатов вычислений  $\text{Tile}^{\Delta 0}(l^{hex}, p+1)$ 
  if  $p=l^{hex}$  then  $\text{Tile}^{\nabla 1}(l^{hex}, l^{hex}) \cup \text{Tile}^{\Delta 1}(l^{hex}, l^{hex})$  else  $\text{Tile}^{\nabla 1}(l^{hex}, p) \cup \text{Tile}^{\Delta 1}(l^{hex}, p)$ 
  Send( $p+1$ ) // Передача результатов вычислений  $\text{Tile}^{\Delta 1}(l^{hex}, p)$  процессу  $p+1$ 
enddo
// Итерация  $l^{hex} = L^{hex}$ 
Recv ( $p-1$ ) // Получение результатов вычислений  $\text{Tile}^{\Delta 1}(L^{hex}-1, p-1)$ 
if  $p=0$  then  $\text{Tile}^{\nabla 0}(l^{hex}, 0)$  else  $\text{Tile}^{\nabla 0}(l^{hex}, p)$ 
```

Таким образом, предложена методика построения параллельных вычислительных 1D процессов для выполнения сеточных вычислений зейделевского типа. Аналогичная методика разработана в работе [8], но она основана на классическом, а не на гексагональном тайлинге. Поэтому методика работы [8] предполагает предварительное преобразование алгоритма (скос по одной из координат итерационного пространства), требуется разгон и торможение вычислений.

В дальнейшем предполагается предлагаемую методику обобщить для получения 2D структуры вычислительных процессов; координаты процесса будут определять параметры циклов  $i^{hex}$  и  $l^{hex}$ .

## Библиографические ссылки

1. Xue J. Loop tiling for parallelism. Springer Science & Business Media. 2000. 256 p. DOI: 10.1007/978-1-4615-4337-4.
2. Holewinski J., Pouchet L.-N., Sadayappan P. High-performance code generation for stencil computations on GPU architectures // *Supercomputing*. 2012. P. 311–320. DOI: 10.1145/2304576.2304619.
3. Grosser T., Verdoolaege S., Cohen A., Sadayappan P. The relation between diamond tiling and hexagonal tiling // *First International Workshop on High-Performance Stencil Computations*. January, 2014. Vienna, Austria. DOI: 10.1142/S0129626414410023.
4. Соболевский П.И., Баханович С.В. Плотное покрытие области вычислений гексагональными тайлами // *Доклады НАН Беларуси*. 2018. № 62(5). С. 525–530.
5. Соболевский П.И., Баханович С.В. Анализ глобальных зависимостей в гексагональном тайлинге // *Вест. Нац. акад. наук Беларуси. Сер. физ.-мат. наук*. 2020. № 56(1). С. 114–126. DOI: 10.29235/1561-2430-2020-56-1-114-126.
6. Grosser T., Cohen A., Holewinski J., Sadayappan P, Verdoolaege S. Hybrid hexagonal/classical tiling for GPUs // *12th Annual IEEE/ACM International Symposium on Code Generation and Optimization*, Orlando, FL, USA, February 15-19, 2014. P. 66–75. DOI: 10.1145/2544137.2544160.
7. Prajapati N, Ranasinghe W, Rajopadhye S., Andonov R, Djidjev H, Grosser T. Simple, accurate, analytical time modeling and optimal tile size selection for GPGPU stencils // *Proceedings of the 22nd ACM SIGPLAN Symposium on Principles and Practice of Parallel Programming*. January 2017. P. 163–177. DOI: 10.1145/3018743.3018744.
8. Renganarayanan L., Harthikote-Matha M., Dewri R., Rajopadhye S. Towards optimal multi-level tiling for stencil computations // *21st IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium*. 2007. DOI: 10.1109/IPDPS.2007.370291.

# АНАЛОГОВЫЙ ДИФФЕРЕНЦИАТОР НА ОСНОВЕ SiO<sub>2</sub> И TiO<sub>2</sub>

А.С. Мигель, С.В. Малый

*Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь*

*E-mail: [anton.migel.99@mail.ru](mailto:anton.migel.99@mail.ru), [maly@bsu.by](mailto:maly@bsu.by)*

Предложена модель аналогового дифференциатора на основе чередующихся слоев SiO<sub>2</sub> и TiO<sub>2</sub>. Операция дифференцирования выполняется при прохождении электромагнитной волны через структуру дифференциатора. Представлены результаты численного моделирования структуры, реализующей пространственное дифференцирование 2-го порядка функции одной переменной.

**Ключевые слова:** аналоговые вычисления; дифференциатор; слоистая структура; метаматериал.

## ANALOG DIFFERENTIATOR BASED ON SiO<sub>2</sub> AND TiO<sub>2</sub>

A.S. Migel, S.V. Maly

*Belarusian State University, Minsk, Belarus*

*E-mail: [anton.migel.99@mail.ru](mailto:anton.migel.99@mail.ru), [maly@bsu.by](mailto:maly@bsu.by)*

A model of an analog differentiator based on alternating layers of SiO<sub>2</sub> and TiO<sub>2</sub> is proposed. The differentiation operation is performed when an electromagnetic wave transmits through the differentiator structure. The results of numerical simulation of the structure realizing spatial differentiation of the 2nd order of a function of one variable are presented.

**Keywords:** analog computing; differentiator; layered structure; metamaterial.

### Введение

Оптические устройства, осуществляющие заданные математические преобразования оптических сигналов, представляют большой интерес для широкого спектра приложений, включающих оптическую обработку информации и аналоговые оптические вычисления. Ключевыми особенностями таких устройств являются компактная и интегрируемая конфигурация, низкое энергопотребление и естественная способность к параллельным вычислениям.

