

ВИБІР МЕТОДА ПОБУДОВИ ФУНКЦІЙ НАЛЕЖНОСТІ В УМОВАХ НЕПОВНОЇ ВИЗНАЧЕНОСТІ

Розглянуто методи побудови функцій належності, особливості їх застосування, переваги та недоліки. Обґрунтовано вибір метода визначення функцій належності нечіткої системи керування технологічним процесом при неповній визначеності.

Більшість методів побудови функцій належності пов'язані з обробкою експертних даних за результатами опитування фахівців та базуються на суб'єктивних судженнях. Серед відомих та широко розповсюджених методи:

- на основі парних порівнянь;
- з використанням статистичних даних;
- на основі експертних оцінок;
- параметричний підхід;
- на основі рангових оцінок та інші.

Метод побудови функцій належності на основі парних порівнянь [1] ґрунтується на обробці суджень експертів певної області, що формують матрицю оцінок $A = \| a_{ij} \|$. Оцінюється елемент x_i у порівнянні з елементом x_j з точки зору певної властивості S . Степені належності елементів x_i до множини S визначаються чисельними значеннями власного вектора W .

$$A \cdot W = \| a_{ij} \| \cdot \| w_i \| = 0;$$

$$w_1 + w_2 + \dots + w_n = 1;$$

$$\mu_S(x_i) = w_i.$$

Метод дає визначення міри неузгодженості, що характеризується власним значенням матриці $\lambda_{\max} > n$. При малому числі параметрів порівняння кожного з іншими сприяє підвищенню точності оцінки, але при великій кількості метод є трудомістким. Застосування метода є ефективним при відсутності об'єктивних даних, невеликій кількості параметрів, наявності обчислювальних потужностей та відсутності часових обмежень.

Метод побудови функцій належності з використанням статистичних даних відображає суспільний досвід фахівців щодо розподілу по підмножинах певної властивості, побудований на подіях минулого [1]. В якості степені належності елемента до множини приймається оцінка частоти появи значення $p = \frac{k}{n}$ з наступним віднесенням до нечіткого терму на

універсальній шкалі [0; 1]. Метод вимагає виконання умови, щоб у кожен інтервал шкали потрапляло однакове число експериментів. Отримані дані мають бути попередньо оброблені для усунення викривлень та забезпечення унімодалності функції. Для обробки статистичних даних використовують матрицю підказок, елементи якої обчислюються за формулою

$$k_j = \sum_{i=1}^n b_{ij} \text{ для кожного інтервалу. За перетвореними елементами матриці } c_{ij} = \frac{b_{ij} k_{\max}}{k_j}$$

$$\text{визначається функція належності } \mu_{ij} = \frac{c_{ij}}{c_{i\max}}.$$

Функції належності на основі експертних оцінок будуються заздалегідь заданою аналітичною функцією, ґрунтуючись на наближених точкових та інтервальних оцінках [1]. Експерти на основі власного досвіду та інтуїції можуть кількісно охарактеризувати інтервали шуканих значень параметрів. Для цього проводиться статистичне дослідження шляхом опитування відносно уявлення експертів про межі класів.

Завдання побудови функції належності для деякого числа K зводиться до пошуку параметрів точок переходу, де функція має значення 0,5.

$$\mu_k(u) = e^{-\alpha(K-u)^2}; \quad \alpha = \frac{4 \ln 0,5}{\beta^2}.$$

Параметричний підхід [1] побудови функцій належності ґрунтується на тому, що експерт може з впевненістю назвати точки, які точно належать чи не належать певній області, що характеризує ознаку. При цьому не потрібно абсолютно точного знання значень функції належності в усіх точках. Побудова відбувається шляхом визначення форми типової кривої та характерних точок, за якими апроксимується решта значень. Можуть використовуватися трикутні чи S-образні криві для опису лінгвістичних змінних.

Метод парного порівняння на основі рангових оцінок [2] ґрунтується на розподілі степені належності згідно з рангами елементів універсальної множини, що характеризують значимість елемента у формуванні певної властивості.

На основі матриці попарних порівнянь для кожного нечіткого терму формується матриця рангів елемента x_i , що характеризує його значимість у формуванні властивості, на основі якої визначаються функції приналежності

$$A = \begin{bmatrix} 1 & \dots & r_n \\ \dots & 1 & \dots \\ r_1 & \dots & 1 \end{bmatrix}; \quad \mu_A(x_n) = \left(\frac{r_1}{r_i} + \dots + \frac{r_n}{r_i} + 1 \right)^{-1}.$$

Метод побудови функцій належності за розподілом результатів спостережень застосовує кластеризацію експериментальних даних, за якою синтезують функції належності [3]. Використовується метод нечітких с-середніх при одній вихідній змінній та потенціальної функції з кластеризації за гірським методом при кількох вихідних змінних.

При застосуванні метода гістограм за аналогією зі статистикою розглядається функція щільності випадкової величини як функції належності відповідної субнормальної нечіткої множини [4].

Крім описаних є ще значне число методів – метод інтервальних оцінок, аналізу ієрархій, семантичного диференціала, прямого перелічування елементів і т.д.

