

IOSUD – UNIVERSITATEA „DUNĂREA DE JOS” DIN GALAȚI
Școala doctorală de Inginerie Mecanică și Industrială



TEZĂ DE DOCTORAT

REZUMAT

INTELIGENȚA ARTIFICIALĂ
APLICATĂ PENTRU DETECȚIA
DROGURILOR DE SINTEZĂ

Doctorand,
Ing. Cătălina-Mercedes STAN (BURLACU)

Conducător științific,
Prof. univ. dr. Mirela PRAISLER

Seria I4: Inginerie industrială Nr. 99
GALAȚI
2024

IOSUD – UNIVERSITATEA „DUNĂREA DE JOS” DIN GALAȚI

Școala doctorală de Inginerie Mecanică și Industrială



TEZĂ DE DOCTORAT

REZUMAT

INTELIGENȚA ARTIFICIALĂ APLICATĂ PENTRU DETECȚIA DROGURILOR DE SINTEZĂ

Doctorand

Ing. Cătălina-Mercedes STAN (BURLACU)

Președinte	Prof. univ. dr. ing. Cătălin FETECĂU, Universitatea „Dunărea de Jos” din Galați
Conducător științific	Prof. univ. dr. fiz. Mirela PRAISLER, Universitatea „Dunărea de Jos” din Galați
Referenți științifici	Prof. univ. dr. ing. Gheorghe NAGÎȚ, Universitatea Tehnică „Gh. Asachi” din Iași Prof. univ. dr. ing. Remus ZĂGAN, Universitatea Maritimă din Constanța Prof. univ. dr. Dana TUTUNARU, Universitatea „Dunărea de Jos” din Galați

Seria I4: Inginerie industrială Nr. 99

GALAȚI

2024

Seriile tezelor de doctorat susținute public în UDJG începând cu 1 octombrie 2013 sunt:

Domeniul fundamental ȘTIINȚE INGINERESTI

- Seria I 1: **Biotehnologii**
- Seria I 2: **Calculatoare și tehnologia informației**
- Seria I 3: **Inginerie electrică**
- Seria I 4: **Inginerie industrială**
- Seria I 5: **Ingineria materialelor**
- Seria I 6: **Inginerie mecanică**
- Seria I 7: **Ingineria produselor alimentare**
- Seria I 8: **Ingineria sistemelor**
- Seria I 9: **Inginerie și management în agicultură și dezvoltare rurală**

Domeniul fundamental ȘTIINȚE SOCIALE

- Seria E 1: **Economie**
- Seria E 2: **Management**
- Seria SSEF: **Știința sportului și educației fizice**

Domeniul fundamental ȘTIINȚE UMANISTE ȘI ARTE

- Seria U 1: **Filologie- Engleză**
- Seria U 2: **Filologie- Română**
- Seria U 3: **Istorie**
- Seria U 4: **Filologie - Franceză**

Domeniul fundamental MATEMATICĂ ȘI ȘTIINȚE ALE NATURII

- Seria C: **Chimie**

Domeniul fundamental ȘTIINȚE BIOLOGICE ȘI BIOMEDICALE

- Seria M: **Medicină**

Cuvânt înainte (Mulțumiri)

Cu ocazia finalizării acestei etape esențiale din parcursul meu academic, îmi manifest profunda recunoștință față de toate persoanele care au contribuit activ și constant la elaborarea tezei mele de doctorat. Îmi revine plăcuta datorie de a aduce mulțumiri speciale doamnei **Prof. Dr. Fiz. Mirela PRAISLER**, sub a cărei coordonare științifică am beneficiat de o îndrumare meticuloasă în procesul de redactare a tezei. Sfaturile, generozitatea și contribuția domniei sale, esențiale pentru formarea mea ca cercetător, sunt elemente fără de care această lucrare nu ar fi fost posibilă.

Doresc, totodată, să exprim gratitudinea mea față de doamna **Conf. Dr. Fiz. Steluța GOSAV** pentru implicarea sa dedicată, acordându-mi timp valoros și furnizându-mi sfaturi și îndrumări competente pe durata elaborării lucrării. De asemenea, îmi exprim recunoștința către distinșii membri ai comisiei de îndrumare, doamnei **Prof. Dr. Habil. Ing. Antoaneta ENE** și doamnei **Prof. Dr. Ing. Luminita MORARU**, pentru observațiile și sugestiile lor valoroase.

Țin să subliniez importanța crucială a sprijinului oferit de către Universitatea „Dunărea de Jos” din Galați în susținerea activităților mele academice, facand posibila participarea mea la conferinte nationale si internaționale, precum și publicarea rezultatelor cercetărilor în reviste stiintifice de prestigiu, cotate in platforme de renume, precum Web of Science, Scopus sau Inspec.

Nu pot omite recunoștința profundă față de familie și prietenii apropiați, alături de care am beneficiat de susținere continuă, afecțiune și înțelegere pe durata studiilor doctorale. În încheiere, adresez sincere mulțumiri tuturor persoanelor care au avut încredere în mine și m-au sprijinit în procesul de elaborare a acestei teze de doctorat.

Tuturor, încă o dată, vă mulțumesc!

Cuprins

Introducere.....	7
Rezumatul și structura lucrării științifice.....	8
Motivația alegerii temei de cercetare.....	9
Obiectivele de cercetare urmărite.....	9
Capitolul I. Agoniștii sintetici ai receptorilor canabinoizilor: structură și proprietăți.....	11
1.1 Definirea și tipologia canabimimeticelor sintetice.....	11
1.2 Profilul canabinoidelor sintetice JWH studiate.....	12
1.2.1 1-pentil-2-metil-3-(1-naftoil)indol (JWH 007).....	12
1.2.2 (2-metil-1-propilindol-3-yl)-naftalen-1-ilmetanonă (JWH 015).....	12
1.2.3 1-Pentil-3-(1-naftoil)pirol (JWH 030).....	12
1.2.4 naftalen-1-il(1-propil-1 H-indol-3-il)metanonă (JWH 072).....	12
1.2.5 3-(1,1-dimethylbutyl)-6aR,7,10,10aR-tetrahydro-6,6,9-trimethyl-6H-dibenzo[b,d]pyran (JWH 133).....	12
1.2.6 1-Hexil-5-fenil-1H-pirol-3-il)-1-naftalenilmetanonă (JWH 147).....	12
1.2.7 (4-metil-1-naftalenil)(2-metil-1-pentil-1H-indol-3-il)metanonă (JWH 149).....	12
1.2.8 (4alfaR,13betaR)-2,5,5-trimetil-8-pentil-3,4,4a,5,8,13b-hexahidroizocromeno[3,4-b]carbazol-13-ol (JWH 161).....	12
1.2.9 1-((E)-(3-pentil-1 H-inden-1-iliden)metil)naftalină (JWH 176).....	12
1.2.10 1H-indol, 3-((4-metil-1-naftalenil)metil)-1-pentil- (JWH 184).....	12
1.2.11 2-(2-metilfenil)-1-(1-pentil-1 H-indol-3-il)-etanonă (JWH 251).....	12
1.2.12 2-(3-metoxifenil)-1-(1-pentil-1 H-indol-3-il)-etanonă (JWH 302).....	12
1.2.13 [5-(2-metilfenil)-1-pentil-1 H-pirol-3-il]-1-naftalenil-metanonă (JWH 370).....	12
1.2.14 (4-bromonaftalen-1-il)-(1-pentilindol-3-il)metanonă (JWH 387).....	12
1.2.15 1-pentil-3-(4-clor-1-naftoil)indol (JWH 398).....	12
1.2.16 (8-bromonaftalen-1-il)-(1-pentilindol-3-il)metanonă (JWH 424).....	12
1.2.17 1-pentil-3-(1-naftoil)indol (JWH 018).....	12
1.2.18 delta(9)-Tetrahydrocannabinol (Δ^9 -THC).....	12
Capitolul II. Abordări spectroscopice avansate pentru identificarea și caracterizarea drogurilor de sinteză.....	12
2.1 Spectroscopia în infraroșu: teorie, instrumente și aplicații.....	12
2.1.1 Metoda spectrală ATR-FTIR și definirea parametrilor analitici.....	14
2.1.2 Principii și aplicații ale spectroscopiei în infraroșu în detectarea substanțelor de interes criminalistic.....	14
2.2 Tehnici complementare de caracterizare a canabinoidelor sintetice	15
Capitolul III. Interconexiunile dintre Inteligența Artificială (AI) și Inteligența Computațională (CI): Aplicații pentru detectarea și analiza substanțelor emergente cu potențial de abuz.....	16
3.1 Domenii de operare, instrumente de calcul și mecanisme de comportament inteligent.....	16
3.1.1 Învățare automată (machine learning) și paradigme de învățare profundă (deep learning).....	17
3.1.2 Metode algoritmice pentru învățare, regularizare și diminuarea dimensionalității în contextul analizei datelor.....	17
3.2 Componente esențiale ale aplicării sistemelor inteligente în domeniul chimiei computaționale și al bioinformaticii.....	21
3.2.1 Implementarea modelării QSAR/QSPR pentru relaționarea cantitativă a structurilor moleculare cu activitatea și/sau proprietățile substanțelor analizate în screeningul analitic al compușilor chimici sintetici ilegali.....	21

3.2.2 Evaluarea și predicția profilului farmacocinetic și toxicologic prin metode de Inteligență Artificială și prin utilizarea descriptorilor moleculari.....	21
3.3 Rețele Neuronale Artificiale pentru recunoașterea identității de clasă a canabinoidelor sintetice și a altor substanțe interzise.....	22
3.3.1 Principiile de bază și tipurile de Rețele Neuronale Artificiale utilizate în bioinformatică, criminalistică, farmacodinamică și evaluarea toxicității medicale.....	22
3.3.2 Metode de adaptare și algoritmi pentru antrenarea, selecția, validarea și optimizarea Rețelelor Neuronale Artificiale în detectarea canabinoidelor sintetice JWH, canabinoidelor sintetice non-JWH și a altor substanțe de interes criminalistic.....	26
Capitolul IV. Contribuții originale la dezvoltarea și implementarea Rețelelor Neuronale Convoluționale Profunde (DCNNs) fundamentate pe metodologii spectrale și tehnici de învățare profundă și învățare activă prin transfer pentru detectarea și clasificarea automată a canabinoidelor sintetice: Abordări hibride de învățare și optimizare pentru tratarea dezechilibrelor de clasă în seturi de date variate și limitate.....	29
4.1 Introducere.....	29
4.2 Baza de date.....	31
4.3 Material și metodă.....	32
4.4 Rezultate.....	36
4.4.1 Unitatea de Autoencoder Convoluțional (CAE) py_AutoConv_DETECT.....	36
4.4.2 Modelul matDETECT_FTIR DCNN de clasificare bazat pe o unitate CAE.....	38
4.4.3 Modelul matDETECT_VisionTransformer DCNN de clasificare derivat din arhitectura pre-antrenată a modelului Vision Transformer (ViT-B/32).....	64
4.4.4 Modelul pyDETECT_InceptionV3 DCNN de clasificare derivat din arhitectura pre-antrenată a modelului GoogLeNet Inception V3.....	78
4.5 Discuții și concluzii.....	86
Capitolul V. Concluzii generale și direcții viitoare de cercetare și dezvoltare.....	97
Lista lucrărilor publicate și prezentate.....	101
Bibliografie.....	104

INTRODUCERE

Ultimele rapoarte legate de consumul ilicit de droguri în Uniunea Europeană au atras atenția asupra unei serii de statistici îngrijorătoare. S-a estimat că până la finalul anului 2022, aproximativ 15,1% din populația Uniunii Europene cu vârste între 15 și 34 de ani (aproximativ 15,3 milioane de persoane) a folosit cannabis, bărbații având o probabilitate de două ori mai mare decât femeile de a declara acest consum. În rândul grupului de vârstă 15-24 de ani, se presupune că 18,2% (ceea ce reprezintă 8,6 milioane de tineri) au consumat cannabis în cursul ultimului an, iar 9,6% (sau 4,5 milioane) au făcut acest lucru în ultima lună. Se consideră că aproximativ 1,3% din populația adultă (15-64 de ani), echivalentul a 3,7 milioane de persoane, consumă cannabis zilnic sau aproape zilnic (adică în 20 sau mai multe zile din ultima lună). Dintre tineri, cu vârsta între 15 și 34 de ani, 2,1% (aproximativ 2,1 milioane) se încadrează în categoria consumatorilor zilnici sau aproape zilnici de cannabis. Circa trei sferturi dintre acești consumatori sunt de gen masculin, iar majoritatea lor (57%) sunt sub vârsta de 35 de ani. Prima categorie dintre cele mai frecvent raportate droguri ilegale cuprinde cannabinoidele și drogurile de sinteză asimilate acestora, urmată de cocaină, MDMA (3,4-metilendioxi-N-metilamfetamină), cunoscută și sub numele de ecstasy, amfetamine și heroină și alte opioide [1-3].

Publicații de profil arată că în 2020, aproape un milion de europeni consumaseră heroină sau alt opioid ilegal în România. Aceasta echivalează cu 1,0-1,7 cazuri de consumatori de opioide cu risc crescut la 1.000 de locuitori, dintre care 838 au fost internați la tratament. Datele din raportul ESPAD 2019 (European School Survey Project on Alcohol and Other Drugs) arată că România are o rată mai mare de consum de substanțe la adolescenți, inclusiv alcool, droguri și tutun, decât media europeană. Vârsta de primă utilizare este de până la 13 ani [4].

Studii clinice și științifice sugerează că substanțele noi cu proprietăți psihoactive (SNPP) asimilate cannabinoidelor produc stări de euforie asemănătoare cannabisului. Unele dintre proprietățile și efectele lor nocive le pot diferenția chiar și de cannabinoidele „tradiționale”, cum ar fi Δ (9) - tetrahidrocannabinol (THC), consumul de cannabinoid sintetice fiind asociat cu psihopatologia în proporții egale cu consumatorii de alte substanțe psihoactive. Utilizatorii tind, astfel, să aibă comportamente de risc asociate cu o mai mare probabilitate de a contracta boli infecțioase [5-14].

Analiza fizico-chimică a substanțelor cu potențial de abuz, atât *in vitro* cât și *in vivo*, constituie o direcție de cercetare de relevanță majoră. Cu toate acestea, se recunoaște, în ultimul timp, că investigațiile *in silico* în domeniile chimiei, medicinei și farmaceuticii pot intensifica ritmul de descoperire și pot reduce simultan necesitatea unor studii clinice îndelungate și a efortului de laborator costisitor.