В работе [1] было предложено два подхода к использованию метаматериалов для выполнения пространственных преобразований оптических сигналов. Первый подход состоял в использовании структуры, состоящей

из слоев с градиентным изменением показателя преломления и метаповерхности. Второй подход состоял в использовании многослойной структуры, рассчитанной непосредственно из условия формирования заданного пространственного преобразования входного сигнала.

Одной из базовых операций аналоговой обработки оптических сигналов является операция дифференцирования по пространственной координате. Для осуществления операций дифференцирования были предложены различные структуры реализующие данные подходы: первый подход – компактные аналоги коррелятора с градиентными линзами и метаповерхностью [2–4]; второй – различные резонансные структуры, включая брэгговские решетки [5], дифракционные решетки [6, 7], плазмонные структуры на основе схемы Кречмана [8, 9], микро- и нанорезонаторы [10,11].

Более перспективным является второй подход, в рамках которого структура непосредственно реализует заданное пространственное преобразование входного сигнала, значительно компактнее, поскольку не требуют дополнительных линз, выполняющих преобразование Фурье и значительно проще в изготовлении по сравнению с метаповерхностями.

Рассмотрена модель аналогового устройства, способного выполнять дифференцирование второго порядка по пространственной координате.

### Описание дифференциатора

Схематическое изображение исследуемого дифференциатора представлено на рисунке 1 а). Ключевой особенностью данного устройства является независимость выбора стороны функционирования (рисунок 1 б)).

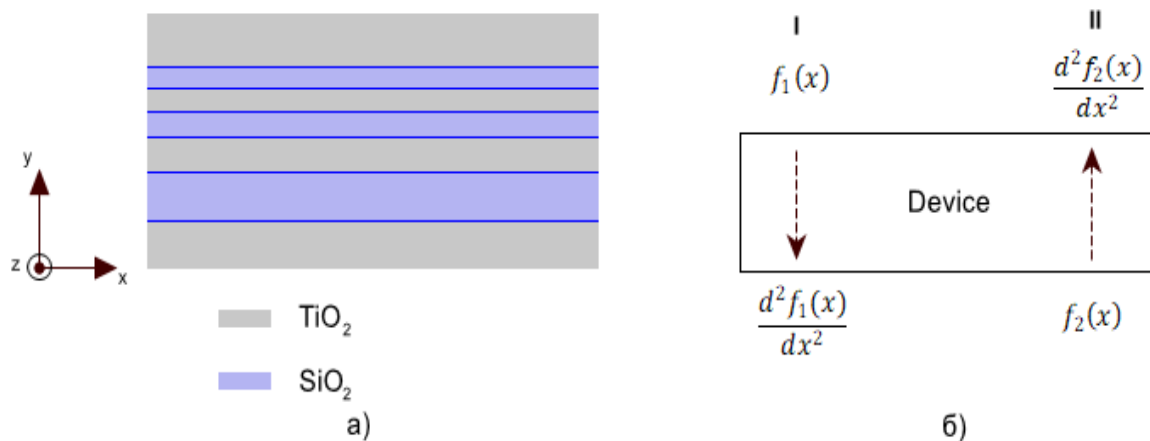


Рисунок 1 – Дифференциатор 2-го порядка: а) схематическое изображение структуры, реализующей дифференцирование 2-го порядка по пространственной координате; б) схемы функционирования дифференциатора.

За основу исследуемого дифференциатора была взята структура, представленная в работе [12] и состоящая из 12 слоев. Для уменьшения количества слоев была оптимизирована толщина некоторых из них. Таким образом, исследуемый дифференциатор состоял из 7 чередующихся слоев SiO<sub>2</sub> и TiO<sub>2</sub>, со следующими параметрами n<sub>1</sub> = 1,457 (SiO<sub>2</sub>) и n<sub>2</sub> = 2,2813 (TiO<sub>2</sub>) для длины волны λ=632,8 нм [13]. Толщина каждого слоя дифференциатора представлена в таблице.

Таблица – Параметры дифференциатора

| № слоя   | 1                | 2                | 3                | 4                | 5                | 6                | 7                |
|----------|------------------|------------------|------------------|------------------|------------------|------------------|------------------|
| Материал | TiO <sub>2</sub> | SiO <sub>2</sub> | TiO <sub>2</sub> | SiO <sub>2</sub> | TiO <sub>2</sub> | SiO <sub>2</sub> | TiO <sub>2</sub> |
| d, нм    | 346,4            | 113,5            | 134,2            | 139,4            | 196,4            | 275,7            | 299,7            |

### Результаты численного моделирования

Численное моделирование модели дифференциатора проводилось с использованием метода конечных элементов на длине волны λ=632,8 нм.

Операция дифференцирования 2-го порядка проводилась над следующими функциональными зависимостями E<sub>z</sub> компоненты электрического поля падающей волны:

$$E_z(x) = 3 \left(\frac{x}{\lambda}\right)^2 \exp\left(-\left(\frac{x}{\lambda}\right)^2\right), \quad (1)$$

$$E_z(x) = 4 \left(\frac{x}{\lambda}\right)^3 \exp\left(-\left(\frac{x}{\lambda}\right)^2\right), \quad (2)$$

$$E_z(x) = \frac{x}{\lambda} \exp\left(-\left(\frac{x}{\lambda}\right)^2\right), \quad (3)$$

где λ – длина волны.

Пример выполнения операции дифференцирования 2-го порядка над E<sub>z</sub> компонентой электрического поля падающей волны, изменяющейся по закону (1), представлен на рисунке 2.

Пример выполнения операции дифференцирования 2-го порядка над E<sub>z</sub> компонентой электрического поля падающей волны, изменяющейся по закону (2), представлен на рисунке 3.

