

На правах рукописи

Севастьянов Алексей Александрович

РЕШЕНИЕ ОБРАТНЫХ НЕКОРРЕКТНЫХ ЗАДАЧ  
В ПРИКЛАДНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ  
С ПОМОЩЬЮ ВЕЙВЛЕТ-АНАЛИЗА И НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

01.04.05 – оптика

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Казань – 2004

Работа выполнена на кафедре оптики и спектроскопии Государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Казанский государственный университет им. В.И. Ульянова-Ленина»

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,  
профессор Салахов Мякзюм Халимуллович

Научный консультант: кандидат физико-математических наук,  
ассистент Харинцев Сергей Сергеевич


Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,  
профессор Нигматуллин Равиль Рашидович  
  
кандидат физико-математических наук,  
доцент Михеев Игорь Дмитриевич

Ведущая организация: Саратовский государственный университет  
им. Н. Г. Чернышевского

Защита состоится «\_\_\_» мая 2004 г. В \_\_\_\_\_ часов на заседании диссертационного совета Д 212.081.07 в Казанском государственном университете по адресу: 420008, г. Казань, ул. Кремлевская, д. 18

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке им. Н.И. Лобачевского Казанского государственного университета

Автореферат разослан «\_\_\_» апреля 2004 г.

Ученый секретарь диссертационного совета  Сарандаев Е.В.

## Общая характеристика работы

**Актуальность темы исследования.** При обработке и интерпретации спектроскопического эксперимента основной проблемой являются искажения, возникающие на всех этапах работы реальных приборов. Улучшение параметров существующих приборов с помощью математических методов обработки информации позволяет получать более полную и достоверную информацию о физике исследуемого процесса.

В прикладной спектроскопии при обработке эксперимента приходится решать обратные задачи. Такие задачи часто оказываются некорректными, их решение возможно только с привлечением априорной информации об исследуемом объекте (регуляризация решения). Наиболее эффективным для решения спектроскопических задач является метод статистической регуляризации (МСР). Однако статистические регуляризирующие алгоритмы обладают рядом ограничений, наиболее существенными из которых являются предположения о стационарном характере и гладкости сигнала, а также о присутствии в спектре только некоррелированного гауссовского (белого) шума. В реальном эксперименте эти предположения часто не выполняются. Как правило, шум обладает сложной спектральной характеристикой с преобладанием низких частот (цветной шум), сигналы могут быть нестационарными. В таких случаях требуется разработка и привлечение новых математических методов для решения задач обработки спектроскопического эксперимента.

Преодолеть некоторые ограничения, присущие МСР, возможно с привлечением методов, основанных на концепциях вейвлет-анализа (ВА) и искусственных нейронных сетей (НС). Вейвлет-анализ, в отличие от анализа Фурье, обладает гибкостью в выборе базисной функции и позволяет осуществлять полосовую фильтрацию с параметрами, изменяемыми во времени. Методы, основанные на нейронных сетях, позволяют решать задачи, которые плохо поддаются формализации, когда входные данные не полны, зашумлены или противоречивы. С помощью НС можно получить устойчивое решение обратных некорректных задач при помощи методов регуляризации. Эти методы могут быть

использованы для получения более достоверных сведений об исследуемых объектах. Таким образом, исследования, проведенные в диссертационной работе, являются *актуальными и практически значимыми*.

**Целью работы** является разработка новых и привлечение существующих математических методов на основе вейвлет-анализа и нейронных сетей для решения обратных некорректных задач прикладной спектроскопии, таких как сглаживание данных и удаление шума, улучшение разрешения спектров, разделение сложных спектров на элементарные составляющие, решение уравнения Абеля для осесимметричной плазмы, учет аппаратной функции прибора и определение формы элементарных компонент в ИК спектрах в случае цветных шумов и нестационарных сигналов.