În această direcție, screening-ul fizico-chimic, biologic și toxicologic, bazat pe modelarea QSAR (Relația Cantitativă Structură-Activitate) sau QSPR (Relația Cantitativă Structură-Proprietati) și predicțiile ADME-Tox (Absorbție, Distribuție, Metabolism, Excreție și Toxicitate) pentru compușii chimici sintetici, precursorii și derivații acestora, precum și detectarea modelelor de consum de substanțe psihoactive, metodele spectrale de caracterizare și identificare, și nu în ultimul rând, aplicarea Inteligenței Artificiale (IA) și a sistemelor expert, se numără printre cele mai eficiente metode de identificare, cercetare și testare a noilor medicamente, substanțelor de abuz și a compușilor chimici emergenți. Acestea reprezintă, de asemenea, modalități eficiente de a combate rețelele de trafic de substanțe cu risc mare [15-23]. Acești compuși chimici sintetici sunt semnificativ mai potenți decât cannabisul natural, ei demonstrând o neurotoxicitate crescută și funcționând ca agoniști compleți ai receptorilor cannabinoidi. Studiile efectuate indică faptul că, în plus față de potența lor ridicată, unii dintre acești compuși au și perioade de înjumătățire extinse, adică o durată mai mare a efectelor psihoactive [24-26].

Inteligența Artificială își găsește în prezent aplicabilitatea într-o varietate de domenii, fie că discutăm despre industrie, medicină sau despre științe politice și sociale. Rezultatele prezentate în această lucrare științifică demonstrează aplicabilitatea metodelor bazate pe Inteligența Artificială și în domeniile industriei, toxicologiei și criminalisticii.

Modelele de Inteligență Artificială dezvoltate și descrise în această teză de doctorat, având la bază, diverse tipuri de Rețele Neuronale Artificiale (RNA), utilizând metode spectrale ATR-FTIR

(Spectroscopie în Infraroșu cu Transformare Fourier cu Reflectanță Totală Atenuată) și descriptori moleculari pot fi utilizate atât *in vitro* cât și *in situ* și pot fi aplicate sau integrate în dispozitivele de control produse la nivel industrial. Aceste sisteme inteligente dezvoltate și validate în mediile de programare Python și Wolfram Mathematica și integrate în aplicații web (PHP, HTML și JavaScript) constituie, astfel, o contribuție personală la avansarea ingineriei industriale, industriei farmaceutice și ingineriei medicale.

REZUMATUL ȘI STRUCTURA LUCRĂRII ȘTIINȚIFICE

Prezenta teză de doctorat cu titlul „*Inteligența Artificială aplicată pentru detectia drogurilor de sinteză*” cuprinde 5 capitole, împreună cu o secțiune introductivă în domeniul de studiu vizat.

Secțiunea de introducere în problematica tezei de doctorat oferă o sinteză a dinamicii globale a consumului de substanțe narcotice, analizând, în același timp, impactul pe care îl are asupra populației la nivel mondial. Acest impact este amplificat de eforturile persistente ale rețelelor de traficanți de a sintetiza continuu noi compuși cu toxicitate extrem de ridicată, care pot fi letali. Aceste substanțe sunt comercializate pe piața ilicită pentru proprietățile lor psihoactive, cu efecte stimulative și halucinogene.

Fundamentul teoretic sintetizat în Capitolele I, II și III evidențiază concluziile din studiile anterioare din domeniul de interes al tezei de doctorat, inclusiv modelele teoretice, metodologiile aplicate, criteriile adoptate și tehnicile utilizate. Aceste aspecte sunt prezentate concis, într-un cadru logic și unificat.

Capitolul I, „*Agoniști sintetici ai receptorilor canabinoizi: structură și proprietăți*”, definește canabimimeticele sintetice, evidențiază tipologia acestora, referindu-se la elemente de epidemiologie, modul de consum și statutul juridic. Studiul explorator a examinat comparativ un număr de 18 canabinoide sintetice JWH (dezvoltate de către chimistul John W. Huffman), cu un grad de toxicitate ridicată și asociate cu incidența unor efecte secundare, boli și deces în întreaga lume, descriindu-se profilul fizico-chimic, farmacocinetic și toxicologic al acestor compuși chimici.

În Capitolul II, denumit „*Abordări spectroscopice avansate pentru identificarea și caracterizarea drogurilor de sinteză*”, sunt conturate aspecte privitoare la spectroscopia în infraroșu și metoda spectrală ATR-FTIR, cu accent pe importanța utilizării în detectarea substanțelor de abuz, precum și alte tehnici complementare de caracterizare a substanțelor de interes criminalistic.

Capitolul III, cu titlul „*Interconexiunile dintre Inteligența Artificială (AI) și Inteligența Computațională (CI): Aplicații pentru detectarea și analiza substanțelor emergente cu potențial de abuz*”, dezbate conceptele de „*Inteligență Artificială*” și „*Inteligență Computațională*” creionându-se intersecția celor două mari domenii de cercetare științifică, respectiv explorându-se domeniile de operare, instrumentele de calcul și mecanismele de comportament inteligent. Sunt analizate și explicate noile paradigme ale învățării automate și profunde, insistându-se pe direcția dezvoltării și implementării rețelelor neuronale artificiale ca metode de inteligență artificială inovatoare în detectia și caracterizarea canabinoidelor sintetice JWH, a celor non-JWH și a altor substanțe emergente interzise, fără a se diminua eficiența screening-ului.

Capitolul IV „*Contribuții originale la dezvoltarea și implementarea Rețelelor Neuronale Convoluționale Profunde (DCNNs) fundamentate pe metodologii spectrale și tehnici de învățare profundă și învățare activă prin transfer pentru detectarea și clasificarea automată a canabinoidelor sintetice: Abordări hibride de învățare și optimizare pentru tratarea dezechilibrelor de clasă în seturi de date variate și limitate*” relevă contribuții originale privind dezvoltarea unor sisteme inteligente pentru recunoașterea identității de clasă a canabinoidelor sintetice, dezvoltarea teoretică a rezultatelor cercetării științifice fiind efectuată într-o manieră inventivă, unică și inovatoare. Sunt descrise Rețele Neuronale Convoluționale Profunde (DCNNs) originale, modele bazate pe Autoencodere Convoluționale special proiectate și prezentate noi arhitecturi derivate din sisteme preantrenate, adaptate, optimizate pentru performanță și implementate pentru recunoașterea identității de clasă a canabinoidelor sintetice JWH pe baza spectroscopiei ATR-FTIR.

Capitolul V oferă o evaluare comprehensivă a activității de cercetare prezentată în cadrul tezei de doctorat. Concluziile generale sau finale sintetizează performanțele și limitările sistemelor de Inteligență Artificială pentru detectarea și recunoașterea identității a canabinoidelor sintetice și a altor substanțe de abuz proiectate și implementate, subliniind, în același timp, principalele aspecte inovatoare dezvoltate în timpul cercetării doctorale.

Teza de doctorat se finalizează prin detalierea și justificarea principalelor direcții de cercetare viitoare, prezentându-se lucrările științifice elaborate și comunicate în cadrul conferințelor științifice naționale și internaționale și cele publicate în reviste de specialitate prestigioase.

MOTIVAȚIA ALEGERII TEMEI DE CERCETARE

Etichetate de furnizorii iliciți ca fiind „*neadecvate pentru consumul uman*” într-o încercare de a evita legislația, statutul juridic al substanțelor psihoactive de sinteză variază considerabil în funcție de jurisprudență, multe entități guvernamentale manifestând eforturi semnificative pentru reglementarea acestora. Cu toate acestea, datorită proliferării rapide a noilor substanțe psihotrope, există o necesitate urgentă de a actualiza continuii registrele de substanțe sub control legal.

Această realitate generează necesitatea dezvoltării unor sisteme automate de detecție și identificare a drogurilor, care să permită screening-ul și recunoașterea rapidă a acestora. În mod deosebit, din motive de eficiență și rapiditate, se dorește dezvoltarea unor astfel de sisteme de inteligență artificială care să poată opera pe instrumente analitice portabile, precum spectrometrele ATR-FTIR, pentru a putea efectua teste *in situ*.

Cunoștințele actuale privind mecanismele de acțiune și impactul toxic al acestor substanțe asupra organismului uman sunt încă limitate. În ultimii ani, canabinoidele sintetice, un subset semnificativ al substanțelor psihoactive de sinteză, au fost asociate cu incidente de deces și intoxicații acute pe teritoriul european. În ciuda implementării unei serii de măsuri legislative și preventive în acest domeniu, aceste substanțe reprezintă în continuare o problemă majoră pentru actualul cadru politic privind gestionarea consumului de droguri.

Transformarea digitală și disrupțiile cauzate de consumul de droguri și rețelele de criminalitate organizată au un impact semnificativ asupra perspectivei societății moderne. Aceste circumstanțe justifică pe deplin alegerea tematicii de cercetare propuse, realizarea obiectivelor constituind o contribuție personală substanțială la eforturile academice de a îmbunătăți metodele de identificare, prevenire și combatere a consumului de droguri și a substanțelor psihoactive de abuz.

OBIECTIVELE DE CERCETARE URMĂRITE

Obiectivele științifice centrale urmărite, atinse și diseminate în procesul de elaborare a acestei teze de doctorat s-au concretizat prin:

- I. Efectuarea unor analize documentare detaliate asupra stadiului actual al cercetărilor, actualizarea și sistematizarea datelor și informațiilor publicate în literatura de specialitate, axate pe următoarele teme de studiu:
 - a. Caracteristicile fizico-chimice și particularitățile toxicologice ale canabinoidelor sintetice, cu un accent deosebit asupra unui număr de 18 canabinoide sintetice JWH emergente;
 - b. Metodologii eficiente de analiză spectrală ATR-FTIR a drogurilor de sinteză;
 - c. Tehnici chemometrice moderne și metode de inteligență artificială de ultimă generație eligibile pentru detecția drogurilor de sinteză, în principal, pentru recunoașterea identității de clasă a canabinoidelor sintetice, cu o evidențiere a Rețelelor Neuronale Artificiale.
- II. Realizarea unui demers științific orientat pe următoarele direcții de cercetare și experimentare:
 - a. Optimizarea geometriei, standardizarea structurii moleculare și curatarea setului de date aferent substanțelor de abuz emergente utilizate în studiul exploratoriu;
 - b. Pre-procesarea spectrelor ATR-FTIR și procesarea imaginilor digitale ale canabinoidelor sintetice și a substanțelor de abuz de interes.
 - c. Proiectarea, dezvoltarea și implementarea unor modele de Rețele Neuronale Convoluționale Profunde (DCNNs) pentru detectarea și discriminarea canabinoidelor

sintetice JWH, canabinoidelor sintetice non JWH și altor categorii de droguri de sinteză de interes criminalistic, bazate pe metodologii spectrale și tehnici de învățare profundă și învățare activă prin transfer, urmărindu-se în subsidiar:

1. Dezvoltarea bazelor de date și a librăriilor spectrale ale compusilor chimici de interes criminalistic utilizate;
2. Explorarea și aplicarea unor algoritmi alternativi de instruire, optimizare, validare și testare în vederea creșterii performanțelor modelelor de Inteligență Artificială dezvoltate;
3. Rularea/testarea modelelor pe noi variabile de intrare și evaluarea performanței în raport cu dimensiunea și caracteristicile seturilor de date utilizate;
4. Conceperea expresiilor matematice, a scripturilor și a codurilor sursă, precum și implementarea modelelor pentru inferență și dezvoltări viitoare, în medii de programare avansate precum Python și Wolfram Mathematica.

CAPITOLUL I. AGONIȘTII SINTETICI AI RECEPTORILOR CANABINOIZI: STRUCTURĂ ȘI PROPRIETĂȚI

1.1 Definirea și tipologia canabimimeticelor sintetice

Canabisul, cunoscut și sub denumirea de cânepă indiană (în latină, *Cannabis sativa*), este o specie vegetală ce își are originea în Asia Centrală, fiind cultivată prima dată în China acum mai bine de trei milenii. Din această plantă s-au extras peste patru sute de compuși, dintre care în jur de șaiszeci sunt canabinoide. Substanța activă principală din cânepa indiană, δ -9-tetrahidrocanabinolul (THC), este cunoscută pentru efectele sale psihotrope predominante. Produsul vegetal obținut prin combinarea florilor, frunzelor și tulpinilor tinere ale plantei este adesea numit *marijuana*. Utilizarea canabinoidelor în scop terapeutic în Europa datează din secolul al XIX-lea, când erau folosite pentru ameliorarea unei game largi de afecțiuni, precum durerea, spasmele, astmul, tulburările de somn, depresia și anorexia.

Fitocanabinoidele sunt un grup de compuși chimici naturali găsiți în planta de canabis. Aceste substanțe chimice active sunt cunoscute pentru capacitatea lor de a interacționa cu sistemul endocannabinoid al corpului uman, care este un sistem complex de neuromodulare implicat în reglarea diferitelor procese fiziologice, inclusiv apetitul, durerea, starea de spirit și memoria. Cel mai cunoscut fitocannabinoid este delta-9-tetrahidrocanabinolul (THC), care este principalul compus psihotrop din canabis și responsabil pentru efectele euforizante sau „high-ul” asociat cu consumul de marijuana. Un alt fitocannabinoid major este canabidiolul (CBD), care nu produce efecte psihotrope semnificative, dar a fost studiat pentru potențialele beneficii medicale, inclusiv efecte anxiolitice, antiinflamatoare și antiepileptice.

Pe lângă THC și CBD, există peste o sută de alte fitocanabinoide în canabis, fiecare cu structuri și efecte potențiale unice. Acești compuși includ canabinolul (CBN), canabigerolul (CBG), canabicromenul (CBC), canabivarina (THCV) și alții. Fitocanabinoidele sunt de interes considerabil atât pentru cercetarea științifică, datorită diversității lor farmacologice, cât și pentru utilizarea terapeutică

Până în prezent, au fost identificate două tipuri principale de receptori canabinoizi, CB₁ și CB₂, care se asociază cu proteinele G pentru a forma sistemul endocannabinoid. Receptorii CB₁ și CB₂ au o structură asemănătoare și se găsesc distribuiți în mod diferit în corp, îndeplinind funcții distincte. Receptorii CB₁ sunt abundant prezenți în hipocamp, cerebel și ganglionii bazali, studiile științifice sugerând impactul semnificativ al canabinoidelor asupra farmacodinamicii. Receptorul CB₁ se întâlnește și în alte regiuni ale organismului, inclusiv în celulele albe sanguine, inimă, splină, tractul gastrointestinal și cel reproducător, precum și în sistemul urinar [37-39].

Canabimimeticile sintetice sunt substanțe chimice create în laborator pentru a imita efectele fitocannabinoidelor, compușii activi naturali găsiți în planta *Cannabis sativa*, fiind proiectate pentru a se lega de receptorii canabinoizi din creier și alte părți ale corpului uman [56]. Cu excepția endocannabinoidelor, care apar în mod natural, compușii canabinoizi naturali sunt limitați la constituenții chimici ai cannabisului, cum ar fi Δ 9-tetrahidrocanabinolul și canabidiolul.

În contrast, canabinoidele sintetice pot include o mare varietate de compuși structural diferiți cu posibilitatea de schimbări structurale ulterioare, adică analogi și derivați, care ar putea prezenta afinitate fie pentru unul, fie pentru ambele tipuri de receptori canabinoizi. Legarea canabinoidelor sintetice la receptori canabinoizi poate rezulta în efecte agoniste (parțiale), inverse agoniste sau antagoniste.