На рисунке 4 а) показана зависимость E<sub>z</sub> компоненты электрического поля падающей волны, изменяющейся по закону (3), а на рисунке 4 б) показаны результаты дифференцирования данной компоненты для двух схем функционирования и аналитический расчет.

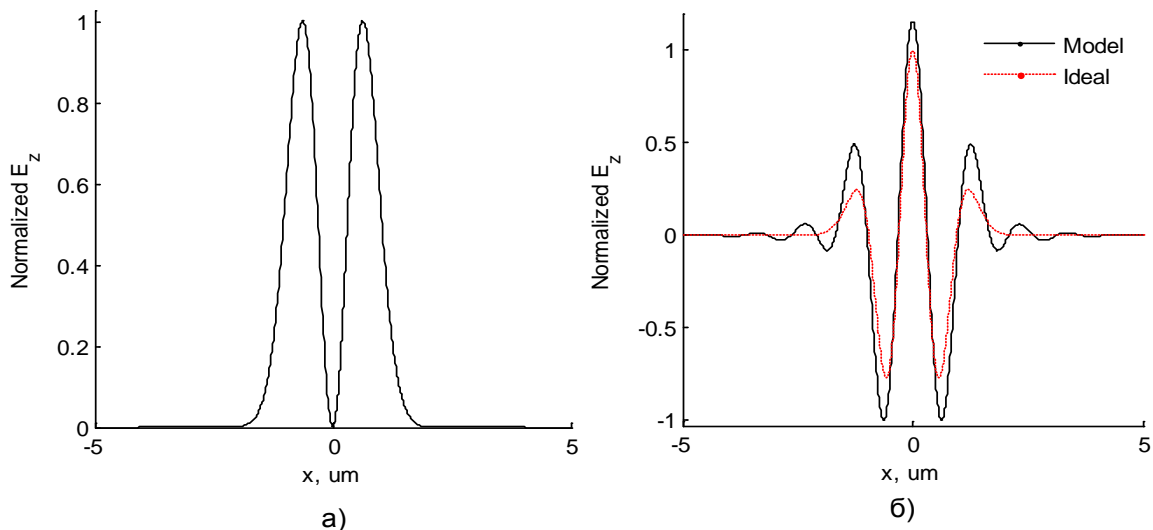


Рисунок 2 – Дифференцирование 2-го порядка: а) зависимость  $E_z$  компоненты электрического поля падающей волны, изменяющейся по закону (1); б) сравнительный график результатов моделирования и аналитического расчета.

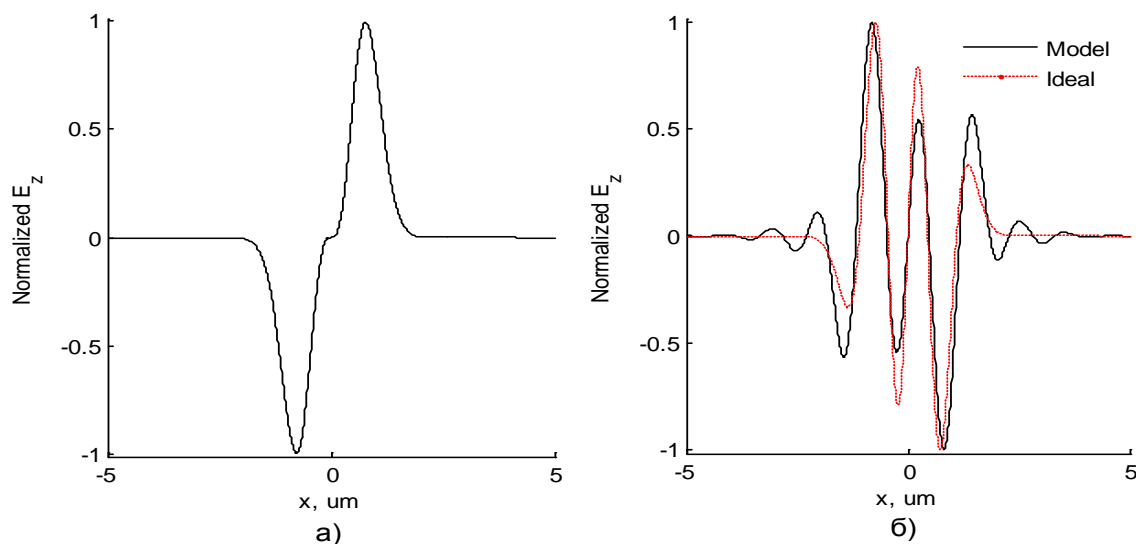


Рисунок 3 – Дифференцирование 2-го порядка: а) зависимость  $E_z$  компоненты электрического поля падающей волны, изменяющейся по закону (2); б) сравнительный график результатов моделирования и аналитического расчета.

Среднеквадратическая ошибка между полученными результатами и аналитическим расчетом не превысила 0,013.

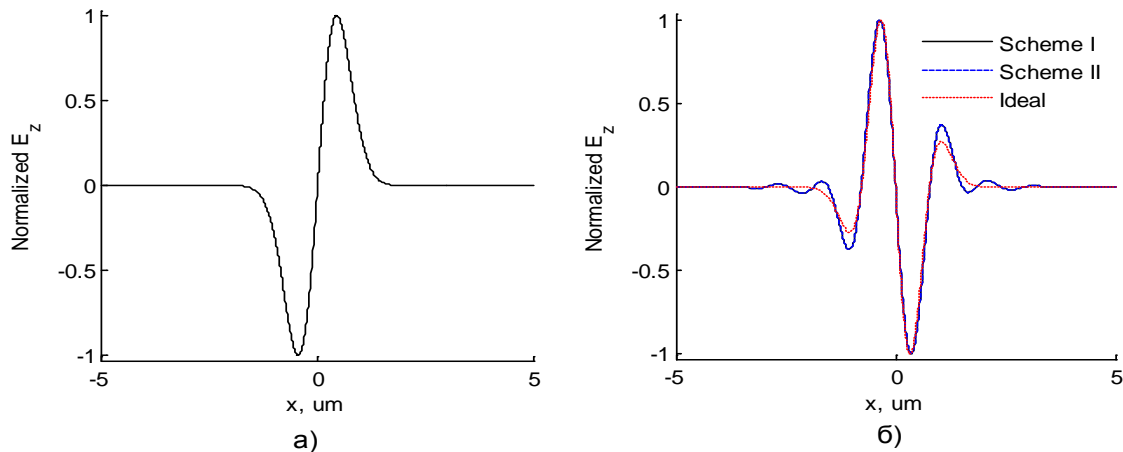


Рисунок 4 – Дифференцирование 2-го порядка: а) зависимость  $E_z$  компоненты электрического поля падающей волны, изменяющейся по закону (3); б) сравнительный график результатов моделирования и аналитического расчета.

