УДК 519.71

Дідик О. О., Вартузов В. В., Шкурдода С. В.,
Литвиненко В. І., Фефелов О. О.

СТРУКТУРНО-ПАРАМЕТРИЧНИЙ СИНТЕЗ КОЛЕКТИВІВ ВЕЙВЛЕТ-НЕЙРОННИХ МЕРЕЖ ДЛЯ РОЗВ'ЯЗАННЯ ЗАДАЧ ІДЕНТИФІКАЦІЇ ГЕОГРАФІЧНОГО ПОХОДЖЕННЯ КОНОПЛІ НА ОСНОВІ ДАНИХ МАС-СПЕКТРОМЕТРІЇ

Для визначення географічного походження коноплі по їх хроматограммам запропоновано використовувати методологію синтезу колективу бінарних класифікаторів на основі вейвлет- нейронних мереж за допомогою процедури клонального відбору. Проведені обчислювальні і порівняльні експерименти, показана ефективність розв'язання задач допомогою запропонованою методології

Ключові слова: *наркотичні засоби, коноплі, вейвлет-нейронні мережі, структурно-параметричний синтез, алгоритм клонального відбору.*

Для определения географического происхождения конопли по их хроматограммам предложено использовать методологию синтеза коллектива бинарных классификаторов на основе вейвлет- нейронных сетей с помощью процедуры клонального отбора. Проведены вычислительные сравнительные эксперименты, показана эффективность решения задач с помощью предложенной методологи.

Ключевые слова: *наркотические средства, конопля, вейвлет-нейронные сети, структурно-параметричний синтез, алгоритм клонального отбора.*

To determine the geographic origin of cannabis on their chromatograms suggested using the methodology of the synthesis group of binary classifiers based on wavelet neural networks using the procedure of clonal selection. Conducted a comparative computational experiments, the efficiency of problem solving with the help of the proposed methodology.

Key words: *drugs, cannabis, wavelet neural networks, structural and parametric synthesis algorithm of clonal selection.*

Вступ

Аналіз слідчої, судової і експертної практики показує, що при розслідуванні кримінальних справ різних категорій нерідко як речові докази виступають наркотичні засоби, психотропні речовини, їх аналоги, лікарські засоби, сильнодіючі і отруйні речовини. Ці ж об'єкти, а також сировина для їх кустарного виробництва або промислового виготовлення є основними доказами при розслідуванні кримінальних справ, пов'язаних з їх незаконним виготовленням, придбанням, зберіганням, перевезенням, пересилкою, збутом і ін. Судово-експертне дослідження наркотичних засобів, їх аналогів може здійснюватися в рамках криміналістичної, судово-біологічної, судово-медичної, фармацевтичної і токсикологічної експертиз. У судово-експертних установах системи вказані об'єкти залежно від характеру вирішуваних питань досліджуються в рамках криміналістичної, судово-біологічної, а також в рамках судово-хімічної експертизи. Підставою для розділення перерахованих вище експертиз служать предмет (завдання) і методики дослідження. Своєрідність наркотичних засобів даного типа полягає в простоті здобуття і доступності сировини для їх виготовлення. Для цієї мети можуть бути використані як посівні коноплі, що широко культивуються в Україні, так і дикорослі коноплі, найбільш поширені в Середній Азії.

Криміналістичне дослідження даних об'єктів проводиться із застосуванням комплексу методів, що забезпечують науково обґрунтоване вирішення поставлених питань. Типова схема криміналістичного дослідження даних об'єктів включає методи експертного огляду, морфологічного аналізу; методи дослідження молекулярного, елементного і фазового складів, визначення кількісного вмісту компонентів; оцінку виявлених ознак і формулювання виводів. Вибір конкретної схеми дослідження залежить від вирішуваного завдання, досліджуваного об'єкту і технічних засобів, що є у розпорядженні експерта.

Важливу інформацію про вихідну сировину, умови кустарного виробництва, зберігання і вживання може дати виявлення в досліджуваних об'єктах сторонніх домішок і речовин – ґрунту, тютюну, кристалічних речовин, рослинних і інших матеріалів, розчинників. Вже на даній стадії дослідження експерт може зробити попередню диференціацію наркотичних засобів за технологією добуття, використаною сировиною, умовам зберігання і так далі. Важливу роль в дослідженні молекулярного складу наркотичних засобів належить фізико-хімічні методам таким як мас-спектрометрія. Даний метод хімічного аналізу використовуються для встановлення класу, групи органічних речовин, що містяться в досліджуваному об'єкті.

При дослідженні наркотичних засобів, що отримуються з рослини конопель, визначається вміст основних каннабіноїдів конопель – тетрагідроканнабінола (ТГК), каннабідіола (КБД), каннабінола (КБН), їх пропільних гомологів, а також інших компонентів, присутніх в малих кількостях.