Canabinoidele sintetice relevante pentru investigațiile criminalistice sunt substanțe chimice cu o afinitate suficientă pentru receptorul CB₁ și manifestă activitate agonistă sau parțial agonistă, deoarece efectele tipice psihotrope asemănătoare cannabisului sunt mediate în general prin stimularea agonistică a acestui tip de receptor [57-60].

1.2 Profilul canabinoidelor sintetice JWH studiate

Un drog de sinteză este un analog structural sau funcțional al unei substanțe controlate, care a fost modificat chimic pentru a evita clasificarea ca ilegal, păstrând totodată un ansamblu dorit de proprietăți farmacologice. Modificarea sintetică a structurilor moleculare de bază într-o varietate de categorii de droguri a produs numeroase substanțe psihotrope noi. Printre principalele direcții de manipulare moleculară în evoluția drogurilor de sinteză (în engleză, *designer drugs*) se numără adăugarea de mici eteri alchilici, halogeni și/sau grupuri alchil la inele aromatice nesubstituite în mai multe categorii de droguri.

În cadrul studiului realizat, un număr de 16 canabinoide sintetice JWH emergente cu efecte psihoactive severe, majoritatea aparținând clasei aminoalchilindolilor, au fost caracterizate și analizate împreună cu două substanțe de referință pentru această grupă de droguri de sinteză: fitocannabinoidul δ -9-tetrahidrocanabinolul (THC) și cannabinoidul sintetic JWH 018.

Spectrul acestor entități chimice sintetizate include un număr de:

- 7 naftoilindoli: JWH 007, JWH 015, JWH 072, JWH 149, JWH 387, JWH 398, JWH 424;
- 3 naftoilpiroli: JWH 030, JWH 147, JWH 370;
- 2 fenilacetilindoli: JWH 251, JWH 302;
- 1 dibenzopiran: JWH 133;
- 1 dibenzopiran hibrid: JWH 161;
- 1 naftilmetilindol: JWH 184;
- 1 hidrocarbon: JWH 176.

Pentru atingerea obiectivelor științifice propuse, s-a procedat la o examinare meticuloasă a literaturii de specialitate corespunzătoare, s-a apelat la consultarea și interogarea sistematică a bazelor de date online importante și platformelor științifice de profil, iar pentru analize s-au utilizat diverse pachete software, servere și module web dedicate studiului substanțelor și compușilor chimici [80-93].

Informațiile și datele prezentate în această secțiune, reflectă principalele caracteristici fizico-chimice, biologice și toxicologice ale canabinoidelor sintetice JWH sub incidență și constituie repere de referință și rezultate experimentale, atât *in vitro* cât și *in vivo*, recunoscute și validate la nivel internațional în sfera de investigație.

CAPITOLUL II. ABORDĂRI SPECTROSCOPICE AVANSATE PENTRU IDENTIFICAREA ȘI CARACTERIZAREA DROGURILOR DE SINTEZĂ

2.1 Spectroscopia în infraroșu: teorie, instrumente și aplicații

Spectroscopia moleculară optică în Infraroșu (IR) reprezintă o tehnică analitică de înaltă precizie utilizată pentru identificarea și caracterizarea compușilor chimici pe baza interacțiunii radiației infraroșii cu moleculele unei probe. Această tehnică este fundamentată pe absorbția radiației infraroșii de către molecule, ceea ce determină tranziții vibraționale specifice. Spectroscopia în domeniul infraroșu se bazează pe principii fundamentale care se aplică la nivel atomic, sub-atomic și molecular. Un sistem microscopic, fie el nucleu, atom sau moleculă, este caracterizat de existența în anumite stări distincte, cunoscute sub denumirea de stări staționare, care corespund unor valori discrete de energie, denumite nivele de energie. Modificarea energiei unui astfel de sistem se realizează prin tranziții între aceste stări staționare. Conform legilor mecanicii cuantice, absorbția și emisia radiațiilor electromagnetice cu anumite energii (lungimi de undă) sunt cauzate de mișcarea electronilor între diferite stări energetice [128-130].

Vibrațiile de schelet reprezintă vibrațiile normale în care pot participa în egală măsură toți atomii din moleculă, fiind caracteristice întregii molecule. Într-un spectru IR se pot distinge două tipuri de vibrații ale grupărilor funcționale dintr-o moleculă: vibrații de alungire și vibrații de deformare (vezi Figura 2.1). Vibrația de alungire care determină variația distanței dintre doi atomi este denumită vibrație de valență

și reprezintă o deplasare ritmică (întindere-comprimare) de-a lungul axei legăturii covalente. Raportat la simetrie, când participă doi sau trei atomi ori grupuri de atomi, aceste vibrații pot fi clasificate în vibrații de legătură simetrice și asimetrice. Vibrațiile de deformare influențează unghiurile de legătură dintre atomii implicați și se pot manifesta ca deformări în plan sau în afara planului. Deformările în plan includ deformări simetrice sau de forfecare și deformări asimetrice sau de pendulare. Deformările în afara planului se împart, la rândul lor, în deformări simetrice sau de balansare și deformări asimetrice sau de răsucire [134-136].

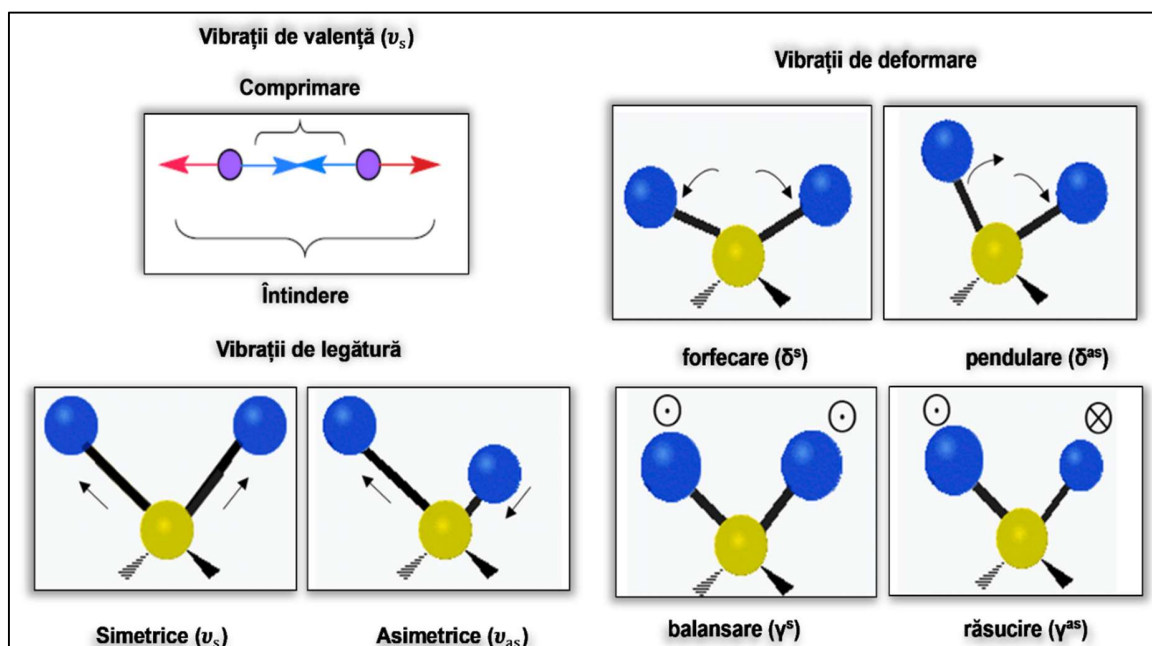


Figura 2.1 Reprezentarea diferitelor moduri vibraționale ale unui grup CH₂ într-un compus organic.

Vibrațiile esențiale ale compușilor organici sunt distribuite în patru zone spectrale IR (vezi Tabelul 2.1). Domeniul infraroșu apropiat este utilizat predominant pentru determinări cantitative. În această domeniu, sunt frecvent observate benzi de absorbție corespunzătoare armonicilor, benzilor fundamentale și benzilor de combinație, în special în cazul grupărilor chimice ce conțin atomi de hidrogen (de exemplu, vibrațiile de întindere ale grupărilor O-H, N-H și C-H) [147-149].

Tabelul 2.1 Distribuția vibrațiilor esențiale ale compușilor chimici în zonele spectrale IR.

Zona	Domeniu spectral	Vibrații esențiale
I.	4.000 – 2.600 cm ⁻¹	(O-H)
		(N-H)
		(C-H)
II.	2.250 – 2.000 cm ⁻¹ 1.900 – 1.300 cm ⁻¹	(C≡C)
		(C≡N)
		(C=C)
III.		(C=O)
		(C=N)
		(N=O)
		(N-H)
IV.	zona amprentă 650-50 cm ⁻¹	(C-H)
		(C-X)

Domeniul infraroșu mediu, cuprins între 4.000-650 cm^{-1} , este format din două regiuni principale. Prima regiune, denumită regiunea frecvențelor de grup, se întinde între 4.000 și 1.300 cm^{-1} (2,5-7,7 μm). A doua regiune, cunoscută sub numele de regiunea „amprentă”, se situează între 1300 și 650 cm^{-1} (7,7-15,4 μm). În această regiune, radiația este absorbită în principal datorită vibrațiilor de întindere ale legăturilor simple și vibrațiilor de deformare ale sistemelor poliatomică (vibrații de schelet), spectrul de absorbție fiind foarte specific fiecărei molecule în parte. În regiunea 667-50 cm^{-1} (15-200 μm), absorbția radiației se datorează vibrațiilor de deformare ale legăturilor formate de elemente chimice precum carbonul, azotul, oxigenul și fluorul cu atomi ce au masa mai mare de 19, precum și modurilor adiționale de deformare ale unor sisteme ciclice sau nesaturate [150-152].

2.1.1 Metoda spectrală ATR-FTIR și definirea parametrilor analitici

Spectroscopia în infraroșu cu transformare Fourier (eng., *Fourier Transform Infrared, FTIR*) reprezintă o tehnică analitică esențială în caracterizarea compoziției chimice a substanțelor. Printre multiplele metode FTIR, reflectanța totală atenuată (eng., *Attenuated Total Reflectance-ATR*) constituie una dintre cele mai utilizate metode datorită versatilității și ușurinței de utilizare. Metoda ATR-FTIR combină principiul reflectanței totale atenuate cu spectroscopia în infraroșu, permițând analiza directă a suprafețelor solide sau lichide fără necesitatea unei preparări anterioare a probelor.

În metoda ATR, un fascicul de lumină infraroșie este trecut printr-un cristal ATR cu un indice de refracție ridicat, de obicei din material precum diamant, germaniu sau zinc selenid. La nivelul interfeței dintre cristal și proba analizată, lumina infraroșie este reflectată total intern, generând un câmp evanescent care pătrunde în probă la o adâncime de câțiva microni. Aceasta permite detectarea absorbției specifice a radiației infraroșii de către moleculele din probă, oferind un spectru caracteristic.

2.1.2 Principii și aplicații ale spectroscopiei în infraroșu în detectarea substanțelor de interes criminalistic

Spectroscopia IR constituie o metodă de referință în cadrul investigațiilor criminalistice, fiind apreciată pentru capacitatea de identificare cu precizie a substanțelor chimice. Aceasta metoda și-a dovedit utilitatea nu numai în laborator dar și în analize *in situ*, prin facilitarea analizei detaliate a probelor biologice prezente sau prelevate în scene infracționale ori în contexte asociate cu activități ilicite. Analizele firelor de păr, a fluidelor corporale, sebumului, transpirației ori firelor textile pot oferi indicii relevante cu privire la consumul sau expunerea la droguri și medicamente interzise. Identificarea urmelor necunoscute poate releva prezența unor substanțe toxice sau explozive, demonstrând aplicabilitatea vastă în domeniul criminalistic și a celor asociate acestuia [171-178].

Utilizarea spectroscopiei în infraroșu în detectia drogurilor de sinteză implică obținerea spectrelor probelor suspecte și compararea acestora cu spectrele de referință ale compușilor cunoscuți. Analiza permite nu doar identificarea substanței, ci și determinarea purității și a prezenței posibilităților aditivi. Tehnicile de imagistică spectroscopică în infraroșu oferă posibilitatea vizualizării distribuției spațiale a componentelor chimice în amestecuri complexe, facilitând, astfel, analiza probelor etnobotanice sau a altor materiale vegetale conținând aditivi sintetici. Prin integrarea avansurilor tehnologice, cum ar fi dezvoltarea accesoriilor inovatoare, a software-ului de analiză și a tehnologiilor de microeșantionare, această tehnică este indispensabilă în laboratoarele de criminalistică și în cercetarea substanțelor de abuz. Capacitatea de obținere a unor spectre IR de înaltă rezoluție, cu sensibilitate și specificitate chimică ridicată, transformă spectroscopia în infraroșu într-un instrument esențial pentru identificarea și caracterizarea drogurilor de sinteză, contribuind la controlul și reglementarea acestor substanțe [179-181].

Metoda ATR-FTIR prezintă multiple avantaje, dar și limitări. Natura nedistructivă și rapiditatea obținerii rezultatelor eficientizează semnificativ procesul de analiză, presupunând o pregătire minimă a probelor, acestea putând fi analizate în mod direct, în diverse stări de agregare, cum ar fi pulberile, uleiurile sau soluțiile. Tehnica se distinge printr-o sensibilitate și o specificitate remarcabile, permițând detectarea și diferențierea precisă a canabinoidelor sintetice pe baza spectrelor unice de absorbție

infraroșie. Calibrarea și cuantificarea substanțelor facilitează determinarea concentrațiilor printr-o metodologie riguroasă ce implică curbe de calibrare și standarde de referință. Compatibilitatea cu bibliotecile spectrale electronice extinde și mai mult utilitatea acesteia, permițând identificarea automată, rapidă și exactă a compușilor chimici [182-184].

Cu toate aceste avantaje, în cazul utilizării ATR-FTIR pentru analiza canabinoidelor sintetice, profunzimea limitată de penetrare a câmpului evanescent poate fi insuficientă pentru analiza probelor grosiere sau stratificate. Riscul de interferențe spectrale poate apărea atunci când probele includ matrici complexe sau impurități, complicând interpretarea datelor. Necesitatea de curățare riguroasă a cristalului ATR între măsurători pentru prevenirea contaminării mărește durata analizei, iar sensibilitatea la umiditate și prezența contaminanților volatili pot altera acuratețea spectrelor generate. În final, costurile asociate cu achiziția de echipamente ATR-FTIR și cristale de înaltă calitate pot reprezenta obstacole semnificative pentru laboratoarele cu resurse limitate, toate aceste aspecte trebuind atent evaluate înainte de alegerea acestei metode [185-187].