## Заключение

Предложена модель оптического дифференциатора на основе  $\text{SiO}_2$  и  $\text{TiO}_2$ , работающего в режиме прохождения. Результаты численного моделирования демонстрируют возможность выполнения дифференцирования 2-го порядка по пространственной координате с приемлемой точностью. Важной особенностью данного дифференциатора является инвариантность относительно направления распространения волны, что позволяет проводить как последовательные, так и параллельные вычисления. Полученные результаты могут найти применение при разработке систем аналоговых оптических вычислений.

## Библиографические ссылки

1. Silva A., Monticone F., Castaldi G. et al. Performing Mathematical Operations with Metamaterials // *Science*. 2014. V. 343. P.160–163.
2. Pors A., Nielsen M.G., Bozhevolnyi S.I. Analog Computing Using Reflective Plasmonic Metasurfaces // *Nano Lett.* 2015. V. 15. P. 791–797.
3. Chizari A., Abdollahramezani S., Jamali M.V. et al. Analog optical computing based on a dielectric meta-reflect array // *Opt. Lett.* 2016. V. 41. P. 3451–3454.
4. AbdollahRamezani S., Arik K., Khavasi A., et al. Analog computing using graphene-based metalines // *Opt. Lett.* 2015. V.40. P. 5239–5242.
5. Bykov, D. A., Doskolovich, L. L., Bezus, E. A. & Soifer, V. A. Optical computation of the Laplace operator using phase-shifted Bragg grating // *Opt. Express* 2014. V. 22 P. 25084–25092.

6. Bykov D.A., Doskolovich L.L., Morozov, A.A., et al. First-order optical spatial differentiator based on a guided-mode resonant grating // *Opt. Express* 2018, V. 26, P. 10997–11006.
7. Rajabalipanah H., Momeni A., Rahmanzadeh M. et al. Parallel wave-based analog computing using metagratings // *Nanophotonics*. 2022. V. 11. P. 1561-1571
8. Zhu T., Zhou Y., Lou Y. et al. Plasmonic computing of spatial differentiation // *Nat. Commun.* 2017. V. 8.
9. Zhang W., Zhang X. Backscattering-Immune Computing of Spatial Differentiation by Nonreciprocal Plasmonics // *Phys. Rev. Appl.* 2019 V. 11.
10. Guo C., Xiao M., Minkov M., Shi Y., et al. Photonic crystal slab Laplace operator for image differentiation // *Optica*. 2018 V. 5. P. 251–256.
11. Zhou Y., Wu W., Chen R., et al. Analog Optical Spatial Differentiators Based on Dielectric Metasurfaces // *Adv. Opt. Mater.* 2020. V. 8.
12. Zhou Y., Zhan J., Chen R., et al. Analogue Optical Spatiotemporal Differentiator // *Adv. Optical Mater.* 2021. V.9.
13. Refractive index database. URL: <https://refractiveindex.info/> (дата обращения: 08.08.2022.)



## О СТРУКТУРЕ ИНФОРМАЦИОННОЙ СИСТЕМЫ РАСПРЕДЕЛЕННОЙ ОБРАБОТКИ ИНФОРМАЦИИ ДЛЯ УЛУЧШЕНИЯ КАЧЕСТВА ГАЛЬВАНИЧЕСКИХ ПОКРЫТИЙ

**И.Ю. Пчелинцева**

*ФГБОУ ВО «Тамбовский государственный технический университет»,  
ул. Советская, 106, 392000, г. Тамбов, Россия, irina\_yu\_10@mail.ru*

В статье рассматривается информационная система для решения задачи минимизации неравномерности гальванических покрытий на плоских деталях в распределенной компьютерной среде. Описан вычислительный эксперимент, реализованный на кластере из 3-х и 4-х вычислительных узлов. Приведено сравнение использования вычислительных ресурсов кластера при минимальной неравномерной загрузке узлов.

**Ключевые слова:** параллельные вычисления; кластер; гальваническое покрытие; база данных; критерий неравномерности.

## ON THE STRUCTURE OF THE INFORMATION SYSTEM OF DISTRIBUTED INFORMATION PROCESSING TO IMPROVE THE QUALITY OF ELECTROPLATED COATINGS

**I.Yu. Pchelintseva**

*Tambov State Technical University,  
106 Sovetskaya Street, Tambov 392000, Russia, irina\_yu\_10@mail.ru*

In the article, the author considers an information system for solving the problem of minimizing the unevenness of electroplating coatings on flat parts in a distributed computer environment. A computational experiment implemented on a cluster of 3 and 4 nodes is described. A comparison of the use of computing resources of the cluster with a minimum uneven load of nodes is given.