Коноплі містять психоактивні речовини, каннабіноїди, зокрема Δ9-тетрагідроканнабінол, і служить сировиною для популярних наркотиків (марихуана, гашиш). Хімічні речовини, що надають дурманну або цілющу дію, зосереджені головним чином в клейкій золотистій смолі, яка виділяється з квіток на жіночих рослинах. Функція смоли полягає в захисті квітки від перегріву і в збереженні вологи в період розмноження.

Основною ідеєю даного дослідження є, то що своєрідність наркотичних засобів з конопель різних регіонах України, що вилучаються, обумовлено наступними причинами:

– особливістю метаболізму рослин, зв'язаних з умовами довкілля;
– умовами зберігання сировини;
– наявністю сторонніх домішок грунту і др.;
– специфіки технології виготовлення.

Враховуючи дані аргументи можна передбачити, що для вирішення завдання ідентифікації географічного походження конопель доречне вживання методів інтелектуальної обробки даних (data mining).

Зразки конопель надані представниками повноважних органів з різних регіонів України. У дослідженні будемо використовувати зразки з таких регіонів України як Черкаська та Сумська області та Автономна Республіка Крим.

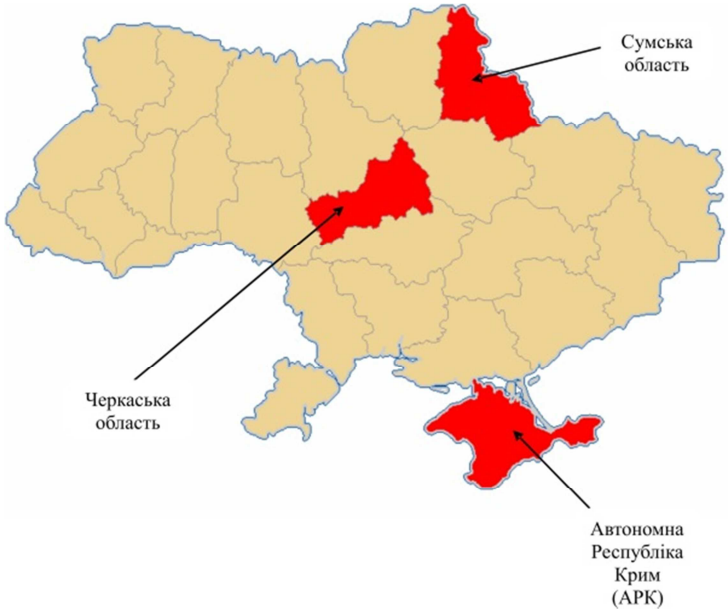

Рис. 1. Розташування відібраних зразків з регіонів України

Основною гіпотезою даного дослідження є те, що своєрідність наркотичних засобів з конопель різних регіонах, що вилучаються, України обумовлене наступними причинами:

– особливістю метаболізму рослин, зв'язаних з умовами навколишнього середовища;
– умовами зберігання сировини;
– наявністю сторонніх домішок ґрунту й ін.;
– специфіки технології виготовлення.

Хімічні характеристики природних і напівсинтетичних наркотиків деякою мірою пов'язані з певними географічними регіонами, оскільки в межах одного регіону фактори, що впливають на змісти в пробах наркотиків природних домішок (наприклад ґрунт, кліматичні умови і т. д.), можуть бути досить подібними. Крім того, підпільне виробництво наркотиків усередині одного регіону, як починають, здійснюється з використанням тих самих технологій. Внаслідок цього проби того самого виду наркотиків, виготовлених різними виробниками в одній і тій же країні або регіоні містить однакову процентну частку тих самих основних виробничих домішок і тому теоретично можуть бути класифіковані в одну групу (основа для визначення регіону, звідки відбувається даний наркотик).

У результаті, у тих випадках, коли в пробі наркотику виявляється структура змісту домішок, властива відомої технології виробництва, і ця структура має характерні риси, походження проби можна зв'язати з географічним регіоном або регіонами, де, як відомо, застосовується дана технологія. Більше того, дана проба може бути пов'язана з яким-небудь конкретним регіоном походження, якщо її профіль змісту домішок має ту ж характерну структуру домішок, що й проба, про яку точно відомо, що вона походить із цього регіону. Неодмінною умовою цього є наявність набору свіжих проб установленого походження, що втримуються в належних умовах і досить репрезентативних. Аналогічним образом може бути ідентифіковане походження проб сировини (наприклад, листи коки, опію, рослини конопель).

Враховуючи дані аргументи можна припустити, що для розв'язання задачі ідентифікації географічного походження коноплі доречні застосування методів інтелектуальної обробки даних (data mining).

Масс-спектрометрия

Мас-спектрометрія є універсальним аналітичним вимірювальним методом прецизійного контролю складу наркотичної речовини Мас-спектрометричні методи дозволяють аналізувати склад зразка, так і склад домішок у ньому, причому чутливість мас-спектрометрії до домішок перевищує можливості будь-яких інших аналітичних методів [1-4].