2.2 Tehnici complementare de caracterizare a canabinoidelor sintetice

Numărul mare de canabinoide sintetice emergente creează premisa apariției pe piața drogurilor a unor substanțe psihoactive noi, identificarea acestora fiind dificilă în lipsa unor standarde și spectre de referință, precum și fără literatură științifică și cercetări relevante în domeniu. Canabinoidele sintetice sunt majoritar identificate ca aditivi în amestecurile vegetale (etnobotanice), strategia de analiză a acestora diferind, într-o anumită măsură, de analiza drogurilor vegetale clasice, cum ar fi canabisul, ori de analiza drogurilor prezente pe piață sub alte forme, precum heroina (pulbere), cocaina (pulbere sau cristale) și stimulentele de tip amfetaminic (tablete sau capsule). Astfel, pentru identificarea acestora, eșantioanele supuse screeningului trebuie mai întâi izolate din mostra sau amestecul vegetal într-un compus pur sau îmbogățit, urmând ca ulterior să fie utilizate diferite tehnici analitice pentru caracterizare [188-190].

Cromatografia lichidă preparativă (eng., *Liquid Chromatography - LC*) reprezintă o tehnică utilizată pentru separarea și purificarea cantităților mari de compuși chimici dintr-un amestec. Această metodă implică utilizarea unei coloane umplute cu material adsorbant (de obicei gel de silice sau alte materiale poroase) prin care trece un solvent mobil. Compușii din amestec se separă pe baza interacțiunilor diferite cu faza staționară (materialul din coloană) și faza mobilă (solventul). Aceasta permite izolarea compușilor de interes în formă pură, esențială pentru analize ulterioare și caracterizare.

Cromatografia pe strat subțire (eng., *Thin Layer Chromatography - TLC*) constituie o metodă simplă și rapidă de separare și identificare a compușilor dintr-un amestec. În TLC, un strat subțire de adsorbant (de obicei gel de silice) este aplicat pe o placă de sticlă, aluminiu sau plastic. O mică cantitate din amestecul de analizat este depusă pe placa TLC și apoi placa este introdusă într-un solvent, care migrează pe suprafața plăcii prin capilaritate. Compușii din amestec se separă în funcție de afinitatea lor pentru faza mobilă (solventul) și faza staționară (adsorbantul), formând pete distincte vizibile sub lumină UV sau prin tratare cu reactivi specifici. Reactivul Fast Blue RR este un agent de colorare utilizat în TLC pentru detectarea și vizualizarea compușilor fenolici și a altor substanțe chimice care formează complexe colorate. Când este aplicat pe placa TLC, reactivul Fast Blue RR reacționează cu compușii țintă, formând pete colorate vizibile, ceea ce facilitează identificarea și separarea acestora. Această metodă de vizualizare este utilă pentru a confirma prezența și puritatea compușilor izolați în cadrul procesului de cromatografie [195-197].

Complementar spectroscopiei IR, există o varietate de tehnici disponibile pentru caracterizarea unui canabinoid necunoscut, cum ar fi combinațiile de tehnici precum RMN, Raman, UV/Viz, HRMS, MS și MS/MS. Cu ajutorul acestora, structura canabinoidului necunoscut poate fi dedusă și, pe baza acesteia, poate fi sintetizat un standard de referință (dacă nu este disponibil comercial). Standardul de referință sintetizat trebuie analizat cu aceleași tehnici menționate, în aceleași condiții [198-206].

CAPITOLUL III. INTERCONEXIUNILE DINTRE INTELIGENȚA ARTIFICIALĂ (AI) ȘI INTELIGENȚA COMPUTAȚIONALĂ (CI): APLICAȚII PENTRU DETECTAREA ȘI ANALIZA SUBSTANȚELOR EMERGENTE CU POTENȚIAL DE ABUZ

3.1 Domenii de operare, instrumente de calcul și mecanisme de comportament inteligent

Conceptele fundamentale, domeniile și mecanismele de operare ale Inteligenței Artificiale (eng., *Artificial Intelligence - AI*) și ale Inteligenței Computaționale (eng., *Computational Intelligence, CI*) au evoluat profund de-a lungul anilor, iar relațiile competitive dintre acestea s-au modificat corespunzător. Ascensiunea remarcabilă a metodelor de Inteligență Artificială (AI) și învățare automată (eng., *Machine Learning, ML*), în special a Rețelelor Neuronale Artificiale (eng., *Artificial Neural Networks, ANNs*), a transformat radical științele computaționale, aceste tehnologii deschizând noi frontiere în cercetare și dezvoltare, oferind soluții inovatoare pentru probleme complexe și având un impact profund asupra multiplelor aspecte ale societății moderne. ANNs, modelate după structura și funcționarea creierului uman, constituie un subset fundamental al AI și al ML. Ele sunt alcătuite din noduri interconectate, denumite neuroni, care au rolul de a procesa și transmite informații. Rețelele neuronale posedă capacitatea de a învăța din date, de a recunoaște tipare complexe și de a realiza predicții cu o precizie remarcabilă, devenind astfel instrumente indispensabile în domeniile cercetării științifice și tehnologice [236-238].

Aceste tehnologii au permis dezvoltarea unor instrumente avansate pentru analiza chimică și toxicologică, contribuind la îmbunătățirea metodelor de monitorizare și control al substanțelor ilicite. AI se referă, în general, la capacitatea sistemelor de a învăța, raționa și acționa în mod independent. Acest concept presupune ca sistemele să fie capabile să ia decizii autonome în situații noi, similare cu modul în care ar proceda un om. AI integrează procese avansate de învățare și raționament, permițând acestor sisteme să opereze și să se adapteze fără necesitatea unei intervenții umane constante. Aceasta include abilitatea de a analiza date complexe, de a recunoaște tipare și de a lua decizii bazate pe aceste analize, demonstrând astfel un nivel ridicat de autonomie și adaptabilitate [242-244].

Inteligența Computațională (eng., *Computational Intelligence, CI*) reprezintă un domeniu vast și interdisciplinar al informaticii și AI, axat pe dezvoltarea și aplicarea algoritmilor și tehnicilor inspirate de procesele naturale pentru rezolvarea problemelor complexe. Aceste tehnici includ ANNs, algoritmi evolutivi și sisteme fuzzy, fiecare având aplicații specifice și avantaje în diverse arii de cercetare și industrie. Termenii proveniți din limba engleză Computational Intelligence (CI) și Soft Computing (SC) sunt strâns legați și adesea folosiți interschimbabil, însă există unele diferențe semnificative între domeniile de aplicare. SC este un termen mai larg, care se referă la un grup de tehnici computaționale bazate pe AI și procesele de selecție naturală. SC include metode care sunt tolerante la imprecizie, incertitudine, adevăr parțial și aproximare, oferind soluții eficiente din punct de vedere al costurilor pentru probleme complexe din viața reală, unde soluțiile de calcul convențional (eng., *Hard Computing, HC*) nu sunt disponibile. Principalele componente ale tehnicilor SC includ logica fuzzy, ANNs, algoritmi evolutivi și inteligența de roi (eng., *Swarm Intelligence, SI*). Deși soluțiile obținute prin aceste metode nu coincid întotdeauna cu soluțiile analitice, în practică, o soluție aproape optimă este adesea suficientă.

Domeniile de operare ale sistemelor inteligente și interconexiunile dintre diverse tehnici de AI și CI sunt structurate în jurul a trei piloni principali: calculul neural (eng., *Neural Computation*), calculul evolutiv (eng., *Evolutionary Computation*) și calculul fuzzy (eng., *Fuzzy Computation*), fiecare având instrumente și surse de inspirație distincte. Mecanismele de comportament inteligent ale AI se manifestă printr-o varietate de procese complexe, care imită capacitățile cognitive umane. Un aspect fundamental al AI este raționamentul inductiv, care implică trecerea de la particular la general prin inducerea unei proprietăți, reguli sau structuri. În contrast, raționamentul deductiv se bazează pe concluzii care decurg logic din premise stabilite, reflectând un mod de gândire riguros și structurat [250-252].

3.1.1 Învățare automată (machine learning) și paradigme de învățare profundă (deep learning)

Învățarea automată (eng., *Machine Learning, ML*) constituie o ramură a inteligenței artificiale (AI) ce se concentrează pe dezvoltarea algoritmilor și modelelor capabile să instruiască sisteme informatice pentru a extrage cunoștințe din date și a realiza predicții sau a lua decizii autonome, fără a necesita programarea manuală pentru fiecare situație specifică. Metodologia ML utilizează seturi de date extinse pentru a pregăti modele statistice care identifică tipare și corelații ascunse în informațiile disponibile. Un exemplu comun de ML este clasificarea e-mailurilor ca fiind spam sau non-spam pe baza caracteristicilor extrase din conținutul acestora. Taxonomia algoritmilor de învățare automată se raportează la două criterii principale: modul în care se face învățarea și modul în care funcționează. În funcție de modul de învățare, algoritmi pot fi clasificați în patru categorii: învățare supervizată (eng., *supervised learning*), învățare nesupervizată (eng., *unsupervised learning*), învățare semi-supervizată (eng., *semi-supervised learning*) și învățare prin consolidare (eng., *reinforcement learning*) [253-257].

Învățarea profundă (eng., *Deep Learning, DL*) constituie un subcâmp sau o subramură a ML care utilizează Rețele Neuronale Adânci cu multiple straturi (eng., *Deep Neural Networks, DNN*) pentru a modela relații complexe în date. Spre deosebire de algoritmi tradiționali de ML, care necesită extragerea manuală a caracteristicilor relevante, Rețelele Neuronale Adânci (profunde) sunt capabile să învețe automat reprezentări abstracte și complexe direct din datele brute. Un exemplu relevant de DL îl reprezintă recunoașterea imaginii (eng., *Image Recognition*), unde Rețelele Neuronale Convoluționale (eng., *Convolutional Neural Networks, CNN*) sunt utilizate pentru a detecta și clasifica obiecte în imagini cu o acuratețe impresionantă. De asemenea, Rețelele Neuronale Recurente (eng., *Recurrent Neural Networks, RNN*) sunt utilizate în procesarea limbajului natural (eng., *Natural Language Processing, NLP*) pentru traducerea automată și generarea de text [270-283].

Învățarea prin transfer (eng., *Transfer Learning*) constă în aplicarea cunoștințelor și experienței acumulate de un model preantrenat pe un volum mare și variat de date, pentru a spori eficiența pe o altă sarcină, similară, dar distinctă, utilizând un set de date mai restrâns. Ideea de bază o constituie transferul cunoștințelor acumulate în timpul antrenării inițiale a modelului pentru a accelera și îmbunătăți antrenarea pe o nouă sarcină. Învățarea activă prin transfer (eng., *Active Transfer Learning*) reprezintă o metodă avansată în domeniul inteligenței artificiale și al învățării automate, care combină principiile învățării active cu cele ale învățării prin transfer. Această nouă paradigmă are ca scop optimizarea procesului de antrenare a modelelor prin utilizarea eficientă a resurselor și prin îmbunătățirea performanței modelului în sarcini noi sau necunoscute. Tehnica se bazează pe conceptul că experiențele și cunoștințele acumulate dintr-o sarcină sau domeniu pot fi reutilizate și aplicate pentru a accelera învățarea și a îmbunătăți performanța în alte sarcini sau domenii. Procesul implică ajustarea unui model deja antrenat pe un set extins și variat de date, astfel încât să fie aplicabil în mod eficient la o nouă sarcină, utilizând un set de date mai restrâns. În concluzie, învățarea prin transfer se concentrează pe reutilizarea cunoștințelor existente pentru a îmbunătăți antrenarea pe o nouă sarcină, în timp ce învățarea activă prin transfer adaugă un nivel de complexitate, combinând aceste abordări cu selecția activă a datelor și maximizându-se, astfel, eficiența și performanța antrenării prin reducerea timpului de antrenare, îmbunătățirea generalizării și utilizarea eficientă a datelor disponibile [284-287].

3.1.2 Metode algoritmice pentru învățare, regularizare și diminuarea dimensionalității în contextul analizei datelor

Metodele algoritmice pentru învățare, regularizare și diminuarea dimensionalității sunt fundamentale în contextul analizei datelor, având drept scop optimizarea, performanța modelelor și gestionarea complexității datelor. Gruparea algoritmilor de învățare după funcție implică clasificarea diferiților algoritmi de ML după modul de funcționare și aplicare. Regresia (eng., *regression*) reprezintă procesul de estimare a relației dintre o variabilă dependentă (etichetă) și una sau mai multe variabile independente sau trăsături (eng., *traits*). Dintre cei mai utilizați algoritmi de regresie se pot evidenția: regresia liniară (eng., *Linear Regression*), regresia logistică (eng., *Logistic Regression*), regresia cu cele

mai mici pătrate ordinare (eng., *Ordinary Least Squares Regression, OLS*), regresia în trepte (eng., *Stepwise Regression*), spline de regresie adaptivă multivariată (eng., *Multivariate Adaptive Regression Splines, MARS*), netezirea graficului de dispersie estimată local (eng., *Locally Estimated Scatterplot Smoothing, LOESS*) și regresia polinomială (eng., *Polynomial Regression*) [291-298].

Din punct de vedere matematic, atât clasificarea cât și regresia pot fi formulate sub aceeași paradigmă: determinarea unei relații necunoscute între intrările unui sistem (x) și ieșirile acestuia (y). Astfel, ambele metode urmăresc construirea unui model (în contextul acestei secțiuni, făcându-se referire la un model intern de Rețea Neuronală Artificială) care să fie capabil să obțină la ieșire (y) o valoare cât mai apropiată de cea dorită (y), în funcție de datele de intrare (x). Diferența fundamentală între clasificare și regresie este tipul ieșirii: clasificarea produce ieșiri (valori) discrete, în timp ce regresia produce ieșiri (valori) continue. Clasificarea estimează o ieșire discretă, care reprezintă clasa de apartenență a setului de date de intrare. Astfel, valorile variabilelor dependente ale ieșirilor sunt cele care clasifică datele de intrare în grupe sau clase. În problemele de regresie, se urmărește identificarea unei variabile continue de ieșire, ceea ce implică aproximarea unei funcții [299-307].

Regularizarea (eng., *regularization*) reprezintă o formă de regresie care penalizează coeficienții estimați, aducându-i mai aproape de zero, pentru a preveni supraînvățarea (eng., *overfitting*). Această tehnică ajută la evitarea modelelor prea complexe și flexibile, care ar putea învăța zgomotul din datele de antrenament. Principalii algoritmi de regularizare includ: regresia Ridge (eng., *Ridge Regression*), care adaugă un termen de penalizare proporțional cu suma pătratelor coeficienților, regresia Lasso (eng., *Lasso Regression*), utilă în anularea unor coeficienți, și care efectuează, totodată, selecția de caracteristici, ElasticNet Regression (care este importantă pentru combinarea avantajelor oferite de regresia Ridge și Lasso) și regresia unghiului minim (eng., *Least Angle Regression, LARS*), care este necesară pentru modelele cu un număr mare de variabile, aceasta tehnică facilitând identificarea eficientă a relațiilor semnificative [308-312].