**Keywords:** parallel computing; cluster; electroplating; database; non-uniformity criterion.

### **Введение**

В настоящее время получение равномерных гальванических покрытий на деталях является важной задачей. Одним из способов улучшения качества рассматриваемых покрытий является использование токопроводящих плоских экранов в гальванических ваннах. Варьируя количеством отверстий прямоугольной формы, а также их размером, можно добиться минимального значения критерия  $R$  неравномерности гальваниче-

ского покрытия, вычисляемого по соотношению текущей толщины покрытия к минимальной толщине [1].

Как показали многочисленные вычислительные эксперименты, описанные в работах [2, 3], задача минимизации критерия  $R$  требует значительных временных ресурсов. Например, программная реализация [4] метода полного перебора при нанесении покрытия на плоскую деталь прямоугольной формы на сетке в 900 узлов на решение данной задачи оптимизации затрачивает 5 ч. 6 мин. [2]. Это связано с тем, что на каждом шаге алгоритма решается дискретный аналог уравнения Лапласа и нелинейных краевых условий третьего рода – нелинейная система алгебраических уравнений из 900 неизвестных. Поэтому задача минимизации времени расчетов в данном случае является актуальной.

Одним из методов решения поставленной задачи является распараллеливание алгоритма полного перебора на сетке в распределенной компьютерной среде.

Цель работы – разработка информационной системы распределенной обработки информации для параллельного алгоритма полного перебора при минимизации критерия  $R$ .

Задачи исследования:

1. Разработать структуру общей памяти (сетевой базы данных) для параллельных процессов;
2. Описать алгоритм решения поставленной задачи в распределенной компьютерной среде;
3. Выбрать библиотеку параллельных вычислений;
4. Реализовать построенный алгоритм на вычислительном кластере;
5. Сравнить время выполнения последовательного и параллельного алгоритмов.

## 1. Структура сетевой базы данных

В сетевой базе данных предполагается хранение следующих данных: идентификатор (уникальный номер)  $idconf$  конфигурации экрана, флаг  $flcalc$  расчёта (0 – не досчитали (возникла ошибка), 1 – всё удачно вычислено), значения  $N_{pl}$  и  $PL$  – количество отверстий в экране и их ширина соответственно, измеряемая в шагах сетки, значение критерия  $R$ , номер  $numproc$  вычислительного процесса, обрабатывающего рассматриваемую конфигурацию экрана, и пару – номер  $NumCoord$  координаты на сетке на детали-катоде, для которой вычислена толщина покрытия, и само значение  $delta$  толщины.

Необходимо отметить, что первичным ключом здесь является поле  $idconf$ , т.к. оно определяет всю необходимую информацию о рассматри-

ваемой конфигурации экрана. Структура сетевой базы данных представлена на рис. 1.

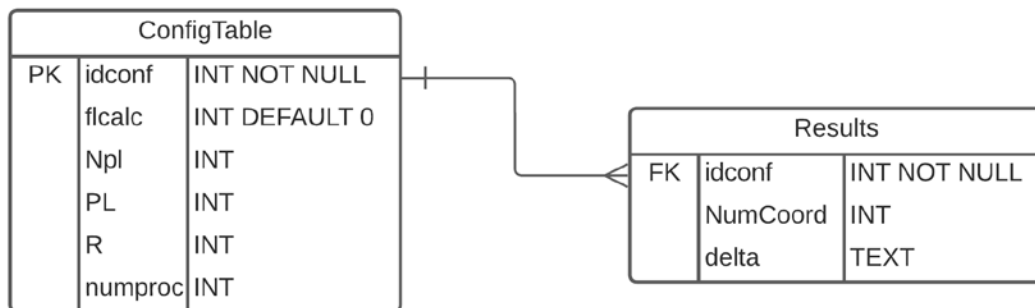


Рисунок 1 – Дatalogическая модель базы данных

## 2. Алгоритм минимизации критерия $R$ в распределенной компьютерной среде

На рис. 2 представлен алгоритм проведения параллельных вычислений для минимизации критерия неравномерности гальванического покрытия.

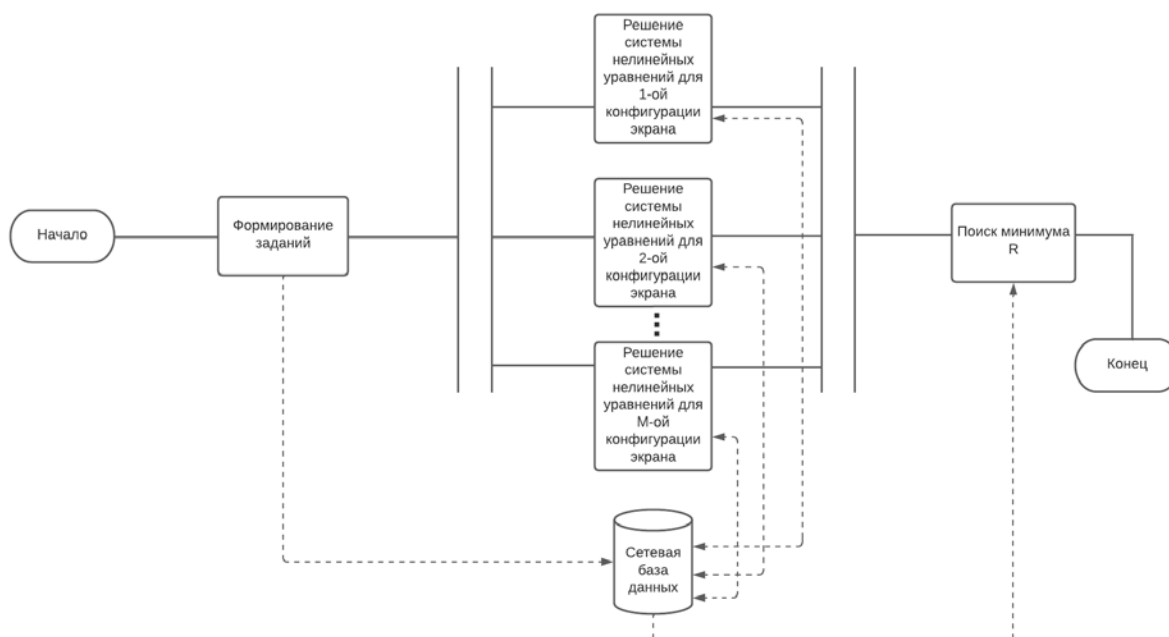


Рисунок 2 – Алгоритм проведения параллельных вычислений в распределённой компьютерной среде

Отметим, что в алгоритме предусмотрено распределение более одного задания на каждый параллельный процесс. При этом неравномерность

загрузки минимальна (количество заданий может отличаться от минимального количества на единицу).