**Основные положения, выносимые на защиту:**

1. Методы повышения разрешения спектров на основе непрерывного вейвлет-преобразования и нейронных сетей позволяют выявлять сложную структуру ИК полос, состоящих из компонент, находящихся на расстоянии порядка их полуширины.
2. Нейронные сети с регуляризацией весов можно успешно применять для решения обратных задач, таких как сглаживание данных, дифференцирование, решение задачи Абеля и учет аппаратной функции прибора в случае белого и цветного шума, нестационарных и негладких сигналов.
3. Метод определения формы полос в молекулярных спектрах на базе нейронной сети Элмана позволяет производить классификацию элементарных компонент по форме контуров в классе известных моделей – контуров Гаусса и Лоренца.

**Научная новизна работы** состоит в следующем:

- Впервые предложены методы улучшения разрешения спектров на основе непрерывного вейвлет-анализа и нейронных сетей, которые позволяют выявлять сложную структуру ИК полос, не разрешаемую с помощью традиционных методов. Решен ряд задач прикладной

спектроскопии с цветным шумом в исходных данных с помощью предлагаемых подходов.

- Разработан новый способ получения базисов вейвлет-преобразования, позволяющих синтезировать вейвлеты, адаптированные для обработки спектроскопических сигналов.
- Разработан и реализован новый метод определения формы полос в молекулярных спектрах с помощью рекуррентной нейронной сети Элмана.

**Достоверность** полученных результатов и выводов обеспечивается корректностью математических подходов, тщательной отработкой и проверкой предлагаемых методик, применением математических методов, показавших свою эффективность при решении сходных задач. Анализ погрешностей восстановления исходных данных для возможных видов модельных сигналов, воспроизводимость получаемых решений и подтверждение их физическими экспериментами свидетельствует о достоверности результатов работы.

**Практическая ценность** работы заключается в том, что предложенные методы решения обратных спектроскопических задач на основе вейвлет-анализа и нейронных сетей могут быть использованы для более качественной и достоверной обработки экспериментальных спектров, особенно в случае сложных цветных шумов и нестационарных сигналов. Предлагаемые подходы также могут использоваться для исследования сложных спектров, составная структура которых не выявлялась ранее с помощью традиционных методов производной спектрометрии.

**Апробация работы.** Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на международной конференции “Inverse Ill-posed problems: Modeling & Simulating” (Fethiye, Turkey, 2002), на международной школе-конференции “Обратные задачи: теория и приложения” (Ханты-Мансийск, 2002), на международной конференции “Обратные и некорректно поставленные задачи” (Москва, 2001), на X всероссийской конференции “Структура и динамика молекулярных

систем”, (Казань, 2003), на второй молодежной научной конференции “Оптика-2002” (Санкт-Петербург, 2002), на III-VII всероссийских молодежных научных конференциях “Когерентная оптика и оптическая спектроскопия” (Казань, 1999, 2000, 2001, 2002 и 2003).

**Публикации.** По результатам диссертации опубликовано 17 работ, из них 10 статей в центральной научной печати и сборниках конференций, 7 тезисов докладов международных и российских конференций.

**Структура и объем работы.** Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и списка литературы. Объем работы составляет 124 страницы, включая 43 рисунка и 4 таблицы. Список цитированной литературы содержит 122 наименования.

### **Краткое содержание работы**

**Во введении** обосновывается актуальность темы исследования, сформулирована цель работы, изложены основные защищаемые положения, показана новизна результатов и их практическая значимость, приведены структура и содержание диссертации.

**В первой главе** формулируется постановка задач и описываются основы методов решения обратных задач прикладной спектроскопии, которые могут быть представлены в виде

$$K\varphi + \xi = f, \quad (1)$$

где  $f$  - искаженный шумом  $\xi$  выходной сигнал прибора  $K$ , на вход которого поступил сигнал  $\varphi$ . В работе приведен основной подход к решению обратных некорректных задач (ОНЗ). Рассматриваются основы метода статистической регуляризации и общая итерационная схема. Подробно излагается современное состояние теории вейвлет-анализа и искусственных нейронных сетей в объеме, необходимом для решения спектроскопических задач. В результате анализа этих методов даются рекомендации по их применению.