Аналізована речовина (звичайно в розчині) уводиться у випарник хроматографа, де миттєво випаровується, а пари в суміші з газом носієм під тиском надходять у стовпчик. Тут відбувається поділ суміші, і кожний компонент у струмі газом носієм в міру элюірування зі стовпчика надходить у молекулярний сепаратор. У сепараторі газ носій в основному віддаляється й збагачений органічною речовиною газовий потік надходить в іонне джерело мас-спектрометра, де молекули іонізуються. Число іонів, що утворюються при цьому, пропорційно кількості речовини. За допомогою встановленого в мас-спектрометрі датчика, що реагує на зміну повного іонного струму, записують хроматограми Мас-спектрометр можна розглядати як універсальний детектор до хроматографа. Одночасно із записом хроматографи будь-якій її крапці, звичайно на вершині хроматографічного піка, можуть бути зареєстрований мас-спектр, що дозволяє встановити будову речовини.

Важлива умова роботи приладу – швидкий запис мас-спектра, який повинен реєструватися за час, набагато менше, чому час виходу хроматографічного піка. Повільний запис мас-спектра може спотворити співвідношення інтенсивність піків у ньому. Швидкість реєстрації мас-спектра (швидкість сканування) визначається мас-аналізатором. Найменший час сканування повного мас-спектра забезпечує квадрупольний аналізатор. У сучасних мас-спектрометрах, побудова хроматограм і обробка мас-спектрів проводиться автоматично. Через рівні проміжки часу в міру елюірування компонентів суміші реєструються мас-спектри, кількісні характеристики яких накопичуються в пам'яті мікропроцесора. Для кожного сканування проводиться додавання інтенсивність усіх іонів що реєструються. Т. к. ця сумарна величина (повний іонний струм) пропорційна концентрації речовини в іоннім джерелі, то її використовують для побудови хроматограми (ця величина відкладається по осі ординат, по осі абсцис – час утримання й номер сканування). Задаючи номер сканування, можна викликати з пам'яті мас-спектр у будь-якій крапці хроматограми. Типова хроматограма коноплі показано на рис. 2.

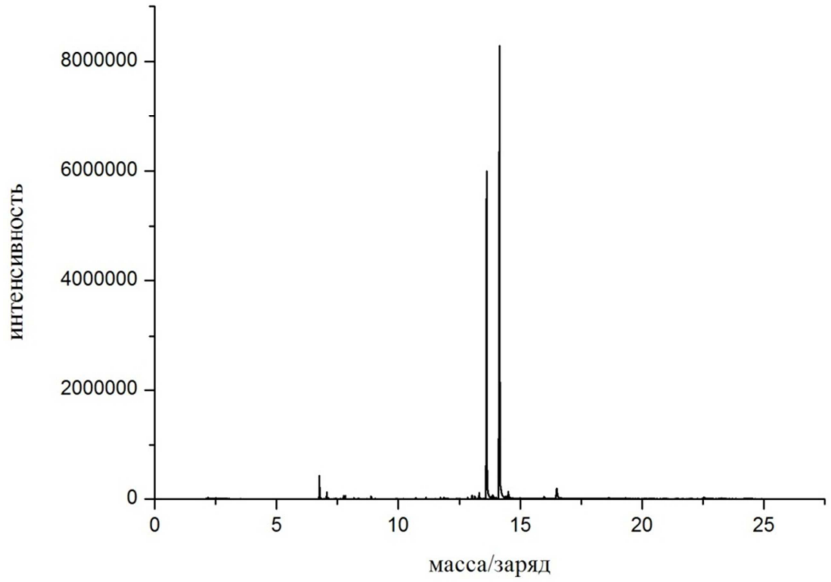

Рис. 2. Хроматограма коноплі

Завдання програмних засобів мас-спектрометрів, призначених для виявлення й оцінки параметрів корисних сигналів, виявлених з неопрацьованих сигналів, що містять шуми й наведення, а також для фільтрації сигналів, полягають у забезпеченні необхідної точності аналізу й у зниженні навантаження на аналітичну частину мас-спектрометра, що забезпечує рішення прецизійних завдань аналізу [3-4].

Питанням обробки сигналів різного типу присвячена велика кількість теоретичних досліджень як в області математичної статистики і її прикладних напрямків так і в області інтелектуальної обробки даний (data mining). Як правило, це − загальнотеоретичні дослідження, вони не прив'язані до конкретних сигналів. Найчастіше дуже привабливі в теоретичному плані підходи виявляються непридатними певних конкретних задач. Для розробки оптимальних методів, що дозволяють найбільше точно та швидко оцінити параметри реальних мас-спектрометричних сигналів, необхідне вивчення існуючих підходів, що й знову з'являються, до обробки сигналів і ранжирування їх можливостей по відношенню саме до задач мас-спектрометричного експерименту.