Clustering-ul (eng., *clustering*) este o tehnică de învățare automată nesupervizată prin care se pot grupa punctele de date în funcție de similaritățile dintre ele. În domeniul analizei de date, algoritmi de clustering sunt esențiali pentru identificarea grupurilor naturale din seturi de date. Dintre aceștia menționăm *K-means Clustering*, care este eficient în partiționarea datelor într-un număr specific de clustere, fiecare dată fiind alocată grupului cu centrul cel mai apropiat, determinat ca medie aritmetică. Alternativ, *K-medians* utilizează medianele pentru a defini centrul clusterelor, oferind o robustețe îmbunătățită în fața valorilor extreme. *Hierarchical Clustering* explorează relațiile dintre date printr-o abordare ierarhică, care poate fi aglomerativă, unde clusterelor mici sunt unite treptat, sau divizivă, unde se începe cu un singur grup care se divide. Această metodă este valoroasă pentru vizualizarea relațiilor complexe între obiecte.

Pe de altă parte, *DBSCAN* (eng., *Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise*) și *OPTICS* (eng., *Ordering Points To Identify the Clustering Structure*) sunt algoritmi bazati pe densitate, capabili să identifice clustere de forme variate și să gestioneze punctele de zgomot. *OPTICS* oferă o perspectivă detaliată asupra structurii de densitate, fără a necesita specificarea unui număr de clustere. *Mean Shift Clustering* se concentrează pe descoperirea maximelor de densitate în date, fiind util în analiza vizuală și imagistică, în timp ce *Spectral Clustering* utilizează tehnici de algebră liniară pentru gruparea datelor în clustere bazate pe similarități și conectivitate.

Metodele bazate pe modele, precum modelele de amestec gaussian (eng., *Gaussian Mixture Models - GMM*), utilizate în cadrul algoritmului de clustering *Expectation-Maximization (EM)*, adoptă o perspectivă probabilistică, modelând fiecare cluster ca o distribuție gaussiană. Această abordare conferă o flexibilitate semnificativă în ceea ce privește forma clusterelor și este deosebit de eficace în contexte în care structura datelor prezintă complexități notabile. Utilizarea acestor modele permite adaptarea la variațiile subtile ale datelor, facilitând o segmentare precisă și detaliată, esențială în analiza datelor avansată.

Algoritmi specializați pentru gestionarea volumelor mari de date, cum ar fi *BIRCH* (eng., *Balanced Iterative Reducing and Clustering using Hierarchies*), care folosește structuri arborescente pentru a comprima informațiile, și *CURE* (eng., *Clustering Using Representatives*), care selectează reprezentanți pentru fiecare cluster și îi atrage spre centrul geometric, sunt esențiale pentru eficiență în

medii de date extinse. În plus, *STING* (eng., *Statistical Information Grid*) și *CLARANS* (eng., *Clustering Large Applications based on RANdomized Search*) oferă alternative inovatoare, primul utilizând o grilă ierarhică pentru partiționarea spațiului și ulterior aplicând clustering pe celule, iar cel din urmă îmbunătățind algoritmi de tip K-medoids prin căutări aleatorii pentru optimizarea selecției reprezentative. *Affinity Propagation* se distinge prin abordarea unică de transmitere a mesajelor între perechi de date pentru identificarea exemplarelor reprezentative, adaptându-se bine la diverse mărimi de seturi de date și complexități. Toate aceste metode diverse oferă instrumente importante pentru cercetători și analiști, permițând o explorare profundă și eficientă a structurilor naturale în date, fiecare având particularitățile sale care pot fi selectate în funcție de specificul și necesitățile analizei de date. [313-315].

Învățarea regulilor de asociere (eng., *association rule learning*) se concretizează într-o tehnică de data mining utilizată pentru a descoperi relații interesante între variabilele din seturi mari de date. Principali algoritmi de învățare a regulilor de asociere sunt algoritmul *Eclat*, care eficientizează procesul de căutare a combinațiilor de elemente folosind o structură de date verticală, și algoritmul *Apriori* care minimizează spațiul de căutare prin eliminarea combinațiilor de elemente ce nu ating un anumit prag de suport. Într-o manieră complementară, algoritmi bayesieni implementează principiul teoremei lui Bayes pentru a trata și soluționa problemele de clasificare și regresie. Acești algoritmi actualizează probabilitățile în funcție de dovezi și construiesc un cadru solid pentru inferență statistică. Dintre cei mai des utilizați algoritmi bayesieni se disting *Naive Bayes*, care operează pe presupunerea independenței condiționate a caracteristicilor; *Bayes Naive Gaussian*, o variantă a *Naive Bayes* care presupune o distribuție gaussiană a datelor; Rețelele Bayesiene (eng., *Bayesian Network*) și rețelele de tip *Bayesian Belief Network*, care modelează relațiile probabilistice dintre variabile; *Multinomial Naive Bayes*, care sunt potrivite pentru analiza caracteristicilor care reflectă frecvențe, și *Average Single Dependence Estimators* (AOEs), care îmbunătățesc acuratețea clasificării prin considerarea dependențelor între atribute. Acești algoritmi sunt extrem de valoroși într-o varietate largă de aplicații, de la filtrarea spamului și clasificarea textelor, până la diagnosticarea medicală și analiza financiară, demonstrând versatilitatea și eficiența abordării bayesiene în analiza datelor [316-318].

Rețelele Neuronale Artificiale (ANNs) constituie o componentă fundamentală în domeniul învățării automate, fiind utilizate cu succes pentru modelarea complexă a relațiilor dintre datele de intrare și cele de ieșire. Aceste rețele includ o varietate de algoritmi, fiecare având aplicații și funcționalități specifice. Rețelele Neuronale Feed-forward (eng., „*Feed-forward Neural Network*”) transmit informația într-un singur sens, de la straturile de intrare către cele de ieșire, fără a crea bucle de feedback. Rețelele cu funcție de bază radială (eng., „*Radial Basis Function Network, RBFN*”) sunt deosebit de utile pentru sarcini de clasificare și regresie, datorită abilității lor de a apropia cu precizie orice funcție continuă. Rețelele neuronale cu învățare nesupravegheată denumite Rețele Neuronale Auto-organizatoare Kohonen (eng., *Kohonen Self-organizing Neural Network*) sunt utilizate pentru vizualizarea și analiza datelor multidimensionale prin reducerea dimensionalității. Perceptronul (eng., perceptron), unul dintre cele mai vechi tipuri de rețele neuronale, se limitează la clasificarea liniară, în timp ce perceptronul multistrat (eng., multilayer perceptron) adaugă straturi adiționale, permițând modelarea relațiilor non-liniare. Algoritmul de propagare înapoi (eng., *Back Propagation*) și coborârea pe gradient stocastic (eng., *Stochastic Gradient Descent*) sunt metode esențiale pentru antrenarea rețelelor neuronale, pentru că optimizează eforturile rețelei de a minimiza eroarea de predicție. Rețelele Neuronale Modulare (eng., *Modular Neural Networks, MNNs*) și Rețelele Neuronale Recurente de tip Hopfield (eng., *Hopfield Network*) sunt specializate pentru sarcini specifice, prima oferind flexibilitate și adaptabilitate, iar cea de-a doua fiind utilizată pentru recunoașterea de tipare și memorie asociativă [319-321].

Autoencoderile (eng., *Autoencoders*), prin structura lor specifică de codare și decodare, sunt capabile să învețe reprezentări eficiente ale datelor într-un spațiu comprimat, facilitând astfel procese precum reducerea dimensionalității și eliminarea/reducerea zgomotului (eng., *denoising*). În final, Mașinile Boltzmann Restrânse (eng., *Restricted Boltzmann Machines, RBM*) oferă o abordare probabilistică pentru modelarea distribuțiilor datelor. Acestea sunt adesea folosite în pre-antrenarea rețelelor neuronale profunde, ele contribuind la inițializarea ponderilor într-un mod care favorizează

descoperirea de structuri utile în date. Aceste tehnici avansate de învățare profundă demonstrează capacitatea extraordinară a inteligenței artificiale de a modela și procesa informații complexe, rivalizând și uneori depășind performanțele umane în anumite domenii de aplicare. Prin implementarea și integrarea acestor algoritmi, cercetătorii și inginerii pot aborda probleme din ce în ce mai complexe, deschizând noi orizonturi în tehnologia modernă [325-327].

Reducerea dimensionalității (eng., *dimensionality reduction*) este o tehnică esențială în analiza datelor, care permite transformarea seturilor de date complexe dintr-un spațiu cu multe dimensiuni într-unul cu dimensiuni reduse, păstrând în același timp caracteristicile semnificative ale datelor originale. Această metodologie nu numai că simplifică modelarea datelor, dar și contribuie la reducerea zgomotului și complexității, îmbunătățind eficiența proceselor de învățare automată. Printre metodele fundamentale de reducere a dimensionalității se numără Analiza Componentelor Principale (eng., *Principal Component Analysis, PCA*), care identifică direcțiile de variație maximă în date; Factorizarea Matricială Non-negativă (eng., *Nonnegative Matrix Factorization, NMF*), utilă în analiza componentelor cu restricții de non-negativitate; PCA pe baza de Kernel (eng., *Kernel PCA*), care extinde PCA pentru a lucra eficient cu datele non-liniare; Analiza Discriminantă Liniară (eng., *Linear Discriminant Analysis, LDA*) și Generalizată (eng., *Generalized Discriminant Analysis, GDA*), care se concentrează pe maximizarea separabilității claselor; și Autoencoderile (eng., *Autoencoders*), care învață reprezentări comprimate ale datelor. Alte tehnici avansate, cum ar fi Încorporarea Stocastică a Vecinilor T-distribuiți (eng., *T-Distributed Stochastic Neighbor Embedding, t-SNE*) și Aproximarea și Proiecția Uniformă a Varietăților (eng., *Uniform Manifold Approximation and Projection, UMAP*), facilitează vizualizarea datelor în spații reduse păstrând relațiile de vecinătate, în timp ce metodologiile precum Regresia Componentelor Principale (eng., *Principal Components Regression, PCR*) și Regresia cu Pătrate Parțiale Minime (eng., *Partial Least Squares Regression, PLSR*) optimizează corelațiile și distanțele între punctele din date [328-330].

Tehnicile de ansamblu (eng., *ensemble techniques*) reprezintă strategii avansate în modelarea predictivă, care constau în combinarea mai multor modele pentru a obține o precizie superioară față de cea posibilă cu un singur model. Aceste tehnici sporesc robustețea și acuratețea modelelor prin diversificarea abordărilor de predicție. Amplificarea (eng., *Amplification*) este utilizată pentru intensificarea semnalului predictiv al modelelor mai slabe. Agregarea Bootstrap (eng., *Bootstrap Aggregating*), cunoscută și sub numele de *Bagging*, implică antrenarea multiplă a modelelor pe sub-seturile datelor, realizate prin eșantionare cu înlocuire, pentru a reduce varianța estimărilor. AdaBoost (eng., *AdaBoost*) este o tehnică care ajustează ponderile instanțelor de date pentru a se concentra pe cazurile dificil de clasificat, îmbunătățind performanța modelelor succesive. Media Ponderată (eng., *Weighted Average*), cunoscută și sub denumirea de *mixing*, calculează o predicție finală prin combinarea predicțiilor individuale ale modelelor, ponderate în funcție de performanța lor. Generalizarea Stivuită (eng., *Stacked Generalization*), denumită și *stacking* folosește un model meta pentru a învăța cum să combine cel mai bine predicțiile mai multor modele de bază, optimizând integrarea ieșirilor lor. Mașinile de Întărire a Gradientului (eng., *Gradient Boosting Machines, GBM*) îmbunătățesc modelele prin adăugarea secvențială a modelelor noi care corectează erorile celor anterioare, folosind gradientul funcției de pierdere. Arborii de Regresie Întăriți de Gradient (eng., *Gradient Boosted Regression Trees, GBRT*) aplică această tehnică specific pe arbori de decizie, oferind o abordare puternică pentru problemele de regresie și clasificare. În cele din urmă, Random Forest (eng., *Random Forest, RF*) combină predicțiile a numeroși arbori de decizie antrenați pe diverse sub-seturi ale datelor, fiecare având o selecție aleatoare de caracteristici, ceea ce contribuie la creșterea diversității și la reducerea riscului de supra-antrenare. Utilizarea acestor tehnici de ansamblu permite construirea de modele predictiv mai robuste și adaptabile, capabile să gestioneze complexitatea și varietatea datelor cu o acuratețe crescută. Aceste metode sunt esențiale pentru aplicații în care este critică o înțelegere profundă și exactă a fenomenelor studiate, facilitând dezvoltarea de soluții predictive eficiente și personalizate în diverse domenii de aplicare [331-333].

3.2 Componente esențiale ale aplicării sistemelor inteligente în domeniul chimiei computaționale și al bioinformaticii

În era digitală, chimia computațională și bioinformatica au cunoscut o transformare profundă prin integrarea sistemelor inteligente. Aceste tehnologii avansate, bazate pe AI și învățare automată, au revoluționat modul în care sunt analizate și prezise comportamentele compușilor chimici și ale moleculelor biologice. Prin aplicarea modelării predictive și a descriptorilor moleculari, aceste sisteme permit o înțelegere detaliată a relațiilor complexe dintre structura moleculară și activitatea sau proprietățile substanțelor. În plus, metodele de inteligență artificială sunt utilizate pentru a evalua și prezice profilurile farmacocinetice și toxicologice ale compușilor, oferind astfel instrumente esențiale pentru screeningul analitic și pentru identificarea și controlul substanțelor chimice sintetice ilegale [334-336].

3.2.1 Implementarea modelării QSAR/QSPR pentru relaționarea cantitativă a structurii moleculare cu activitatea și/sau proprietățile substanțelor analizate în screeningul analitic al compușilor chimici sintetici ilegali

Implementarea modelării QSAR/QSPR pentru relaționarea cantitativă a structurii moleculare cu activitatea și/sau proprietățile substanțelor analizate în screeningul analitic al compușilor chimici sintetici ilegali reprezintă un proces complex și esențial în domeniul chimiei analitice și al toxicologiei. QSAR (eng., *Quantitative Structure-Activity Relationship*) și QSPR (eng., *Quantitative Structure-Property Relationship*) reprezintă metode computaționale utilizate pentru a corela structura moleculară a unui compus cu activitatea sa biologică sau cu diverse proprietăți fizico-chimice. Modelarea QSAR/QSPR presupune crearea unor modele predictive bazate pe analiza relațiilor dintre structurile chimice și activitățile sau proprietățile observate. Aceasta implică colectarea unui set de date extins care să includă structurile moleculare ale compușilor de interes și valorile măsurate ale activităților sau proprietăților respective. Modelele sunt construite utilizând diverse tehnici statistice și de învățare automată, cum ar fi ANNs, MLR sau metode bazate pe vecinătatea celui mai apropiat vecin (k-NN) [337-339].

Un alt domeniu de interes în dezvoltarea modelării QSAR/QSPR este integrarea acestora cu alte metode computaționale, cum ar fi andocarea moleculară (eng., *Molecular Docking*) și simulările dinamice moleculare (eng., *Molecular Dynamics Simulations*). Aceste tehnici permit o explorare mai detaliată a interacțiunilor la nivel molecular și pot furniza informații suplimentare care să îmbunătățească acuratețea modelelor predictive. De exemplu, tehnicile de andocare moleculară pot fi utilizate pentru a prezice modul în care un compus se leagă la o țintă biologică specifică, iar aceste informații pot fi integrate în modelele QSAR pentru a îmbunătăți predicțiile legate de activitatea biologică [342, 343].