**Вторая глава** посвящена решению ОНЗ в случае белого и цветного шума методами вейвлет-анализа и с помощью нейронных сетей.

Предложен метод построения адаптированных базисов вейвлет-преобразования, основанный на кратно-масштабном анализе (КМА) [1-5]. Для того чтобы получить вейвлет, адаптированный к обработке спектров, в систему уравнений, следующих из принципов КМА, включено условие ортогональности коэффициентов базиса коэффициентам корреляционной функции сигнала:

$$\sum_{k=0}^N C_k h_k = 0, \quad C_k = \sum_{i=0}^P f_i f_{i+k}, \quad (2)$$

где  $C_k$  - коэффициенты корреляционной функции сигнала в виде контура Гаусса, заданного вектором  $f_i$ ,  $h_k$  - искомые коэффициенты, однозначно определяющие вейвлет. При решении новой системы уравнений получен гладкий вейвлет, похожий на функцию Гаусса. Это позволило уменьшить количество особенностей вейвлета по сравнению с вейвлетами Добеши. Гладкость и отсутствие паразитных осцилляций являются необходимыми свойствами вейвлета при обработке спектров методами ВА. Удаление шума из спектров в работе осуществлялось с помощью дискретного или стационарного вейвлет-преобразования.

Подробно описывается подход к решению ОНЗ с помощью НС с регуляризацией весов [6]. Основным преимуществом НС является их способность к обобщению, т.е. к сжатию информации и выделению главных деталей сигнала, за счет чего эффективно подавляется случайный шум. Однако для некоторых некорректных задач этого оказывается недостаточным. Тогда к процессу обучения сети можно применить методы байесовской регуляризации, которые сводятся к заданию целевой функции, подлежащей минимизации, в виде

$$E = \beta E_D + \alpha E_W, \quad (3)$$

где  $E_D$  - сумма среднеквадратичных ошибок сети на обучающем множестве,  $E_W$  - сумма абсолютных значений весов,  $\alpha$  и  $\beta$  - коэффициенты регуляризации. Регуляризация приводит к улучшению обобщающих свойств сети и повышению устойчивости к случайному шуму. Приведен вывод оптимальных значений для параметров

регуляризации. Описан пошаговый алгоритм обучения нейронной сети с байесовской регуляризацией (НСБР).

Приводятся результаты тестирования подходов на основе адаптированных вейвлетов и нейронных сетей с регуляризацией в задаче сглаживания модельных сигналов [1-9]. Произведено сравнение качества сглаживания между НСПР и НСБР на модельном сигнале в виде сложного контура. Показано, что с применением регуляризации ошибка сглаживания уменьшается, и задачу можно решать с меньшим количеством нейронов в скрытом слое. К тому же, в отличие от НСПР, увеличение количества нейронов не ухудшает устойчивости к случайному шуму. Рассматривается решение задачи сглаживания модельных сигналов в виде импульса (ступенька с пологим спадом), контура Гаусса и сложного спектра из шести компонент.

Произведено сравнение результатов работы алгоритмов в случае белого и цветного шума. В качестве примера на рис. 1 приведены зависимости квадратичной меры качества сглаживания импульсного сигнала с цветным шумом. Показано, что методы СВП с адаптированными вейвлетами обладают большей устойчивостью к случайному шуму по сравнению с МСР. Установлено, что при помощи НСБР возможно сглаживание сложных сигналов с тонкими деталями, разрывами производных, в том числе в случае, когда сигнал искажен низкочастотным цветным шумом.