Постановка задачі. Раніше в роботі [5] нами була показана його ефективність розробленого нами алгоритму синтезу колективу бінарних класифікаторів на основі вейвлет- нейронних мереж за допомогою алгоритму клонального відбору, для рішення еталонних завдань класифікації. У даній роботі ставиться завдання дослідження розробленої методологи для рішення завдань класифікації мас-спектрів, а також порівняльні дослідження його роботи на еталонних завданнях класифікації.

Методи та данні. Для попередньої обробки даних використовувався пакет Matlab 7.0 Bioinformatics Toolbox і набір програм з пакета WEKA : http://www.cs.waikato.ac.nz/ ml/weaka.

Вихідні дані характеризувалися високою розмірністю. Завдання полягало в класифікації мас-спектрів: 1. Хроматограми конопель Кримської АР; 2. Хроматограми коноплі Сумської області; і 3. Хроматограммы коноплі Черкаської області. Усього використовувана база даних мас-спектрів містила 450 хроматограм.

Попередня обробка хромато- мас-спектрограм. Перед класифікацією дані хроматограф мас-спектрів повинні пройти кілька етапів попередньої обробки. Найчастіше використовуються такі етапи (рис. 3):

Рис. 3. Аналіз даних хроматограф мас-спектрів

Хроматорами мас-спектроскопії, звичайно, містять мінливу опорну лінію. Її зміни викликані «хімічним шумом» у матриці або перевантаженням іонів. Якщо вхідні дані не вирівняні по базовій лінії, то цей крок повинен виконуватися. Нормалізація виконується, щоб зробити дані незалежними від експериментальних змін (таких, як зміна кількості білка, деградації в зразку або змін у чутливості датчика), і вона робить різні спектри здатними до порівняння. Щоб зробити це можливим, відносна інтенсивність спектрограм нормалізується. Існує глобальна нормалізація, яка нормалізує інтенсивність сигналу через кілька зразків, щоб ідентифікувати й вилучити зміни між цими зразками, як описано вище. Нормалізація полягає в обрізці перших низьких мас-спектрів, у яких висока частота і високий шум, що може спотворити нормалізацію. Потім знаходиться інтенсивність кожного спектра, й усі спектри масштабуються таким чином, щоб відповідати інтенсивностям. Ми використовували в роботі пряму нормалізацію (1):

$$I_{j_{norb}} = \frac{I_j - I_{\min}}{I_{\max} - I_{\min}}. \qquad (1)$$

Коригування мас-дрейфу здійснює переміщення цілого спектра на один або більше кроків уперед або назад, якщо це зможе поліпшити кореляцію цього спектра з іншими зразками. Процес виконується в такий спосіб:

1. Спочатку вилучаються пікові області із усіх спектрів. Це виконується знаходженням спектра та ідентифікацією пікових областей, де спектр вище середнього.

2. Потім створюється ітераційна процедура для знаходження відповідності двох спектрів. Перший спектр не рухається, а другий переміщається уліво або вправо один раз за крок доти, доки кореляція двох спектрів покращиться.

3. Визначається відповідність спектрів їх копіям (якщо такі є), і потім відповідність кожного спектра значимому спектру. Через те, що значимий спектр буде мінятися відповідно до цих переміщень, процедура, можливо, буде виконуватися 2 або 3 рази до стабілізації.

Основну інформацію в спектрі речовин несуть піки – кожен пік відповідає тому чи іншому хімічному елементу, його висота несе інформацію про його кількості в речовині. Тому кінцевою метою спектрального аналізу є виявлення піків у спектрах речовин.

Метод головних компонентів (МГК) включає математичну процедуру, яка перетворює деяку кількість можливих корельованих змінних у менше число некорельованих змінних, які називають головними компонентами.

Для попередньої обробки та відбору ознак в роботі використовувалася мова R (www.riti-project.org) і Matlab.

Для навчання було відібрано по 70 % з першого і 70 % із другого наборів.

Дані хромато мас-спектрометрії зазвичай показують базову лінію, що змінюється під впливом хімічного шуму в матриці або перевантаження іонів. Оцінюємо низькочастотну базову лінію, яка прихована серед високочастотного шуму і сигнальних піків.

У експериментах, що повторюються, також прийнято знаходити систематичні відмінності в загальній сумі виділених і іонізованих білків. Наприклад, один з багатьох методів для нормалізації значення спектрограм – це повторне вимірювання максимальної інтенсивності кожного сигналу до певного значення. Регулюємо базову лінію набору спектрограм і показуємо тільки другу і її фон. В результаті обробки мас-спетрів за допомогою методу головних компонент були відібрані атрибути мас-спектрів з відношенням маса/заряд в діапазоні від 70 атрибутів, при яких класи мають вагомі відмінності.