Работа параллельных процессов в распределённой компьютерной среде осуществляется с помощью функций библиотеки языка С, входящей в программный пакет MPICH. Запущенный процесс, используя библиотечную функцию `MPI_Comm_rank()`, получает свой номер, по которому через поле `numproc` таблицы `ConfigTable` базы данных извлекает задания для расчётов.

Все расчёты были проведены сначала на вычислительном кластере из 3-х вычислительных узлов, а затем из 4-х узлов. На кластере была развёрнута система виртуализации Proxmox Virtual Environment, управляемая удалённо через веб-интерфейс. На каждом узле была установлена операционная система Arch Linux x86\_64 с версией ядра 5.13.19-2-*pv*, математический пакет Maxima 5.46.20 для решения большой нелинейной системы алгебраических уравнений через перенаправление ввода/вывода и программный пакет MPICH. На одном из узлов также был развёрнут сервер СУБД MySQL.

17 комбинаций допустимых значений  $N_{pl}$  и  $PL$  [2] были распределены по 17 параллельным процессам, т.е. по одной задаче на каждый процесс. При этом каждый узел имеет центральный процессор Intel Xeon CPU E5-2620 с 12-ти ядрами и тактовой частотой 2,1 ГГц. Поэтому схема запуска MPI-приложения на таком кластере следующая (с наименьшей неравномерной загрузкой): 5:6:6. Здесь каждое число отвечает за количество параллельных процессов, запущенных в соответствующем вычислительном узле. Для кластера из 4-х узлов: 4:4:4:5.

Динамика загрузки процессоров по всем узлам приведена на рис. 3 (данные получены из Proxmox).

Время работы алгоритма для 3-х вычислительных узлов составляет 43,5 мин., для 4-х узлов – 37,8 мин.

## **Заключение**

Для разработанного программного обеспечения было получено свидетельство о государственной регистрации [5].

Замечено, что при запуске приложения на кластере из 3-х вычислительных узлов часто наблюдается пиковая нагрузка 97% на некоторые процессоры. При этом один процесс распределяется в среднем на два ядра процессора. На 4-х узлах такое явление отсутствует. Поэтому и время работы приложения меньше.

Таким образом, рассмотренный в статье параллельный алгоритм значительно выигрывает по времени в сравнении с последовательным алго-

ритмом, но требует значительных ресурсов и процессоров узлов кластера, и памяти для развёртывания пакетов Maxima.

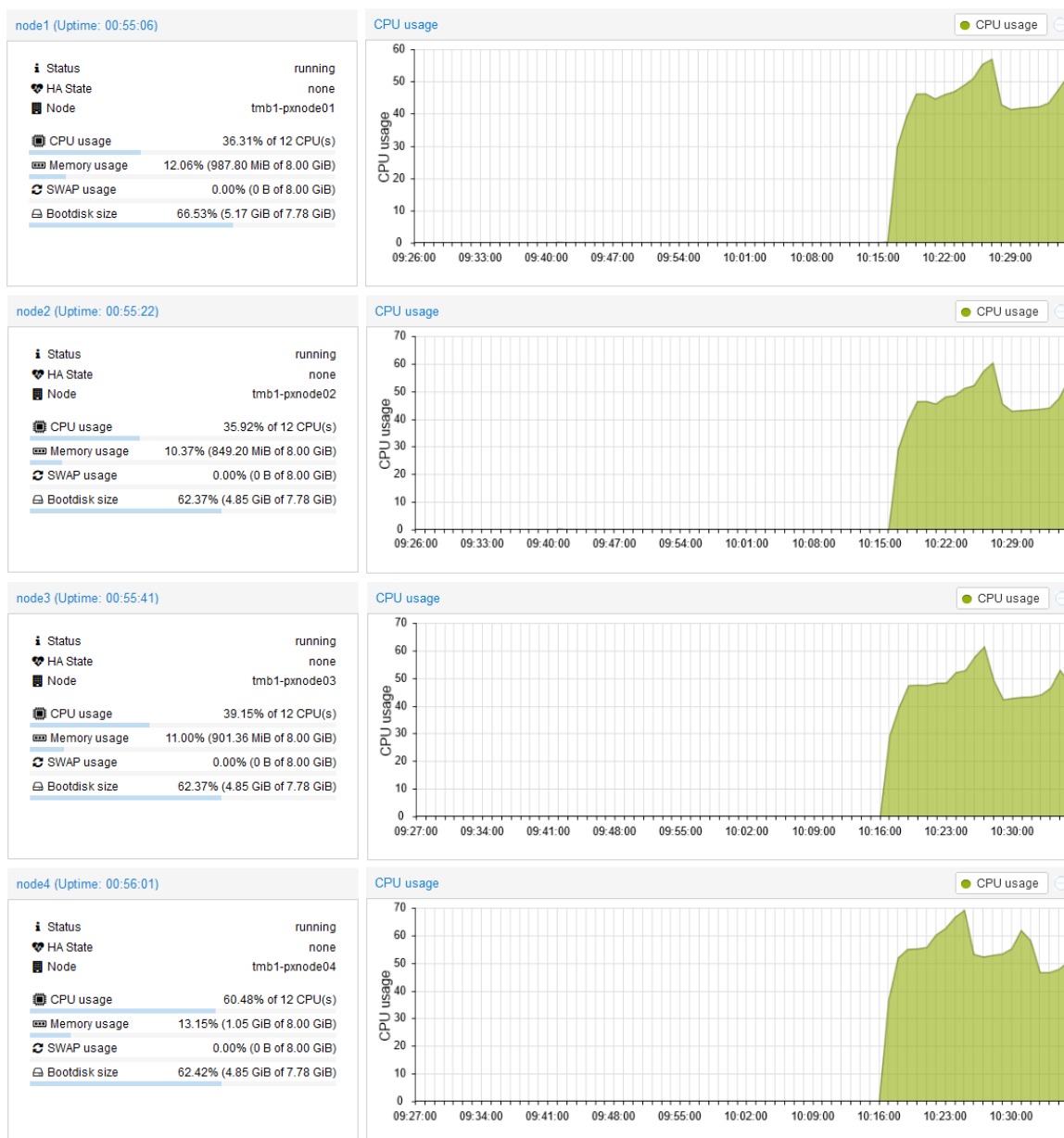


Рисунок 3 – Динамика загрузки узлов вычислительного кластера из 4-х узлов

### Библиографические ссылки

1. Симагин Д.Н., Литовка Ю.В. Процесс получения наномодифицированных цинковых покрытий с повышенной равномерностью. Вестник Тамбовского государственного технического университета. 2013. № 19(4). С. 886–889. EDN: RSXNXZ.
2. Пчелинцева И.Ю., Литовка Ю.В. Система автоматизированного управления процессом нанесения гальванического покрытия в ванне с токонепроводящим экраном,

- Мехатроника, автоматизация, управление. 2022. № 23(4). С. 188–196. DOI: 10.17587/mau.23.188-196.
3. Pchelintseva I.Yu., Pchelintsev A.N., Litovka Y.V. Modeling of metal distribution when coating flat metal plates in electroplating baths // International Journal of Numerical Modeling: Electronic Networks, Devices and Fields. 2021. № 34(2). P. 2830. DOI: 10.1002/jnm.2830.
  4. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2021681432. Решение задачи оптимизации нанесения цинкового покрытия на плоскую деталь в гальванической ванне последовательным алгоритмом / И.Ю. Пчелинцева, Ю.В. Литовка. 21.12.2021 г. EDN: RHJPXB.