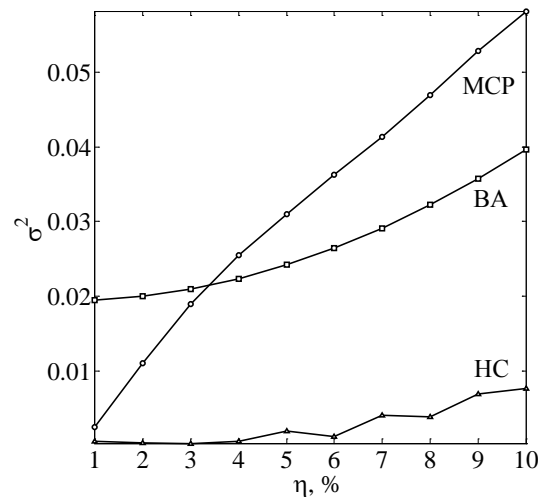


Рис. 1. Зависимость квадратичной меры  $\sigma^2$  от уровня шума  $\eta$ .

Приводится описание алгоритмов решения уравнения Абеля для осесимметричной плазмы методами стационарного вейвлет-преобразования с адаптированными вейвлетами и НСБР [8,10]. Формальное решение уравнения Абеля

$$\varepsilon(r) = -\frac{1}{\pi} \int_r^R (y^2 - r^2)^{-\frac{1}{2}} I'(y) dy \quad (4)$$



представляет собой некорректную задачу. Предложено получать оценку решения задачи Абеля с помощью ВА, удалив шумовые масштабы из разложения:

$$\langle \varepsilon \rangle_w = A^{-1} SWT_{\psi}^{-1} T(SWT_{\psi} I), \quad (5)$$

где  $SWT$  - оператор стационарного вейвлет-преобразования,  $T(\cdot)$  означает операцию обрезания шумовых масштабов (thresholding). Также можно построить регуляризованную оценку с помощью НСБР, обучив сеть осуществлять заданное преобразование

$$\langle \varepsilon \rangle_{\alpha, \beta} = A^{-1} R_{\alpha, \beta} I, \quad (6)$$

где  $A$  - оператор Абеля,  $R_{\alpha, \beta}$  - регуляризирующий оператор. Исследована эффективность работы предложенных алгоритмов в сравнении с МСР на модельных сигналах в виде простой и гладкой функции, ступеньки и сложной функции с двумя максимумами. Приведены зависимости средне-квадратичных ошибок от уровня шума.

Алгоритмы протестированы на сигналах с белым и цветным шумом. На рис. 2 в качестве примера приведены зависимости квадратичной меры от уровня шума в случае гладкой функции  $\varepsilon(r)$  при цветном шуме. Показано, что методы ВА имеют преимущество в случае простых и сложных гладких функций, отличаются высокой устойчивостью к шуму, в том числе

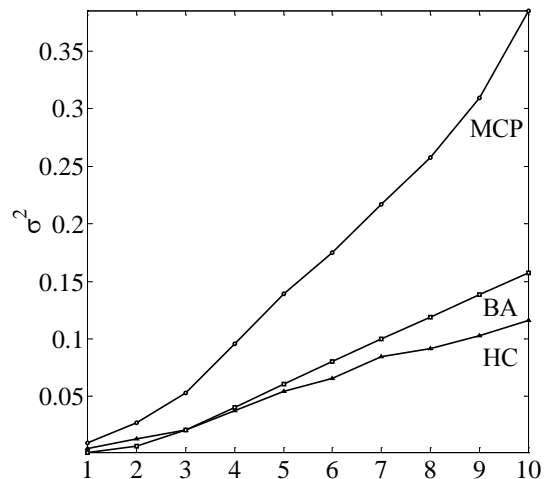


Рис. 2. Зависимость квадратичной меры  $\sigma^2$  от уровня шума  $\eta$  в решении задачи Абеля.

низкочастотному. В то же время НСБР позволяют более точно восстанавливать сложные сигналы, гладкие и с разрывами производных. Сделаны выводы, что методы адаптированного вейвлет-анализа и НСБР позволяют получать эффективную оценку решения уравнения Абеля в случае, когда при расчетах с помощью МСР решение сильно искажено.