Оскільки вибір функції приналежності значною мірою впливає на властивості нечіткої системи, то її визначення має важливе практичне значення. Тому у процесі проектування модулів нечіткого керування головною задачею є правильна побудова функцій належності та визначення на їх основі коректних нечітких правил [5]. При виборі методу має враховуватися складність отримання та обробки експертної інформації, а також її достовірність. При побудові нечітких систем автоматичного управління зазвичай застосовуються прямі методи.

У реальних системах при неповній інформації про значення змінних та їх розподіл, актуальною є побудова функцій належності через ідентифікацію параметрів за експериментальними даними з можливістю оптимізації для мінімізації похибки. Такий підхід має значні переваги, однією з яких є відсутність суб'єктивної оцінки при побудові функцій належності [3], однак цей метод потребує наявності нечіткої моделі «входи – вихід» та навчаючої вибірки.

Одним з підходів також є метод пошуку по таблицям [6] для генерації нечітких правил з числових даних. Першою фазою алгоритму є самоорганізація структури, що усуває необхідність гарного початкового розміщення функцій приналежності і повного апріорного знання всіх нечітких правил. У фазі навчання функції належності оптимізуються, що дозволяє адаптувати модуль нечіткого керування для вирішення конкретної задачі.

Список використаних джерел

1. Борисов А.Н., Крумберг О.А., Федоров И.П. Принятие решений на основе нечетких моделей: Примеры использования. – Рига: Зинатне, 1990. – 184 с.

2. Ротштейн А.П. Интеллектуальные технологии идентификации. – Винница: Универсум, 1999. – 320 с.
3. Штовба С.Д. Побудова функцій належності нечітких множин за кластеризацією експериментальних даних // Інформаційні технології та комп'ютерна інженерія. – 2006. – №2. – С. 92–95.
4. Дюбуа Д., Прад А. Теория возможностей. Приложения к представлению знаний в информатике. – М: Радио и связь, 1990. – 288 с.
5. Лазарева Н.М. Ідентифікація нечіткої моделі за числовими даними входу-виходу при невідомому способі керування об'єктом // Проблеми інформатизації: Матеріали XIII міжнародної науково-технічної конференції. – Київ: ДУТ, НТУ; Полтава: ПНТУ; Катовице: КЕУ; Париж: Університет Париж VII Венсант-Сен-Дені; Вільнюс: ВДТУ; Харків: ХНДІТМ; Білорусь: БДАЗ; Кропивницький: ЛА НАУ, 2019. – с. 137.
6. Chen Wei, Li-Xin Wang. Analysis of table look-up and clustering methods for designing fuzzy systems from input-output data. 14th Triennial World Congress of IFAC, Beijing, P.R. China, 1999. ISBN: 0 08 043248 4.

Науковий керівник: Руденко О.Г., д.т.н., професор.

Летич А.А., студент

*Інститут інформаційних технологій в економіці Київського
національного економічного університету імені Вадима Гетьмана
artem1letich@gmail.com*

ПЕРСПЕКТИВИ ВИКОРИСТАННЯ GENERATIVE AI ДЛЯ ПРИСКОРЕННЯ ПОШУКУ ЛІКІВ

Пошук нових ліків є складним і витратним процесом, який вимагає великої кількості часу, ресурсів та експертних знань. Востаннє розвиток штучного інтелекту, зокрема генеративних моделей (Generative AI), надав нові можливості в цьому напрямку.

Глибокі генеративні моделі, такі як варіаційні автокодери та генеративні змагальні мережі вважаються перспективними для обчислювального створення нових молекул завдяки їхнім найсучаснішим результатам у віртуальному синтезі зображень, тексту, мови та підписів до зображень. Віртуальне створення нових і оптимальних провідних зразків ліків вимагає вивчення та виконання багатоцільової оптимізації у величезному хімічному просторі, оскільки модель потребує оцінки та балансу між критичними факторами, такими як активність ліків, селективність, токсичність, легкість синтезу, стабільність тощо. Така багатоцільова оптимізація виконується за допомогою умовних генеративних моделей або методів оптимізації, таких як байєсівська оптимізація.

За допомогою штучного інтелекту можна прискорити процес створення нових препаратів, зменшити ймовірність виникнення помилок та збільшити точність результатів досліджень.

Однією з головних переваг використання Generative AI для пошуку ліків є можливість створення великої кількості варіантів структур ліків, що можуть бути потенційно ефективними. За допомогою алгоритмів глибинного навчання можна створити масу унікальних структур, які раніше не були відомі в науці. Наприклад, дослідження, проведені у 2021 році, показали, що за допомогою Generative AI було створено новий протизапальний препарат, який мав високу ефективність у лікуванні пухлинної фібрози.

Однак, на даний момент, перспективи використання Generative AI для пошуку ліків є тільки теоретичними і вимагають подальшого дослідження та розвитку. Один з головних викликів полягає у забезпеченні безпеки та ефективності створених препаратів. За допомогою Generative AI можна створити багато нових структур, але потрібно бути впевненим у тому, що вони безпечні для людини та не мають небажаних побічних ефектів.

Ще однією проблемою, з якою стикаються дослідники, є обмеженість даних для навчання алгоритмів Generative AI. Для створення ефективних препаратів потрібно мати