Архітектура вейвлєт- нейронної мережі, використовуваної в даній роботі для розв'язання задачі класифікації представлено на рисунку 1. Нейрони прихованого шару – це вейвлєт-нейрони, що містять у собі вейвлєт, що настроюється. У якості параметрів вейвлєту використовується його масштаб (s) і зсув (t) по часовій осі. Вейвлєт-Нейронні мережі використовують сімейства вейвлєтів, утворених з одного материнського за допомогою застосування до нього операцій масштабування й зсуву. Побудова оптимального сімейства похідних вейвлєтів є основною задачею навчання вейвлєт- нейронної мережі.

Вихідний шар містить звичайні лінійні або сигмоїдні нейрони й шляхом настроювання своїх ваг (W^l) визначає вихід мережі.

Ґрунтуючись на представленій архітектурі й за умови, що $p = 1$ (для часового ряду), вихід нейронної мережі буде визначатися в такий спосіб:

$$y_i = \sum_{k=1}^{m} w_k^l \Phi_k\left(x, S_k, T_k\right), \tag{2}$$

де $x = (x_1, x_2, ..., x_n)$, $x \in X \subset \Re_n$ – довільний n-*мірний* вектор вхідних змінних; $w_k^l \in W^l$ – ваги лінійного шару, S_k – параметри масштабу для нейронів прихованого шару; T_k – параметри зсуву для нейронів прихованого шару;

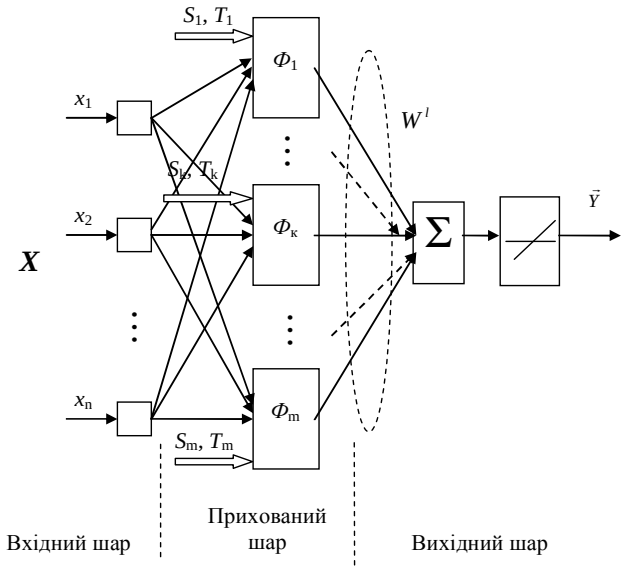

Рис. 4. Узагальнена архітектура вейвлєт нейронної мережі для розв'язання задач класифікації

Ґрунтуючись на архітектурі нейронної мережі (рис. 4), у якості параметрів, що настроюються, можна виокремити наступні :

f_1	t_{11}	…	t_{1n}	w_1	s_1	…	f_m	t_{m1}	…	t_{mn}	w_m	s_m	a

Рис. 5. Кодування параметрів, що настроюються, вейвлєт нейронної мережі у вигляді антитіла (хромосоми), де: n – кількість входів; m – кількість нейронів; f – вкл/викл нейрон (0 або 1); t – параметр зсуву для нейронів прихованого шару; w – синаптичні ваги вихідного шару; s – параметр масштабу для нейронів прихованого шару; a – параметр функції активації вихідного нейрона

Процедура адаптивного синтезу колективів вейвлєт нейронних мереж для задач класифікації

Теорія й практичне застосування клонального добору для розв'язання задач апроксимації й синтезу вейвлєт мереж описані нами в роботі [15]. У даній роботі нами вперше запропонована методологія синтезу РБФ- і вейвлєт нейронних мереж для синтезу у вигляді колективу бінарних класифікаторів. Узагальнено процедура синтезу кожної окремої нейронної мережі для кожного класу здійснюється відповідно до процедури, яка представлена на рис. 6.