Рассматривается задача учета аппаратной функции прибора. Для решения этой задачи были предложены подходы на основе стационарного вейвлет-преобразования с адаптированными вейвлетами и НСБР [2,4,6,9]. Эффективность предлагаемых алгоритмов исследуется в сравнении с МСР на модельных сигналах в виде одиночного и двойного контура Гаусса с белым и цветным шумом. Аппаратная функция была взята в виде функции Гаусса с полушириной, равной полуширине сигнала. В качестве примера на рис. 3. приведены зависимости меры восстановления  $\sigma^2$  от уровня шума. Показано, что методы вейвлет-анализа показывают лучшее качество восстановления исходного сигнала по сравнению с МСР и НСБР.

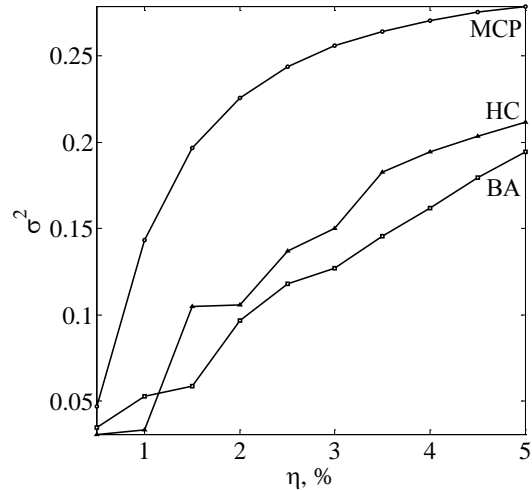


Рис. 3. Зависимость квадратичной меры  $\sigma^2$  от уровня шума  $\eta$  в задаче учета аппаратной функции прибора.

Излагается подход для улучшения разрешения сложного спектра на основе непрерывного вейвлет-преобразования (НВП) [11-13]. Поскольку операции дифференцирования и НВП коммутируют:

$$W(a,b)\left[\partial_t^n[f(t)]\right] = (-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \partial_t^n \left[\psi_{a,b}^*(t)\right] dt, \quad (7)$$

предложено перейти от дифференцирования исходной функции  $f(t)$  к дифференцированию вейвлета  $\psi_{a,b}(t) = (1/\sqrt{a})\psi[(t-b)/a]$ . В качестве анализирующих функций используются вейвлеты Гаусса 2-го и 4-го порядка. Предлагается подход по выбору оптимального масштаба на основе распределения энтропии вейвлет-коэффициентов по масштабам ВА.

Рассматривается метод повышения разрешения составных спектров на основе НСБР [14-16]. В сети для дифференцирования данных на выходе используются сигмоидальные функции активации, гладкие, многократно дифференцируемые и обладающие сжимающими свойствами. Следствием

таких свойств является тот факт, что оценка производной с помощью дифференцирующего слоя получается свободной от влияния случайных шумов. Методы повышения разрешения на основе НВП и НСБР тестируются на модельных сигналах в виде двойного контура Гаусса с разным расстоянием между компонентами. Исследуется эффективность предлагаемых алгоритмов в сравнении с МСР в задаче вычисления производных спектров, приводятся зависимости степени разрешения и квадратичной меры от уровня белого и цветного шума и расстояния между компонентами. Установлено, что методы повышения разрешения на основе НВП позволяют существенно улучшить степень разрешения спектров, а с помощью методов на базе НСБР можно в несколько раз уменьшить ошибку восстановления и избавиться от паразитных осцилляций на крыльях контуров.

Предложен и описан метод распознавания форм элементарных компонент в сложных спектрах на основе рекуррентной нейронной сети Элмана [14,16]. Предполагается, что в спектре содержатся полосы, описываемые контуром Гаусса или Лоренца. Количество компонент и их положения в спектре определяются с помощью методов повышения разрешения на основе НВП и НСБР. Перебираются все комбинации контуров с помощью МНК, полученные отклонения  $\sigma_0$ ,  $\sigma_1$  и  $\sigma_2$  вместе с положениями максимумов подаются на вход сети Элмана. На каждом выходе, соответствующем одной компоненте, должна быть “1” для профиля Лоренца и “0” – для Гаусса в пределах ошибок эксперимента. Метод протестирован на некоторых модельных сигналах, в работе приводится один из сложных для расчетов примеров, когда спектр состоит из двух контуров Гаусса и двух контуров Лоренца, находящихся на расстоянии полуширины.