  5. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2022662881. Программа параллельных вычислений оптимальной конфигурации токонепроводящего экрана в гальванической ванне / И.Ю. Пчелинцева, Ю.В. Литовка. 07.07.2022 г. EDN: MHGULP.

## РАСПРЕДЕЛЕННЫЕ И ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ СИСТЕМЫ: СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

**Е.Д. Рафеенко, О.М. Кондратьева**

*Белорусский Государственный Университет  
п-т. Независимости, д. 4, г. Минск, Беларусь, rafeenko@bsu.by, kondratjeva@bsu.by*

Рассматриваются источники для наполнения дисциплины «Распределенные и параллельные системы» для студентов специальности «Прикладная информатика» факультета прикладной математики и информатики Белорусского государственного университета и перспективы развития дисциплины с учетом новых требований.

**Ключевые слова:** распределенные системы; параллельные системы; обучение; высшее образование.

## DISTRIBUTED AND PARALLEL SYSTEMS: THE CONTENT OF THE DISCIPLINE

**E.D. Rafeenko, O.M. Kondratjeva**

*Belarusian State University, pr. Nezavisimosti 4, Minsk, Belarus,  
rafeenko@bsu.by, kondratjeva@bsu.by*

The sources for filling the discipline "Distributed and Parallel Systems" for students of the specialty "Applied Informatics" of the Faculty of Applied Mathematics and Informatics of the Belarusian State University and the prospects for the development of the discipline, taking into account new requirements, are considered.

**Keywords:** distributed systems; parallel systems; education; higher education.

### **Введение**

Автор учебной программы «мечтает», чтобы его программу высоко оценили – «составлена с учетом международных стандартов». Для подготовки IT-специалистов таким международным стандартом является ACM Computing Curricula, лежащая в основе учебных программ мировых университетов. Существуют и другие авторитетные источники.

На факультете прикладной математики и информатики для студентов специальности «Прикладная информатика» в пятом семестре преподается общепрофессиональная дисциплина «Распределенные и параллельные системы» [1]. Для ее изучения предусмотрено 68 часов лекций и 34 часа лабораторных занятий. В результате изучения дисциплины студент должен, например, владеть основными приемами проектирования параллель-

ных приложений. Как это сделать – важная и сложная проблема. Полагаем, что надо начинать с определения совокупного набора знаний рассматриваемой предметной области.

## **1. Свод знаний и умений**

Первая версия учебной программы дисциплины «Распределенные и параллельные системы» была разработана на основе «Свода знаний и умений» предметной области «Суперкомпьютеры и параллельные вычисления» [2]. В данном источнике были определены: структура предметной области на верхнем уровне, подробное описание структуры предметной области; обозначены базовые понятия, соответствующие начальному уровню знаний. За основу методики подготовки рекомендаций по составлению учебных планов в [2] были взяты международные рекомендации Computer Science Curriculum 2008 [3].

«Свод знаний и умений» определяет пять основных областей знаний:

- математические основы параллельных вычислений;
- параллельные вычислительные системы (компьютерные основы);
- технологии параллельного программирования;
- параллельные алгоритмы решения задач;
- параллельные вычисления, большие задачи и конкретные предметные области.