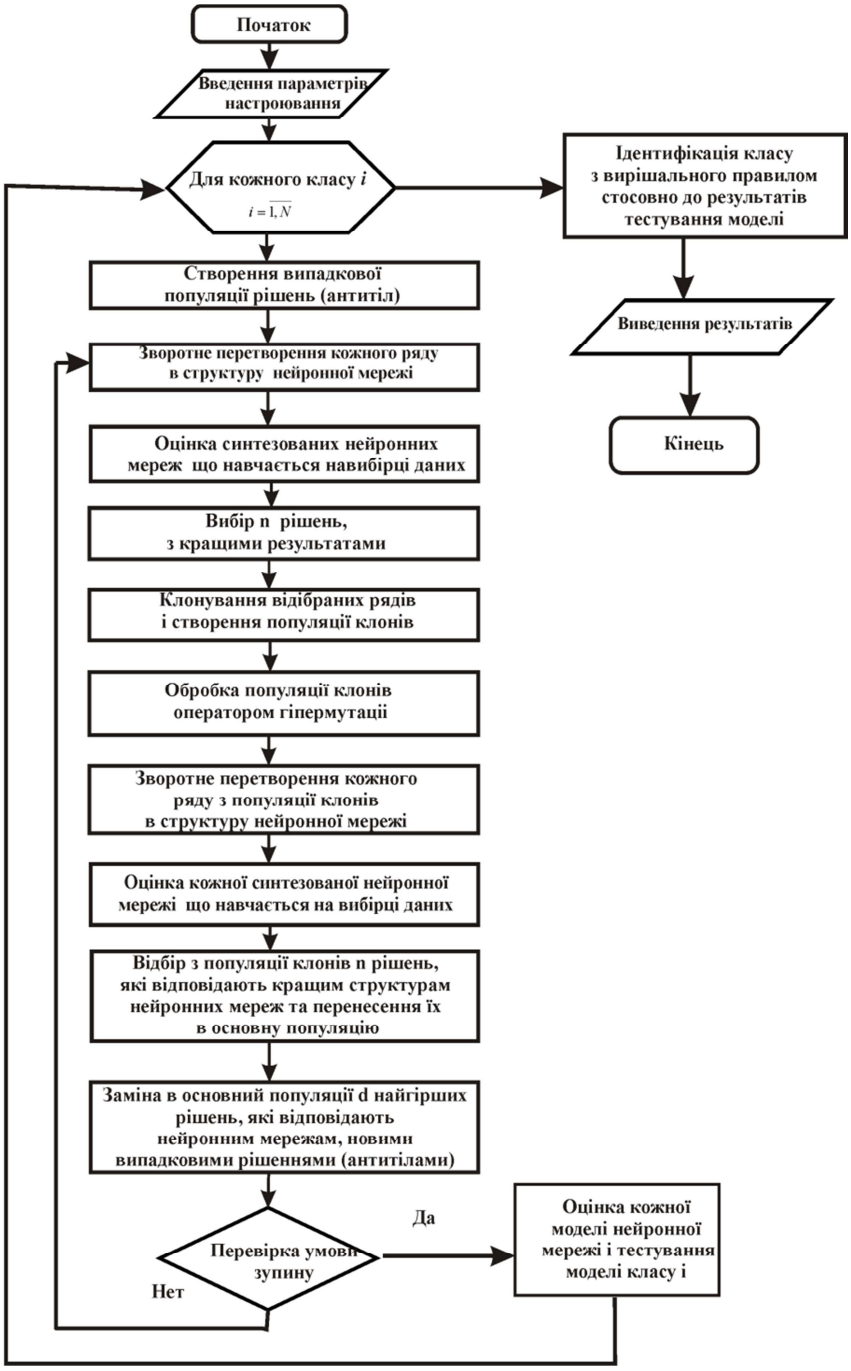

Рис. 6. Процедура синтезу вейвлєт- нейронної мережі алгоритмом клонального добору

У даній роботі досліджується синтез вейвлєт-нейронних мереж, що класифікують, при цьому класифікатором у загальному випадку називається функція, яка по вектору ознак об'єкта виносить рішення, якому саме класу він належить:

$$F : \Re^n \to Y. \tag{3}$$

При бінарній класифікації ідентифікатори класів можна інтерпретувати як стани системи (активне або пасивне, нормальне або аномальне), які представлені рядом властивостей. Типи базисних функцій, їх кількість, тип і параметри активаційної функції лінійного шару задаються як параметрів ШІС.

Навчання й синтез колективів нейронних мереж здійснюється за схемою, зображеною на рис. 7.