**Третья глава** посвящена апробации предлагаемых методик для решения задач детектирования сложной структуры и определения параметров элементарных компонентов в ИК спектрах конформационно-неоднородных соединений [5,11-14,16,17]. С помощью предлагаемых методов повышения разрешения спектров, основанных на НВП и НСБР, удалось математически определить сложную структуру полосы  $695\text{ см}^{-1}$  колебательного спектра 1,9,10,11,12,12-гексахлор-4,6-диоксатрицикло [9,2,1,0<sup>2,8</sup>] додека-10-ене (ГХА), ранее предположенную экспериментально. На рис. 4 приведен спектр ГХА в  $\text{CS}_2$  и его четвертые производные, вычисленные с помощью МСР, НВП и НСБР. Показано, что полоса  $695\text{ см}^{-1}$  состоит из двух компонент.

Кроме того, в работе подтверждается сложная структура полосы  $573\text{ см}^{-1}$  ИК спектра 1,2-бромфторэтана (рис. 5). Путем применения методов НВП и НСБР удалось повысить разрешение производного спектра этой полосы.

На основе предлагаемых алгоритмов определено количество полос и их форма в ИК спектре 1,2-дифенилэтана (рис. 6). Установлено, что спектр состоит из 4-х компонент. С помощью нейронной

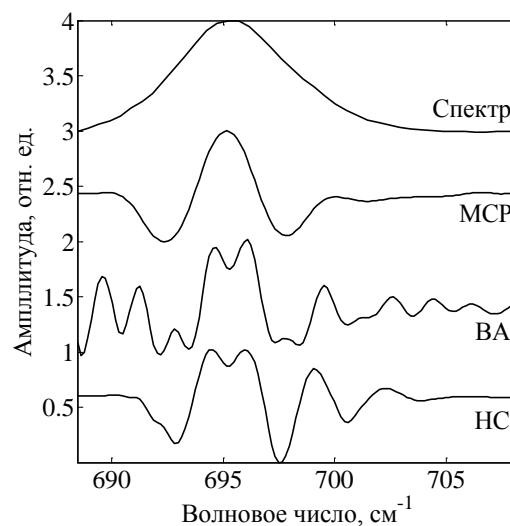


Рис. 4. ИК спектр ГХА и его четвертые производные.

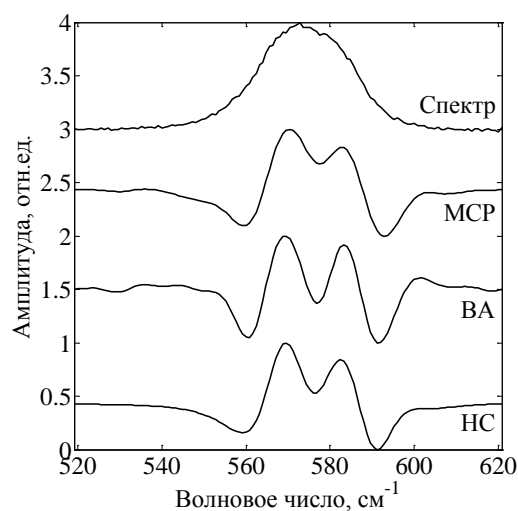


Рис. 5. ИК спектр 1,2-бромфторэтана и его вторые производные.