3.2.2 Evaluarea și predicția profilului farmacocinetic și toxicologic prin metode de Inteligență Artificială și prin utilizarea descriptorilor moleculari

Evaluarea și predicția profilului farmacocinetic și toxicologic prin metode de Inteligență AI și prin utilizarea descriptorilor moleculari (eng., *Molecular Descriptors*) reprezintă un aspect esențial în dezvoltarea și testarea compușilor chimici noi. Această abordare avansată permite cercetătorilor să efectueze evaluări sau predicții ADMET (eng., *Absorption Distribution Metabolism Excretion Toxicity*) anticipând modul în care un compus va fi absorbit, distribuit, metabolizat și excretat de către organism (profilul farmacocinetic), precum și potențialele efecte toxice pe care le-ar putea avea (profilul toxicologic) [344, 345].

Metodele de AI, cum ar fi ANNs, SVM și DL, sunt utilizate pentru a construi modele predictive bazate pe seturi de date mari și diverse. Aceste modele sunt antrenate pe date experimentale cunoscute, învățând să recunoască tiparele și relațiile dintre descriptorii moleculari și profilurile farmacocinetice și toxicologice. După antrenare, modelele pot fi folosite pentru a prezice comportamentul unor noi compuși care nu au fost încă testați experimental.

Un exemplu concret de utilizare a AI în evaluarea profilului farmacocinetic este predicția biodisponibilității unui compus, adică proporția de substanță activă care ajunge în circulația sistemică și este disponibilă pentru a avea un efect terapeutic. Modelele de învățare automată pot analiza descriptorii moleculari pentru a prezice dacă un compus va avea o biodisponibilitate ridicată sau scăzută. Această informație este crucială pentru selectarea celor mai promițători compuși pentru teste suplimentare și dezvoltare ulterioară.

În ceea ce privește profilul toxicologic, AI poate fi utilizată pentru a prezice potențialele efecte adverse ale compușilor, cum ar fi hepatotoxicitatea, cardiotoxicitatea sau toxicitatea asupra sistemului nervos central. Modelele predictive pot identifica compușii care prezintă un risc ridicat de toxicitate, permițând astfel cercetătorilor să evite investițiile costisitoare în compuși care ar putea eșua în etapele ulterioare ale dezvoltării [348, 349].

Integrarea datelor omice (genomice, proteomice, metabolomice) cu modelele AI și descriptorii moleculari reprezintă o altă direcție inovatoare. Aceste seturi de date omice oferă o imagine detaliată a modului în care compușii chimici interacționează cu sistemele biologice la nivel molecular. De exemplu, analiza transcriptomică poate dezvălui modul în care un compus influențează expresia genelor, oferind indicii despre posibilele efecte toxice sau terapeutice. Aceste abordări permit o evaluare rapidă și precisă a compușilor chimici, reducând costurile și timpul necesar pentru dezvoltarea de noi medicamente și asigurând totodată siguranța și eficacitatea acestora [350, 351].

3.3 Rețele Neuronale Artificiale pentru recunoașterea identității de clasă a canabinoidelor sintetice și a altor substanțe interzise

Recunoașterea identității de clasă a canabinoidelor sintetice și a altor substanțe interzise constituie o provocare semnificativă în domeniul chimiei analitice și al toxicologiei analitice. Aceste substanțe sunt frecvent supuse modificărilor chimice pentru a eluda detecția prin metodele convenționale și pentru a ocoli reglementările legale stricte, complicând astfel considerabil procesul de identificare și clasificare. În acest context, se impune dezvoltarea unor metode avansate și precise, capabile să identifice fiabil aceste substanțe, ANNs oferind o soluție promițătoare pentru această problemă complexă [352, 353].

ANNs reprezintă sisteme de învățare automată inspirate de structura și funcționarea creierului uman, cu abilitatea de a învăța din date și de a recunoaște tipare complexe. În cazul recunoașterii canabinoidelor sintetice și a altor substanțe interzise, diverse tipuri de Rețele Neuronale Artificiale superficiale, Rețelele Neuronale Adânci (eng., *Deep Neural Networks, DNNs*), Rețelele Neuronale Convoluționale (eng., *Convolutional Neural Networks, CNNs*) sau Autoencodere (eng., *Autoencoders*), pot fi utilizate pentru a îmbunătăți acuratețea și eficiența procesului de identificare. ANNs cu unul sau două straturi ascunse (hidden layers) sunt denumite în literatura de specialitate „superficiale” (eng., *Shallow*), iar cele cu trei sau mai multe straturi, „adânci” sau „profunde” (DNNs), termenii fiind utilizați pentru a descrie rețele neuronale cu adâncimi diferite. ANNs superficiale sunt mai simple și au un număr redus de straturi, în timp ce DNNs sunt mai complexe și conțin multiple straturi ascunse. În mod tradițional CNNs sunt considerate profunde, având multe straturi, dar există în literatură și clasificări potrivit cărora sunt considerate profunde CNNs cu 30 sau mai multe straturi (eng., *Deep Convolutional Neural Networks, DCNNs*) [354, 355].

3.3.1 Principiile de bază și tipurile de Rețele Neuronale Artificiale utilizate în bioinformatică, criminalistică, farmacodinamică și evaluarea toxicității medicale

ANNs sunt definite prin mai multe componente esențiale, care le determină structura și funcționarea. Tipul unităților funcționale, adică elementele de procesare numite noduri sau neuroni, au un rol esențial. Aceste unități funcționale sunt responsabile pentru procesarea informațiilor și transmiterea semnalelor în cadrul rețelei, contribuind astfel la capacitatea rețelei de a învăța și a face predicții. Arhitectura rețelei neuronale reprezintă un alt aspect fundamental și se referă la amplasarea unităților funcționale sau a straturilor. Structura arhitecturală include numărul de straturi, tipul fiecărui

strat (de intrare, ascuns sau de ieșire), și modul în care acestea sunt conectate. Această arhitectură determină modul în care informația circulă prin rețea și influențează complexitatea modelului, precum și capacitatea sa de a captura relații complexe în date.

Algoritmul de funcționare al unei rețele neuronale descrie transformarea semnalului de intrare într-un semnal de ieșire. Acesta implică aplicarea unor funcții matematice specifice, cum ar fi funcțiile de activare, care introduc non-linearități și permit rețelei să modeleze relații complexe și non-liniare. Algoritmul de funcționare este esențial pentru capacitatea rețelei de a procesa și interpreta datele. Algoritmul de învățare, pe de altă parte, definește modul în care rețeaua neuronală achiziționează noi cunoștințe pe baza exemplurilor. Acesta implică tehnici de antrenare, cum ar fi retropropagarea, care ajustează ponderile conexiunilor dintre neuroni pentru a minimiza eroarea de predicție. Algoritmul de învățare permite rețelei să se adapteze și să îmbunătățească performanța pe măsură ce este expusă la mai multe date, fiind esențial pentru capacitatea rețelei de a generaliza și de a face predicții precise pe date noi [361-362].

În învățarea automată, rețelele neuronale reprezintă un model computațional inspirat biologic, care constă într-o arhitectură de rețea compusă din neuroni artificiali. Această structură include un set de parametri ce pot fi ajustați pentru a îndeplini sarcini specifice. Rețelele neuronale posedă proprietăți de aproximare universală, ceea ce înseamnă că pot aproxima orice funcție într-o dimensiune oarecare și până la un grad dorit de acuratețe. ANNs sunt formate dintr-un strat de intrare (eng., *input layer*), unul sau mai multe straturi ascunse (eng., *hidden layer*) și un strat de ieșire (eng., *output layer*). Stratul de intrare primește datele brute și le transmite mai departe către straturile ascunse. Aceste straturi ascunse sunt esențiale pentru capacitatea rețelei de a învăța relații complexe, deoarece fiecare neuron din aceste straturi aplică o funcție de activare non-lineară asupra sumelor ponderate ale intrărilor sale. În aplicațiile de aproximare, clasificare și prognoză arhitecturile ANNs utilizează diverse tipuri de straturi pentru a prelucra și analiza datele, fiecare având un rol specific în îndeplinirea sarcinilor de învățare automată. Perceptronul (eng., *perceptron layer*) reprezintă unitatea fundamentală a rețelelor neuronale. Fiecare perceptron primește intrări ponderate, aplică o funcție de activare și produce o ieșire. Aceste straturi sunt utilizate pentru a învăța relații simple între datele de intrare și cele de ieșire, fiind componente de bază în rețelele neuronale [365-367].

Vederea artificială sau viziunea computerizată (eng., *computer vision*), reprezintă un domeniu din ce în ce mai important AI și al învățării automate. În esență, viziunea computerizată își propune să permită sistemelor să interpreteze și să înțeleagă informațiile vizuale din lumea reală, similar modului în care o fac oamenii. Aceasta implică procese complexe de achiziție, procesare, analiză și interpretare a imaginilor digitale și a secvențelor video pentru a extrage informații semnificative și a lua decizii bazate pe aceste date. CNNs sunt specializate pentru detecția și segmentarea obiectelor în imagini, precum și pentru recunoașterea sau clasificarea obiectelor. Aceste rețele utilizează filtre convoluționale pentru a detecta caracteristici specifice, precum margini, texturi și forme, fiind esențiale în aplicații precum recunoașterea fețelor și clasificarea imaginilor medicale. Rețelele neuronale care utilizează mecanisme de atenție (eng., *Attention-based Neural Networks*) sunt special concepute pentru procesarea limbajului natural.

Rețelele se concentrează pe cuvinte sau fraze relevante din textul de intrare, permițând modelului să captureze relații semantice și să îmbunătățească performanța în sarcini precum traducerea automată și rezumatul textelor. Principiul de bază al funcționării CNNs este extragerea și învățarea caracteristicilor de la datele brute prin aplicarea unor operații de convoluție și pooling. Convoluția permite captarea caracteristicilor locale, iar pooling-ul contribuie la reducerea dimensionalității și la generalizarea modelului. Deconvoluția (eng., *Deconvolution sau Transposed Convolution*) atunci când este utilizată, ajută la reconstrucția și interpretarea informațiilor vizuale [370-373].

Augmentarea datelor (eng., *Data Augmentation*) constituie o strategie pivotală în formarea CNNs, facilitând extinderea și diversificarea corpusului de date prin aplicarea deliberată a unor modificări asupra intrărilor. Această metodologie este esențială pentru a promova capacitatea de generalizare a modelului și pentru a contracara fenomenul de overfitting, manifestat atunci când o rețea devine excesiv de optimizată pentru setul de antrenament, pierzându-și eficacitatea pe date noi și

neexplorate. Modificările implementate sunt concepute astfel încât să conserve atribuții fundamentale ale datelor, totodată expunând modelul la un spectru amplificat de scenarii posibile. Utilizând această abordare, rețelele neuronale dobândesc abilitatea de a extrage și procesa caracteristici robuste, fiind astfel capabile să identifice obiecte și modele sub variate condiții de iluminare, orientare și alte aspecte vizuale critice. Această capacitate se dovedește a fi de neînlocuit în aplicații practice cum ar fi recunoașterea facială, analiza imagistică medicală și sistemele de navigație pentru vehicule autonom [379].

Tehnicile de augmentare a datelor sunt variate și diverse, fiecare contribuind la îmbunătățirea capacității modelelor de învățare automată de a generaliza dincolo de setul de antrenament. Rotații (eng., *Rotations*) și scalări (eng., *Scaling*) permit ajustarea orientării și dimensiunii imaginilor, în timp ce tăieri (eng., *Cropping*) și ajustări ale luminozității și contrastului (eng., *Adjustments of Brightness and Contrast*) modifică detaliile vizuale ale datelor de intrare. Adăugarea de zgomot (eng., *Adding Noise*) și aplicarea de filtre (eng., *Applying Filters*) introduc variații care stimulează robustețea modelului. Întoarcere orizontală și verticală (eng., *Horizontal and Vertical Flipping*), translație (eng., *Translation*) și shearing sunt alte metode care schimbă structura spațială a imaginilor [380, 381].

Modificarea culorilor (eng., *Color Jittering*) și perspective warping (eng., *Perspective Warping*) adaugă diversitate cromatică și respectiv distorsionează perspectiva. Tehnici precum *Mixup* și *Cutout* combină diferite imagini sau elimină porțiuni ale acestora pentru a crea noi exemple de antrenament. *Random erasing*, *Contrast normalization* și *Noise injection* sunt, de asemenea, utilizate pentru a induce rezistență la perturbări ale intensității și texturii imaginilor. Tehnici suplimentare includ *Gaussian Blur* pentru simularea efectelor de estompare, *Random patches* pentru schimbarea contextului local al regiunilor din imagini și *Grayscale Conversion* pentru reducerea informației de culoare. *Gamma adjustments*, *Random Brightness* și *Random Contrast* ajustează parametrii de iluminare și contrast aleatoriu, în timp ce *Saturation Adjustment* și *Hue Adjustment* modifică intensitatea și tonul culorilor. Alte tehnici precum *Random Crop*, *Pad and Crop* și *Tiling* optimizează sau extind zonele de interes, iar *Mirroring* și *Affine Transformations* schimbă geometria imaginilor. Tehnici inovative precum *Feature Space Augmentation* și *Random Noise Injection* introduc variații direct în spațiul caracteristicilor modelului. Alte tehnici de preprocesare spectrală cum ar fi corecția ATR (eng., *ATR correction*), normalizarea (eng., *normalization*) și netezirea spectrelor (eng., *Smoothing*) sunt exemple esențiale de preprocesare care, alături de tehnici de augmentare a datelor, constituie operațiuni fundamentale în pregătirea și optimizarea seturilor de date necesare pentru antrenarea eficientă a CNNs. Aceste procese asigură că datele de intrare sunt transformate și standardizate adecvat, sporind capacitatea modelului de a învăța caracteristici relevante și de a generaliza pe baza unui spectru larg de scenarii posibile [384, 385].

Pooling-ul reprezintă o operație esențială care contribuie la reducerea dimensiunii spațiale a reprezentărilor extrase prin convoluții, cu scopul de a diminua complexitatea computațională și de a crește robustețea caracteristicilor detectate. Această tehnică, cunoscută și sub numele de sub-sampling sau down-sampling, are rolul de a consolida informațiile relevante și de a elimina redundanțele din imaginea inițială. În practică, pooling-ul poate fi realizat prin diferite metode, cele mai comune fiind max pooling și average pooling. Max pooling-ul selectează valoarea maximă dintr-o fereastră specificată a caracteristicilor, în timp ce average pooling-ul calculează media aritmetică a valorilor din acea fereastră [388, 389].