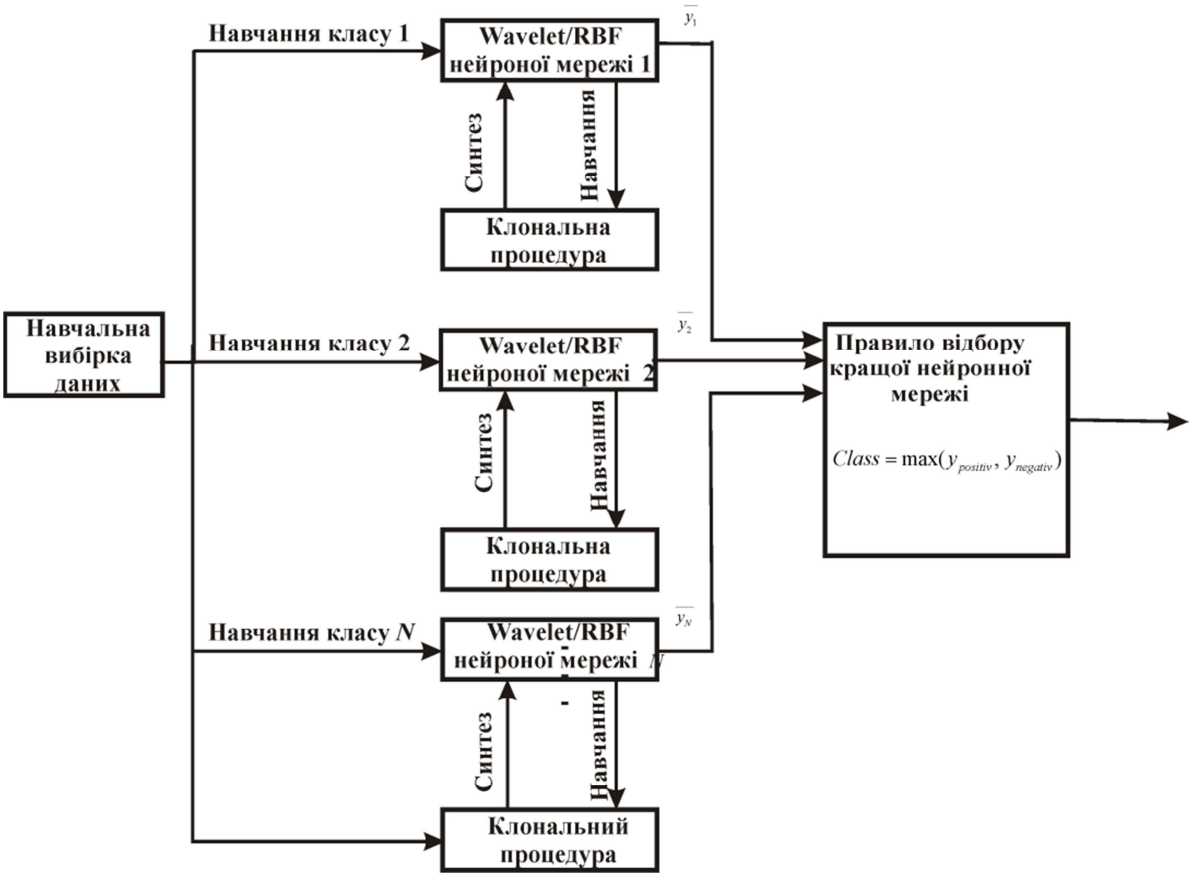

Рис. 7. Синтез колективу бінарних класифікаторів вейвлєт-нейронних мереж

У якості цільової функції й функції афінності вибрана середньоквадратична похибка мережі на даних для навчання. Процедура навчання має наступні особливості реалізації:

– селекція реалізована за принципом турнірного добору, що дає можливість керувати збіжністю процедури й підтримувати різноманітність популяції на необхідному рівні;

– внаслідок специфіки двійкового кодування, запропонована схема мутації, згідно з якою ймовірність зміни окремого біта рядка залежить не тільки від афінності антитіла в цілому, але й від значимості цього біта.

У контексті задачі класифікації настроювання мережі полягає в пошуку функції $y : \Re_n \to \Re$, що задовольняє рівнянню (1) при p = 1. Нехай є вибірка, що складається з S навчальних точок даних: $X_1, ..., X_S, X_i \in \Re_n$. Якщо відомі вихідні значення для кожної із цих точок $d_1, ..., d_S$, $d_i \in \Re$, то кожна базисна функція може бути центрована на одній із точок X_i. Отже, у граничному випадку, число центрів, і, відповідно нейронів прихованого шару, буде рівним числу точок даних навчальної вибірки: $m = S$.

Синтез колективу нейронних мереж, де кожна нейронна мережа розпізнає лише один єдиний клас здійснюється аналогічно із процедурою описаної для вейвлєт нейронних мереж (рис. 6).

Ідентифікація стану системи здійснюється по виразу (8):

$$Class = \max(y_{positiv}, y_{negativ}) \tag{4}$$

Отбор нейронных сетей осуществлялся по выражению(5):

$$\begin{aligned} Class_1 &= \max(y_{позитивний}, y_{негативний}); \\ Class_2 &= \max(y_{позитивний}, y_{негативний}); \\ Class_n &= \max(y_{позитивний}, y_{негативний}). \end{aligned} \tag{5}$$

Рис. 8. Графік збіжності алгоритму на навчальній вибірці для експерименту по класифікації мас-спектрів

Були проведенні порівняльні дослідження якості класифікації з іншими відомими імунними системами й алгоритмами в програмнім середовищі WEKA: Immunos-1, Immunos-2, Immunos-99 [6], AIRS1, AIRS2 [7-11], CLONALG [12-13], CSCA [14].

Таблиця 1

Результати порівняльного тестування сучасними імунними алгоритмами на точність класифікації

№ n/n	Алгоритми	% правильного розпізнавання
1	Розроблений алгоритм структурно-параметричного синтезу вейвлет-нейронних мереж	**97,2 %**
2	Immunos-1	83,5 %
3	Immunos-2	86,1 %
4	Immunos-99	80,3 %
5	AIRS1	84,3 %
6	AIRS2	85,6 %
7	CLONALG	86,0 %
8	CSCA	94,9 %

Висновки

У роботі показані результати досліджень застосування розроблених авторами алгоритму структурно-параметричного синтезу колективу вейвлет-мережі для рішення завдання класифікації мас-спектрів хроматорам наркотичних речовин (коноплі) . Розглянутий варіант рішення завдання демонструє високу ефективність застосування розробленого методу для розв'язання даного класу задач, що як апроксимують моделей мас-спектрів, що використовують паралельно-розподілену організацію обчислень. Доцільність їх використання пояснює їхньою високою гнучкістю, здатністю здійснювати паралельний пошук, стійкість до шуму, асоціативною пам'яттю, структурною пластичністю та високими адаптаційними здатностями.