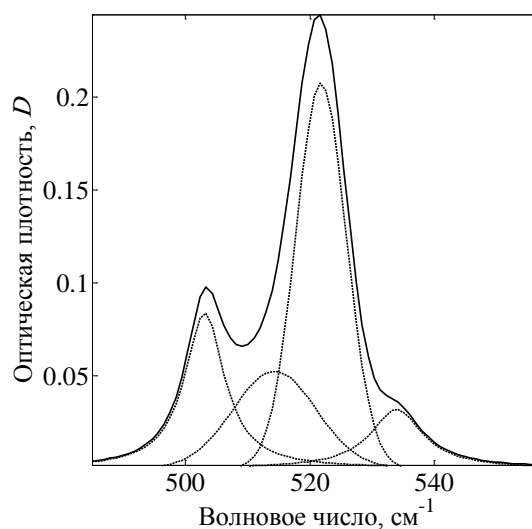


Рис. 6. ИК спектр 1,2-дифенилэтана.

сети Элмана показано, что две полосы описываются контуром Гаусса и две – контуром Лоренца. На основе полученных данных о количестве и форме компонент рассчитаны параметры каждой компоненты спектра, что позволяет производить конформационный анализ данного соединения.

### **Основные результаты и выводы**

1. Построены адаптированные вейвлеты на основе принципов кратномасштабного анализа, с включением условия ортогональности коэффициентов базиса корреляционной функции сигнала, который задается в виде контура Гаусса. Адаптированные базисы в дискретном и стационарном вейвлет-преобразовании позволяют повысить точность и устойчивость к случайному шуму при решении обратных некорректных задач прикладной спектроскопии, в том числе при наличии в исходных данных цветных шумов.
2. Показано, что нейронные сети с регуляризацией применимы для решения обратных задач прикладной спектроскопии, таких как сглаживание, дифференцирование, решение задачи Абеля, учет аппаратной функции прибора. Регуляризация весов по правилу Байеса улучшает обобщающие свойства сети, что позволяет эффективно подавлять случайный шум в исходных данных. Разработанные подходы для решения обратных задач с применением НСБР протестированы на модельных сигналах и апробированы на экспериментальных спектрах. Показана эффективность методов при обработке спектроскопического эксперимента с белым и цветным шумом.
3. Разработан метод повышения разрешения спектров на основе НВП. Показано существенное улучшение разрешения сложных спектров по сравнению с ПС на основе МСР, что позволяет выявить тонкую структуру составных полос, когда расстояние между компонентами сравнимо с их полушириной.
4. Разработан метод определения формы полос в молекулярных спектрах на базе рекуррентной нейронной сети Элмана, позволяющий производить классификацию элементарных компонент по форме полос в классе известных моделей - контуров Гаусса или Лоренца. Решены задачи

определения количества и формы полос модельных и экспериментальных ИК-спектров.

### Список авторской литературы

1. Sevast'yanov A.A. Regularized wavelets for processing non-stationary signals with a correlated noise / S.S. Kharintsev, M.Kh. Salakhov // Proc. SPIE. –2003. –V. 4605. –P. 63–71.
2. Севастьянов А.А. Регуляризованные вейвлеты в обработке экспериментальных данных / А.А. Севастьянов, С.С. Харинцев, М.Х. Салахов // V всероссийская молодежная научная конференция “Когерентная оптика и оптическая спектроскопия”: Сб. ст. –Казань, 2001. – С. 135–140.
3. Sevast'yanov A.A. Wavelets & Regularization of Inverse Ill-Posed Problems in Applied Spectroscopy / S.S. Kharintsev, A.A. Sevast'yanov, M.Kh. Salakhov // Int. conf. Inverse Problems: Theory & Applications: Contr. papers –Khanty-Mansiysk, 2002. –P. 137-139.
4. Севастьянов А.А. Регуляризованные вейвлеты в обратных некорректных задачах / С.С. Харинцев, А.А. Севастьянов, М.Х. Салахов // Международная конференция “Обратные и некорректные задачи”. – Москва, 2001. –С. 87.
5. Sevast'yanov A.A. Regularization of Inverse Ill-Posed Problem With Wavelets in Applied Spectroscopy / S.S. Kharintsev, A.A. Sevast'yanov, M.Kh. Salakhov // International conference Inverse Ill-posed problems: Modeling & Simulating: Abstracts –Turkey, Fethiye, 2002. –P. 183.
6. Севастьянов А.А. Нейросетевая регуляризация решения обратных некорректных задач прикладной спектроскопии / А.А. Севастьянов, С.С. Харинцев, М.Х. Салахов // Электронный журнал “Исследовано в России”. –2003. –№ 189. –С. 2254-2266.  
<http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2003/189.pdf>
7. Севастьянов А.А. Влияние Pd-Mg модификатора, магнитного поля и газовых потоков на динамику паров матрицы в графитовом атомизаторе с поперечным нагревом / А.В. Волошин, А.Х. Гильмутдинов, Ю.А. Захаров // Журнал аналитической химии. –2004. –Т. 59, –№3. –С. 1-10.