Stratul complet conectat sau dens (eng., *Fully Connected layer sau Dense Layer*) este utilizat în etapele finale ale modelului CNN pentru a combina caracteristicile extrase de straturile anterioare și pentru a produce predicțiile finale. Aceste straturi conectează fiecare neuron dintr-un strat la fiecare neuron din stratul următor, fiind esențiale pentru integrarea informațiilor și realizarea clasificărilor sau predicțiilor. Straturile convoluționale transpozate, cunoscute și ca straturi de deconvoluție (eng., *Transposed Convolutional layers sau Deconvolution layers*), sunt utilizate pentru a mări dimensiunea hărților de caracteristici, fiind esențiale în aplicații de reconstrucție a imaginii, cum ar fi segmentarea semantică. Aceste straturi inversează procesul de convoluție, aplicând operații care reconstituie dimensiunile originale ale imaginii. Stratul de normalizare pe loturi (eng., *Batch Normalization layer*) este utilizat pentru a normaliza activările din straturi intermediare, îmbunătățind stabilitatea și viteza de

antrenare a rețelei neuronale. Prin normalizarea loturilor de date, acest strat ajută la prevenirea supraînvățării și la stabilizarea procesului de antrenare. În concluzie, straturile convoluționale și cele asociative din CNN au roluri esențiale în prelucrarea și analiza datelor vizuale. Straturile convoluționale extrag caracteristicile esențiale din imagini, straturile de pooling reduc dimensiunile hărților de caracteristici, straturile complet conectate integrează informațiile pentru predicții finale, iar straturile de deconvoluție și de normalizare pe loturi contribuie la reconstrucția imaginii și la stabilitatea antrenării [390].

Rețelele neuronale de tip *Transformer* reprezintă o clasă revoluționară de modele bazate pe mecanismele de atenție, care au transformat fundamental procesarea limbajului natural și, recent, și domeniul vizual. La baza acestor rețele stă mecanismul de atenție (eng., *Attention mechanism*), care permite modelului să se concentreze asupra diferitelor părți ale datelor de intrare în mod adaptativ, oferind o capacitate îmbunătățită de a înțelege și reprezenta dependențele complexe și contextul datelor. Una dintre cele mai interesante adaptări ale arhitecturii *Transformer* o reprezintă clasa de modele preantrenate *Vision Transformer (ViT)*, care aplică principiile transformerelor în procesarea și înțelegerea imaginilor. *ViT* împart o imagine în secvențe de patch-uri (segmente), tratând fiecare patch ca un „cuvânt” într-o „propoziție vizuală”. Fiecare patch este codificat printr-o încorporare sau reprezentare într-un spațiu vectorial (eng., *embedding*) și apoi procesat prin multiple straturi de atenție (eng., *Attention Layers*) și rețele neuronale, permitând modelului să captureze relații spațiale complexe între diferite regiuni ale imaginii. Avantajul major al modelelor *ViT* în comparație cu arhitecturile CNN tradiționale constă în capacitatea sa de a modela dependențe pe distanțe lungi între patch-uri, ceea ce îmbunătățește semnificativ performanța în sarcini vizuale complexe [391-393].

Mecanismul de atenție în cadrul modelelor *ViT* utilizează o formulă specifică pentru a calcula atenția, care este esențială în determinarea modului în care diferitele părți ale unei imagini contribuie la înțelegerea globală a scenei (imaginii) [396, 397]. Autoencoderile Convoluționale (eng., *Convolutional Autoencoders, CAE*) reprezintă o altă clasă importantă de rețele neuronale, utilizate frecvent pentru reducerea dimensiunii și pentru învățarea caracteristicilor nesupervizate ale datelor. Un sistem CAE este structurat în două părți principale: un encoder, care comprimă datele de intrare într-o reprezentare latentă mai compactă, și un decoder, care reconstruiește datele de intrare din această reprezentare latentă. Prin antrenarea pentru a minimiza diferența între intrările originale și cele reconstruite, autoencoderii învață reprezentări eficiente ale datelor, fiind extrem de utili în preprocesarea datelor pentru alte sarcini de învățare automată sau în detectarea anomaliilor [398-405].

În contextul specific al detecției substanțelor de abuz, cum ar fi canabinoidele sintetice, utilizarea combinată a acestor două tipuri de rețele neuronale poate transforma radical abordările existente. Analiza imaginilor spectrale ATR-FTIR, înzestrată cu aceste tehnologii, devine nu doar mai precisă, ci și mai adaptabilă la varietățile complexe de substanțe care continuă să apară pe piață. Modelele DCNN adaptate, derivate din familia modelelor pre-antrenate *ViT*, precum și cele fundamentate pe unități de Autoencodere Convoluționale preantrenate, prin capacitățile lor avansate de procesare și învățare, pot ajuta în mod efectiv la crearea unor sisteme de supraveghere care să răspundă rapid și eficient la amenințările emergente legate de abuzul de droguri. Astfel, integrarea acestor tehnologii avansate în sistemele de analiză spectrală promite nu doar îmbunătățiri în termeni de acuratețe și eficiență, dar și o mai bună înțelegere a mecanismelor moleculare, contribuind semnificativ la domeniul securității și monitorizării chimice. Această abordare multidimensională, care îmbină inovația în inteligența artificială cu expertiza în chimia analitică, marchează un pas semnificativ spre avansarea metodelor de detecție și identificare a substanțelor periculoase.

3.3.2 Metode de adaptare și algoritmi pentru antrenarea, selecția, validarea și optimizarea Rețelelor Neuronale Artificiale în detectarea canabinoidelor sintetice JWH, canabinoidelor sintetice non-JWH și a altor substanțe de interes criminalistic

Elaborarea unui protocol complex pentru construirea, activarea, antrenarea, optimizarea, validarea, testarea și desfășurarea rețelelor neuronale artificiale destinat detecției și recunoașterii identității de clasă a canabinoidelor sintetice și a altor substanțe de interes criminalistic implică o serie de etape și tehnici specializate. Fiecare etapă este esențială pentru asigurarea eficienței și acurateții modelului final. Primul pas în dezvoltarea unei rețele neuronale este construirea modelului, care începe cu definirea arhitecturii rețelei. Acesta include alegerea tipului de rețea, a numărului de straturi ascunse, a numărului de neuroni per strat și a funcțiilor de activare adecvate (eng., *Activation functions*), cum ar fi ReLU (eng., *Rectified Linear Unit*), sigmoid (eng., *Sigmoid or Logistic Activation Function*) sau tanh (eng., *Hyperbolic Tangent Activation Function*). Aceste funcții permit modelului să captureze și să modeleze non-linearități complexe din date. Structura rețelei este configurată cu un număr adecvat de straturi și neuroni, iar ponderile sunt inițializate, de obicei, aleatoriu [406-408].

Strategia de antrenament sau instruire (eng., *Training strategy*) este aplicată pentru penalizarea parametrilor funcției de cost sau obținerea unei pierderi minime (eng., *Minimum Loss*), printr-o căutare efectivă a parametrilor care se potrivesc cel mai bine datelor. Indicele de pierdere (eng., *Loss index*) are un rol important, acesta fiind definit prin două componente: un termen de eroare (eng., *Error term*) și un termen de regularizare (eng., *Regularization term*). Termenul de eroare poate include eroarea pătratică medie (eng., *Mean Squared Error, MSE*), eroarea entropiei încrucișate (eng., *Cross Entropy Error, CEE*), sau eroarea Minkowski (eng., *Minkowski Error, ME*), în timp ce termenii de regularizare numerică, cum ar fi L1 și L2, ajută la menținerea unei complexități efective controlate ale rețelei. Regularizările L1 și L2 sunt tehnici de regularizare folosite în învățarea automată pentru a preveni supraînvațarea sau supraspecializarea (eng., *overfitting*) prin penalizarea coeficienților modelului. Iată Regularizarea L1 este cunoscută și ca regularizarea Lasso (eng., *Lasso Regularization*), iar regularizarea L2 este cunoscută și ca regularizarea Ridge (eng., *Ridge Regularization*), aceste metode ajutând la menținerea simplității modelului, fie prin forțarea coeficienților să fie cât mai apropiați de zero (L1), fie prin menținerea sumei pătratelor coeficienților cât mai mică (L2). Regularizarea L1 poate conduce la coeficienți care sunt exact zero, ceea ce înseamnă că poate fi folosită și pentru selecția de caracteristici, în timp ce regularizarea L2 tinde să distribuie eroarea printre toți coeficienții, ceea ce duce la modele mai stabile. [409, 410].

Optimizarea (eng., *Optimization Strategy*) se realizează prin algoritmi specifici, care pot include coborârea pe gradient (eng., *Gradient Descent, GD*), gradientul conjugat (eng., *Conjugate Gradient, CG*), metoda quasi-Newton, algoritmul Levenberg-Marquardt sau coborârea pe gradient stocastic (eng., *Stochastic gradient descent, SGD*), fiecare având avantaje și dezavantaje specifice în contextul optimizării rețelelor neuronale. Acești algoritmi ajustează parametrii rețelei într-un număr definit de epoci, căutând minimizarea pierderilor prin modificarea incrementală a parametrilor [413, 414].

Adam (Adaptive Moment Estimation) combină ideile din RMSProp și Momentum. Calculează o medie mobilă exponențială a gradientului și a gradientului pătrat și utilizează aceste medii pentru a scala gradientul. Avantajele includ adecvarea pentru obiective non-staționare, eficiența pentru probleme mari (în termeni de date sau parametri) și necesitatea mai redusă de ajustare a ratei de învățare. Dezavantajele includ costuri computaționale mai mari decât metodele mai simple, cum ar fi SGD. Adam W este o versiune optimizată cu regularizare a decăderii greutății, arătând performanțe îmbunătățite. LAMB (eng., *Layer-wise Adaptive Moments optimizer for Batch training*) și RAdam (eng., *Rectified Adam*) sunt de asemenea variante ale lui Adam care oferă îmbunătățiri în anumite situații. În practica învățării profunde, Adam, SGD sau unele dintre variațiile lor sunt adesea un bun punct de plecare datorită combinației eficiente de proprietăți bune din alte metode. Cu toate acestea, alegerea optimizatorului poate depinde încă de problema specifică în cauză, și este adesea benefic să se experimenteze cu diferiți optimizatori pentru a găsi cea mai bună potrivire [415, 416].

Selectarea modelului (eng., *Model Selection*) este importantă pentru determinarea arhitecturii optime și minimizarea erorilor pe instanțele selectate din setul de date. Se pot utiliza algoritmi de selecție

a neuronilor (eng., *Neurons selection*) sau a intrărilor (eng., *Inputs selection*), cum ar fi procesul de adăugare progresivă a caracteristicilor sau intrărilor într-un model pentru a evalua impactul lor asupra performanței acestuia (eng., *Growing inputs*), reducerea complexității modelului prin eliminarea ponderilor care contribuie cel mai puțin la performanța rețelei (eng., *Pruning inputs*), pentru a identifica caracteristicile care oferă cele mai bune capacități de generalizare. Metodele de reeșantionare (eng., *Resampling methods*) și de validare reprezintă proceduri statistice utilizate pentru a estima precizia estimărilor de eșantion (metrice și coeficienți) prin extragerea repetată de probe din setul de antrenament. Scopul acestor metode este de a îmbunătăți robustețea modelului de învățare automată și de a evalua modul în care modelul va generaliza pe un set de date independent.

Validarea încrucișată pe mai multe k sub-seturi egale (eng., *Cross-validation*) reprezintă o procedură de reeșantionare folosită pentru a evalua modelele de învățare automată pe un eșantion limitat de date. Procedura are un singur parametru, denumit k , referindu-se la numărul de sub-seturi în care trebuie împărțit un anumit eșantion de date. Când k este egal cu 5, metoda este denumită validare încrucișată pe 5 sub-seturi (eng., *5-fold cross-validation*). În această metodă, eșantionul original este împărțit aleatoriu în 5 sub-seturi de dimensiuni egale. Dintre cele 5, un singur subset este păstrat ca date de validare pentru testarea modelului, iar celelalte 4 sunt utilizate ca date de antrenament. Procesul de validare încrucișată este repetat de 5 ori, fiecare dintre cele 5 sub-seturi fiind folosit doar o dată ca date de validare [417, 418].

În cazul DCNNs se pot aplica mai multe tehnici și algoritmi specifici. Validarea încrucișată pe k partiții (eng., *k-Fold Cross-Validation*) este o versiune generalizată a validării încrucișate în 5 sub-seturi, permițând ajustarea numărului de partiții pe baza dimensiunii setului de date. Validarea încrucișată stratificată pe k partiții (eng., *Stratified k-Fold Cross-Validation*) este similară cu validarea încrucișată pe k partiții, dar sub-seturile sunt formate păstrând procentajul de probe pentru fiecare clasă, aceasta fiind utilă în cazul seturilor de date neechilibrate. Validarea încrucișată Leave-One-Out (eng., *Leave-One-Out Cross-Validation - LOOCV*) reprezintă un caz specific de validare încrucișată pe k partiții, unde k este egal cu numărul total de observații din setul de date. Fiecare set de învățare este creat luând toate probele, cu excepția uneia, care este lăsată pentru testare. Acest lucru poate fi foarte costisitor computațional pentru seturi de date mari. Metoda aleatoare de sub-eșantionare sau metoda Holdout (eng., *Random Subsampling or Holdout Method*) implică împărțirea aleatoare a datelor într-un set de antrenament și un set de validare. Modelul este antrenat pe setul de antrenament și evaluat pe setul de validare. Principalul dezavantaj este că poate duce la o varianță mare [419, 420].

Metoda Bootstrapping implică eșantionarea aleatoare cu înlocuire din setul de date, fiind utilizată pentru a estima proprietățile statistice ale unui estimator (cum ar fi media și varianța) când se eșantionează dintr-o distribuție aproximativă. Aplicarea validării încrucișate în 5 sub-seturi în antrenarea DCNNs oferă multe beneficii, precum echilibrul între părtinire și varianță, o estimare mai fiabilă a performanței modelului și un instrument util pentru selecția modelului. Configurația care performează cel mai bine, în medie, poate fi selectată ca model final. Cu toate acestea, validarea încrucișată este costisitoare din punct de vedere computațional, deoarece necesită antrenarea modelului de mai multe ori, ceea ce este semnificativ în cazul DCNNs, care adesea implică un număr mare de parametri și pot necesita resurse computaționale semnificative pentru antrenament. Cu toate acestea, beneficiile pe care le oferă în crearea unui model mai robust fac adesea din aceasta o tehnică valoroasă [421, 422].

Evaluarea performanței modelului, sau testarea în contextul clasificării multi-clasă necesită metode detaliate de măsurare, care pot varia în funcție de specificul și echilibrul claselor. Pe lângă metoda comună de a evalua media metricii fiecărei clase individual, există alte abordări cum ar fi media macro (eng., *Macro-average*), media micro (eng., *Micro-average*) și media ponderată (eng., *Weighted-average*), fiecare oferind perspective diferite asupra performanței modelului, mai ales în cazul claselor neechilibrate. Pentru a obține o viziune cuprinzătoare asupra performanței modelului dezvoltat, recomandările din literatura de specialitate înclină spre metodele de testare și evaluare specifice fiecărei clase, cum ar fi: acuratețea per clasă (eng., *per-class Accuracy*), precizia (eng., *Precision*), pierderea (eng., *Loss*), curba caracteristică de operare a receptorului (eng., *ROC Curve*), rata de eroare (eng., *Error Rate*), specificitatea (eng., *Specificity*), sensibilitatea (eng., *Sensitivity*) și scorul F1 (eng., *F1*

Score), alături de matricile de confuzie (eng., *Confusion Matrices*) sau metoda de ajustare liniară LOWESS (eng., *LOWESS-Linear Fit*) [423-426].