ЛИТЕРАТУРА

1. Talrose V. L. Secondary Processes in the Ion Source of a Mass Spectrometer (Reprint from 1952). J. Mass Spectrom / V. L. Talrose, A. K. Ljubimova. – 1998. – 33. – P. 502–504.
2. Varmuza, W. Werther, J. Chem. Inf. Comput. Sci. 36 (1996) 323-333. Mass spectral classifiers for supporting systematic structure elucidation.
3. Манойлов В. В. Обнаружение, разделение и оценка параметров масс-спектрметричесиких пиков методом свертки экспериментальных данных с производными гауссовых функций / В. В. Манойлов, С. И. Сирвидас, И. В. Заруцкий, А. М. Ларионов // Научное приборостроение. – 1999. – Том 9, № 2. – С. 71–76.
4. W. McLafferty, S. Y. Loh, D. B. Stauffer, in: H. L. C. Meuzelaar (Eds.), Computer-enhanced analytical spectroscopy, Plenum Press, New York, 1990, p. 163-181. Computer identification of mass spectra.
5. Литвиненко В. И. Метдологія синтизу колекиву радіально-базисних мереж для розв'язування здач класифікації за допомогою алгоритму клонального добору / В. И. Литвиненко, А. А. Фефелов, А. А. Дидык // Наукові праі : науково-методичний журнал. – Миколаїв : Вид-во ЧДУ ім. Петра Моили, 2009. – Т. 6 Вип. 93. Комп'ютені технології. – С. 111–123.
6. Brownlee, J. Immunos-81. The misunderstood artificial immune system; Technical Report No. 3-01; Centre for Intelligent Systems and Complex Processes (CISCP), Faculty of Information and Communication Technologies (ICT), Swinburne University of Technology (SUT), Victoria, Australia: 2005.
7. Watkins, A.; Timmis, J.; Boggess, L. Artificial immune recognition system (AIRS): An immune-inspired supervised learning algorithm. *Genet. Programm. Evolv. Mach.* **2004**, *5*, 291-317.

8. Meng, L.; van der Putten, P.; Wang, H. A comprehensive benchmark of the artificial immune recognition system (AIRS). In *Advanced Data Mining and Applications, Proceedings*, 2005; Vol. 3584, pp 575-582.
9. Watkins, A. B. AIRS: A resource limited artificial immune classifier. Mississippi State University, 2001.
10. Watkins, A. B. Exploiting immunological metaphors in the development of serial, parallel and distributed learning algorithms. University of Kent, Canterbury, UK, 2005.
11. de Castro, L. N.; Von Zuben, F. J. The clonal selection algorithm with engineering applications. In GECCO-2000: Proceedings ofthe Genetic and Evolutionary Computation Conference, July 10-12,2000, Las Vegas, Nevada, 12. Whitley, D.; Goldberg, D.; Cantu-Paz, E.; Spector, L.; Parmee, I.; Beyer, H.-G., Eds. Morgan Kaufmann: San Francisco, CA, 2000; pp 36-37.
12. de Castro, L. N.; Von Zuben, F. J. Learning and optimization using the clonal selection principle. IEEE Trans. Evol. Comput. **2002**, 6, 239-251.
13. Brownlee, J. Clonal selection theory & CLONAG. The clonal selection classification algorithm (CSCA); Technical Report No. 2-02; Centre for Intelligent Systems and Complex Processes (CISCP), Faculty of nformation and Communication Technologies (ICT), Swinburne University of Technology (SUT), Victoria, Australia: 2005.
14. Дидык А. А. Применение иммунных алгоритмов для решения задач классификации масс-спектров / А. А. Дидык, В. И. Литвиненко, С. В. Шкурдода, А. А. Фефелов // Збірник наукових праць у двох томах міжнародної наукової конференції Інтелектуальні системи прийняття рішень та проблеми обчислювального інтелекту. – Євпаторія, 2009. – Том 2. – С. 304–309.
15. Описание свойств наркотиков/составление профилей содержания примесей. Основные понятия и концепции. Руководство для национальных правоохранительных органов и лабораторий экспертизы наркотиков. ST/NAR/32/Rev. 1. – Нью-Йорк ООН, 2004.

Рецензенти: Кондратенко Ю. П., д.т.н., професор;
Казарєзов А. Я., д.т.н., професор

© Дідик О. О., Вартузов В. В., Шкурдода С. В.,
Литвиненко В. І., Фефелов О. О., 2010

Стаття надійшла до редколегії 20.12.2010 р.