8. Севастьянов А.А. Решение многомерных обратных некорректных задач в прикладной спектроскопии / А.А. Севастьянов // IV всероссийская молодежная научная конференция “Когерентная оптика и оптическая спектроскопия”: Сб. ст. –Казань, 2000. –С. 193–198.
9. Sevast'yanov A.A. Processing and interpretation of spectroscopic data by using neural networks / S.S. Kharintsev, A.A. Sevast'yanov, M.Kh. Salakhov // International conference Inverse Ill-posed problems: Modeling & Simulating: Contr. papers –Turkey, Fethiye, 2002. –P. 135-137.
10. Севастьянов А.А. Решение уравнения Абеля с фрактальным гауссовским шумом в прикладной спектроскопии / А.А. Севастьянов, С.С. Харинцев, М.Х. Салахов // III всероссийская молодежная научная конференция “Когерентная оптика и оптическая спектроскопия”: Сб. ст. – Казань, 1999. –С. 50–56.
11. Севастьянов А.А. Разделение сложных спектров с помощью вейвлет-производной спектрометрии / А.А. Севастьянов, С.С. Харинцев, М.Х. Салахов // Структура и динамика молекулярных систем: Сб. ст. –Казань, 2003. –С. 277-282.
12. Севастьянов А.А. Разделение сложных спектров с помощью вейвлет-производной спектрометрии / А.А. Севастьянов, С.С. Харинцев, М.Х. Салахов // Структура и динамика молекулярных систем: Сб. тезисов. Сб. тезисов конф. “Структура и динамика молекулярных систем”. –Казань, 2003. –С. 264.
13. Sevastianov A.A. Resolution enhancement of overlapping peaks in molecular spectra by derivative spectrometry method on continuous wavelet transform / S.S. Kharintsev, A.A. Sevastianov, M.Kh. Salakhov // AJS. –2002. – V.6, N.4. –P. 145–154.
14. Севастьянов А.А. Анализ молекулярных спектров с помощью нейронных сетей / А.А. Севастьянов, С.С. Харинцев, Д.И. Камалова, М.Х. Салахов // VI молодежная всероссийская научная конференция “Когерентная оптика и оптическая спектроскопия”: Сб. ст. –Казань, 2002. – С. 139–144.

15. Sevast'yanov A.A. Resolution Enhancement of Molecular Spectra By Using Neural Networks / S.S. Kharintsev, A.A. Sevast'yanov, M.Kh. Salakhov // International conference Inverse Ill-posed problems: Modeling & Simulating: Abstracts. –Turkey, Fethiye, 2002. –P. 185.
16. Севастьянов А.А. Анализ молекулярных спектров с помощью нейронных сетей / А.А. Севастьянов, С.С. Харинцев, М.Х. Салахов // Второй научной молодежной школы “Оптика-2002”: сб. тезисов. –Санкт-Петербург, 2002. –С. 53, 2002.
17. Севастьянов А.А. Установление сложной структуры ИК полосы в спектре конформационно-неоднородного соединения методом нейросетевой производной спектроскопии / А.А. Севастьянов, С.С. Харинцев, М.Х. Салахов // VII всероссийская молодежная научная конференция “Когерентная оптика и оптическая спектроскопия”: Сб. ст. – Казань, 2003. –С. 326-332.