Рассматриваемая дисциплина относится к области «Технологии параллельного программирования», что объясняется не только пристрастиями авторов программы, но и знаниями, полученными студентами при изучении других учебных дисциплин.

Авторы «Свода знаний и умений» предоставили достаточно подробную характеристику знаний, которая почти десять лет служит основой для разработки учебных программ.

В [2] было рекомендовано, чтобы определение совокупного набора знаний рассматриваемой предметной области осуществлялось «специально формируемыми для этой цели рабочими группами экспертов и, как правило, такая деятельность занимает достаточно большой период времени».

## **2. Рекомендации сообществ ACM и IEEE-CS**

В 2013 году появились очередные международные рекомендации Computer Science Curricula 2013 [4]. В документе была заявлена новая область знаний – Parallel and Distributed Computing. Эти рекомендации являются традиционными и основаны на определении области знаний и ее



частей, единицы знаний, модели результатов обучения. В области знаний «Параллельные и распределенные вычисления» выделены девять частей, среди которых: Основы параллелизма, Декомпозиция, Параллельные архитектуры и другие. Для каждой части определены цели, темы и результаты обучения. В качестве примера приведем результаты обучения из раздела «Основы параллелизма»:

- различать параллельность и конкурентность;
- знать различные механизмы синхронизации, их достоинства и недостатки;
- отличать гонку данных от гонок более высокого уровня.

В.П. Гергель в 2014 году в своей работе [5] сравнил основные активности по определению предметной области суперкомпьютерных технологий и высокопроизводительных вычислений, среди которых были [2] и [4]. Был сделан следующий вывод – «Свод знаний и умений» является более полным и во многом охватывает предложения других подходов.

В 2020 году опубликована Computing Curricula 2020 [6]. Здесь мы уже не найдем никакого конкретного содержания учебной дисциплины. Эти рекомендации проповедуют компетентностный подход как новый механизм для работы с учебными планами. Одной из причин перехода от модели области знаний, единицы знаний, результата обучения к обучению, основанному на компетенциях, является разрыв в навыках, который существует между потребностями промышленности и возможностями выпускников учебных заведений. Авторы считают, что такой подход обеспечит лучшую подготовку выпускников к профессиональной деятельности. А составителю учебной программы стало еще труднее: теперь не обойтись без экспертов от «потребителей специалистов».

В Computing Curricula 2020 предлагают основой для учебных программ по конкретным дисциплинам использовать понятные и проверенные временем рекомендации [4].

### **3. Рекомендации проекта NSF/IEEE-TCPP**

Еще одна активность по определению предметной области параллельных и распределенных вычислений – проект NSF/IEEE-TCPP [7]. Учебная программа TCPP легла в основу учебных программ ACM/IEEE Computer Science Curricula 2013. Рекомендации представлены в традиционной форме: темы, результаты обучения и предложения по преподаванию для основного и продвинутого уровней.

Рекомендации данного проекта хорошо согласуются с нашими представлениями о содержании дисциплины «Распределенные и параллельные системы».

## Заключение

Настало время обновить учебную программу, и хочется соответствовать новым вызовам. Computing Curricula 2020 заставляет принять важное решение: следовать какому-либо компетентностному подходу или остаться в области традиционных знаний. Выбор не является тривиальным, и мы остаемся в области «единица знаний + результат обучения» и используем рекомендации профессионального сообщества по учебным планам, так как не располагаем необходимыми ресурсами для обучения на основе компетенций. Итак, наш выбор – «Свод знаний и умений» [2], Computer Science Curricula 2013 [4] и проект NSF/IEEE-TCPP [7].

Наполнение предметной области – это лишь начало формирования учебной программы. Для дальнейшего рассмотрения остаются еще два важных аспекта: согласование с другими дисциплинами и пробуждение заинтересованности интерес со стороны студентов.

## Библиографические ссылки

1. Распределенные и параллельные системы. Учебная программа. URL: <http://elib.bsu.by/handle/123456789/199500>, 2018 (дата обращения: 13.08.2022).
2. Свод знаний и умений предметной области «Суперкомпьютеры и параллельные вычисления». URL: [http://www.hpc-education.ru/files/Svod\\_v24\\_intro\\_2013\\_09\\_20.pdf](http://www.hpc-education.ru/files/Svod_v24_intro_2013_09_20.pdf), 2013 (дата обращения: 13.08.2022).
3. Computer Science Curriculum 2008. URL: <https://www.acm.org/binaries/content/assets/education/curricula-recommendations/computerscience2008.pdf>, 2008 (дата обращения: 13.08.2022).
4. Computer Science Curricula 2013. Curriculum Guidelines for Undergraduate Degree Programs in Computer Science URL: [https://www.acm.org/binaries/content/assets/education/cs2013\\_web\\_final.pdf](https://www.acm.org/binaries/content/assets/education/cs2013_web_final.pdf), 2013 (дата обращения: 13.08.2022).
5. Гергель В.П. Суперкомпьютерное образование: понимание предметной области. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/superkompyuternoe-obrazovanie-ponimanie-predmetnoy-oblasti>, 2014 (дата обращения: 13.08.2022).
6. Computing Curricula 2020. URL: <https://www.acm.org/binaries/content/assets/education/curricula-recommendations/cc2020.pdf>, 2020 (дата обращения: 13.08.2022).
7. NSF/IEEE-TCPP Curriculum Initiative on Parallel and Distributed Computing - Core Topics for Undergraduates. Version 2.0. URL: <https://tcpp.cs.gsu.edu/curriculum/?q=system/files/TCPP%20PDC%20Curriculum%20V2.0beta-Nov12.2020.pdf>, 2020 (дата обращения: 13.08.2022).