Implementarea în domeniul învățării automate presupune aplicarea practică a unui model pentru a efectua predicții asupra datelor noi. Acest proces esențial permite exploatarea cunoștințelor acumulate prin model pentru a oferi soluții viabile și aplicative utilizatorilor finali. În funcție de specificațiile proiectului, faza de implementare poate varia de la generarea unui simplu raport până la elaborarea unui sistem complex de învățare continuă, adaptabil la schimbările din mediul operațional.

În contextul detectării și recunoașterii identității de clasă a canabinoidelor sintetice și a altor substanțe de abuz, mediile de programare *Python* și *Wolfram Mathematica* se evidențiază prin capacitatea de a sprijini dezvoltarea eficientă a ANNs. *Python*, recunoscut pentru bibliotecile sale extinse precum *TensorFlow*, *Keras* și *PyTorch*, oferă unelte robuste pentru antrenarea și implementarea algoritmilor de învățare automată. Aceste biblioteci facilitează manipularea și analiza datelor complexe, susținând dezvoltarea de modele predictive avansate. *Wolfram Mathematica*, utilizat inclusiv de NASA pentru analize în cadrul misiunilor spațiale, se distinge prin abilitatea de a efectua calcul simbolic și numeric avansat. Acesta oferă funcții integrate pentru procesarea și vizualizarea datelor, îmbunătățind astfel capacitatea de testare și prototipare a modelor inovatoare în domeniul învățării automate. Pachetul software *Neural Designer* oferă o interfață intuitivă pentru analiza datelor și modelarea predictivă, facilitând accesul utilizatorilor la tehnici de optimizare avansate, care contribuie la accelerarea procesului de modelare și implementare a rețelelor neuronale. Pentru implementarea practică, tehnologiile web precum *HTML*, *PHP* și *C++* sunt indispensabile. Acestea permit integrarea și funcționarea modelelor de învățare automată în aplicații web, oferind o interfață accesibilă pentru interacțiunea cu utilizatorul final și prezentarea rezultatelor într-un mod comprehensibil [432-433].

CAPITOLUL IV. CONTRIBUȚII ORIGINALE LA DEZVOLTAREA ȘI IMPLEMENTAREA REȚELOR NEURONALE CONVOLUȚIONALE PROFUNDE (DCNNS) FUNDAMENTATE PE METODOLOGII SPECTRALE ȘI TEHNICI DE ÎNVĂȚARE PROFUNDĂ ȘI ÎNVĂȚARE ACTIVĂ PRIN TRANSFER PENTRU DETECTAREA ȘI CLASIFICAREA AUTOMATĂ A CANABINOIDELOR SINTETICE: ABORDĂRI HIBRIDE DE ÎNVĂȚARE ȘI OPTIMIZARE PENTRU TRATAREA DEZECHILIBRELOR DE CLASĂ ÎN SETURI DE DATE VĂRIATE ȘI LIMITATE

4.1 Introducere

❖ Obiective, scop și direcții de cercetare științifică

Obiectivul principal al studiului științific prezentat în acest capitol a constat în dezvoltarea și implementarea unor modele eficiente de DCNNs pentru detectarea și discriminarea canabinoidelor sintetice JWH, canabinoidelor sintetice non JWH și altor categorii de droguri de sinteză de interes criminalistic. Aceste substanțe de abuz sunt deosebit de relevante în contexte criminalistice, sistemele de AI proiectate susținând eforturile de prevenire și combatere a consumului și traficului de droguri, precum și sprijinirea investigațiilor legale asociate.

Direcțiile de cercetare propuse s-au axat pe explorarea unei tematici actuale în domeniul învățării automate (eng., *Machine Learning, ML*), respectiv învățarea profundă (eng., *Deep Learning, DL*). În acest sector, performanța modelelor AI este semnificativ afectată de volumul și calitatea datelor spectrale disponibile. Datorită dimensiunii limitate a setului de date, algoritmi de învățare profundă tind să ofere performanțe inferioare comparativ cu metodele tradiționale de învățare automată. Această limitare a stimulat investigarea și aplicarea de noi strategii în cadrul învățării automate, cum ar fi învățarea activă prin transfer (eng., *Active Transfer Learning*), pentru a optimiza procesul de extracție a cunoștințelor din datele disponibile. Învățarea activă prin transfer, concept detaliat în partea teoretică a prezentei lucrări, introduce un grad suplimentar de complexitate în cadrul proceselor de modelare, prin îmbinarea tehnicilor de selecție activă a datelor cu strategiile de învățare prin transfer. Această abordare hibridă are ca scop optimizarea eficienței și îmbunătățirea performanței procesului de instruire, urmărindu-se reducerea duratei necesare pentru antrenare, îmbunătățirea capacității de generalizare a modelului și utilizarea mai eficientă a seturilor de date disponibile, contribuind, astfel, la creșterea acurateții predicțiilor.

Arhitecturile sistemelor inteligente de clasificare multinomială instruite pe seturi de imagini spectrale ATR-FTIR, propuse în acest capitol, clasifică în trei clase, fiind proiectate, în principal, pentru identificarea cu precizie a canabinoidelor sintetice JWH și a canabinoidelor sintetice non-JWH. În funcție de seturile de date utilizate la antrenament, acestea detectează, cu rezultate remarcabile și alte droguri de sinteză semnificative din punct de vedere criminalistic, precum și medicamente utilizate abuziv. Modelele de Rețele Neuronale Convoluționale Profunde (DCNNs) dezvoltate au la bază trei platforme arhitecturale: o unitate de tip Autoencoder Convoluțional (eng., *Convolutional Autoencoder, CAE*) originală, preantrenată, validată și testată pe setul de date standardizat *CIFAR-10* și două structuri inovative, derivate din modelele *Vision Transformer (ViT-B/32)* și *GoogLeNet Inception V3* preantrenate pe baza de date *ImageNet Competition Data*.

Pentru asigurarea unor performanțe optime, s-au efectuat studii de ablație cu diferite arhitecturi ale elementelor componente, s-au utilizat volume diferențiate de date (echilibrate, dezechilibrate, limitate, extinse) și s-a experimentat cu diverse funcții de cost (*Cross-Entropy Error, Focal Loss, Mean Squared Error*), funcții de activare (*ReLU, Sigmoid, Softmax*), algoritmi de optimizare (*ADAM, RMSProp, SGD, SignSGD*), algoritmi de normalizare (*Batch Normalization, Group Normalization, Instance Normalization*) ori de regularizare numerică (*L1, L2*) și structurală (*Dropout*), la multiple rate de învățare și de oprire timpurie. Metodele inovatoare de învățare activă prin transfer utilizate au integrat tehnici nesupervizate și supervizate, cu preprocesarea datelor spectroscopice ATR-FTIR (Corecție ATR, Normalizare și Netezire) și procesare digitală a imaginilor (Detectia Marginilor, Segmentarea Imaginilor, Corecția Culoarelor, Reducerea Zgomotului, Extracția Caracteristicilor, Accenturarea Detaliilor, Recunoașterea Tiparelor, Procesarea Morfologică, Egalizarea Histogramelor, etc.)

prezentând beneficii semnificative, eficiența lor în instruirea modelelor DCNN pe seturi de date limitate și dezechilibrate (eng., *limited and imbalanced data*) fiind remarcabilă.

Implementarea strategică a unității CAE în modelul DCNN, completată cu tehnici de generare de noi date de instruire prin modificări ale datelor existente, precum cele de augmentare a imaginilor (Transformări Geometrice, Transformări de Culoare, Adăugarea de Zgomot, Transformări Structurale, Transformări de Scalare și Redimensionare, Transformări de Perspectivă, Mascare, Mixup și CutMix, Estompăre Gaussiană, Transformări Elastice, Ștergere Aleatorie sau Decupare, Perspectivă și Distorsiune Aleatorie, Simularea Condițiilor Meteo, Filtre Foto, etc.), validarea încrucișată pe k-subseturi (eng., *5-fold cross-validation*), metode de rezolvare a dezechilibrelor dintre clasele din setul de date prin generarea de noi mostre folosind tehnici de suprasampling (*SMOTE, ADASYN, Borderline SMOTE, Random Over Sampler, Cluster-Based Over Sampling*) și ponderare a claselor (*Class Weights*), au facilitat o abordare eficientă a provocărilor impuse de astfel de seturi de date.

❖ Contribuții originale

Sistemul DCNN prezentat în această lucrare, dezvoltat *ex novo* și fundamentat pe structura preinstruită a unei unități de tip CAE, constituie o premieră în literatura de specialitate, fiind prima arhitectură convoluțională de acest tip, expres dezvoltată pentru detectarea și clasificarea canabinoidelor sintetice JWH și a altor canabinoide sintetice non-JWH. Conceperea acestei arhitecturi s-a realizat secvențial, într-o primă etapă preliminară, proiectându-se unitatea CAE, preinstruindu-se nesupervizat și testându-se pe setul standardizat și neetichetat de imagini non-criminalistice CIFAR-10. Strategia s-a dovedit eficientă, facilitând, într-o etapă subsecventă, integrarea unui bloc de clasificare și antrenarea, optimizarea și testarea cu succes a modelului DCNN rezultat.

Faza de antrenare nesupervizată a modelului CAE s-a concentrat pe minimizarea erorii de reconstrucție, arhitectura acestuia fiind modelată și preinstruită în direcția optimizării captării și compresiei caracteristicilor semnificative ale imaginilor într-un spațiu latent redus. S-a urmărit minimizarea discrepanței dintre imaginile digitale de intrare și cele reconstituite, cunoscută sub denumirea de eroare de reconstrucție. În cea de-a doua etapă experimentală, arhitectura optimizată a unității CAE a fost suplimentată prin studii iterative de ablație cu straturi convoluționale adiționale, straturi de activare, normalizare și regularizare și cu un nou strat de ieșire (eng., *output*), configurat pentru efectuarea clasificării multinomiale, în 3 clase. În procesul de instruire supravegheată, s-au utilizat diverse seturi de imagini spectrale ATR-FTIR, de interes criminalistic și etichetate, precum și multiple tehnici și metode inovative de optimizare, ajustare (eng., *fine-tuning*), validare și testare, cu rezultate remarcabile.

Notabil, și celelalte două modele DCNN evidențiate marchează prima utilizare a familiilor *Vision Transformer* și *Inception* în domeniul criminalistic al detectării și identificării canabinoidelor sintetice, rezultatele performante obținute subliniind eficacitatea metodologiilor de învățare profundă și învățare prin transfer în abordarea provocării complexe a drogurilor de sinteză. Robustetea și adaptabilitatea, precum și portabilitatea lor intrinsecă permit o implementare facilă *in situ*, iar versatilitatea indică adaptabilitate extinsă și pentru sarcini non-criminalistice, în mod specific în domeniile *Computer Vision* ale clasificării imaginilor și detectării obiectelor, abordarea științifică aliniindu-se constant cu sistemele de top documentate în literatura de specialitate [453-456].

O parte dintre rezultatele inițiale remarcabile obținute cu aceste categorii de modele DCNN dezvoltate au fost evidențiate în articole științifice precum „*Harnessing Deep Convolutional Neural Networks Detecting Synthetic Cannabinoids: A Hybrid Learning Strategy for Handling Class Imbalances in Limited Datasets*”, publicat în jurnalul internațional ISI Inventions 2023 sau „*Convolutional Neural Network detecting synthetic cannabinoids*”, comunicat și publicat în cadrul conferinței internaționale The 9th IEEE International Conference on E-Health and Bioengineering - EHB 2021, în prezenta teză de doctorat fiind prezentate rezultate optime finale obținute după optimizări, adaptări și perfecționări continue ale categoriilor de rețele neuronale proiectate [457, 458].

4.2 Baza de date

Pentru desfășurarea cercetării științifice a fost constituită o bază de date denumită *pyDETECT-FTIR DATABASE* cuprinzând date indexate și codificate aferente unui număr de 10.425 de compuși chimici din categoria substanțelor de abuz, obținute în format molecular *Structure Data File (.sdf)* din baza online publică de date PubChem și în format spectroscopic *JCAMP-DX (.jdx)* din librării spectrale cu acces liber ori comercial, cum ar fi *SWGDRUG Database*, *SpectraBase*, *Nicodrom IR Database* și *FDM FTIR and Raman Spectral Libraries*, prin intermediul pachetelor software specifice și a motoarelor de căutare spectroscopice. Pentru instruirea, optimizarea și evaluarea modelelor DCNN au fost utilizate imagini digitale obținute prin intermediul mediilor de programare din colecții sau biblioteci publice, precum *CIFAR 10* și *ImageNet Competition Data* și din procesarea spectrelor ATR-FTIR și arhivarea lor sub formă de imagini digitale.

Schema integrată a acestor seturi de date este reprezentată în Figura 4.1. Fecare clasă de imagini a fost împărțită, în trei subseturi destinate antrenării, validării și testării. Pentru optimizarea instruirii modelelor DCNN, s-a experimentat atât cu setul limitat și echilibrat, cât și cu setul extins și dezechilibrat de imagini digitale spectrale.

Setul de date limitat și echilibrat conținând 375 de imagini digitale spectrale Forensic ATR-FTIR a fost organizat în trei clase reprezentând diverse substanțe de abuz:

- a. Clasa 1 - 125 de canabinoide sintetice;
- b. Clasa 2 - 125 de canabinoide sintetice non-JWH;
- c. Clasa 3 - 125 de alte droguri și medicamente de abuz non-canabinoide.

Lista completă a celor 10.425 de substanțe chimice din setul Forensic ATR-FTIR extins și dezechilibrat a fost inclusă, din motive de concizie a lucrării, în arhiva online Supporting Information a proiectului științific, putând fi consultată la cerere. Setul de date Forensic ATR-FTIR extins și dezechilibrat a fost împărțit în trei categorii, după cum urmează:

- a. Clasa 1 cuprinzând 125 de imagini digitale spectrale ale unor canabinoide sintetice JWH, încadrate în 11 subclase structurale, cum ar fi Napftoilindoli (de exemplu, JWH-018, JWH-073); Naftoilindoli alchilați (de exemplu, JWH-122 8-Methylnaphthyl isomer, JWH-018 2'-Naphthyl isomer); Ciclohexilfenoli (de exemplu, JWH-015, JWH-133); Naftoilindoli fluorinați (de exemplu, FUB-JWH-018, JWH-210 N-[5-Fluoropentyl] analog); Naftoilindoli hidroxilați (de exemplu, JWH-018-4, JWH-019 N-[6-Hydroxyhexyl] metabolit); Naftoilindoli clorinați (de exemplu, JWH-398 6-Chloronaphthyl isomer, JWH-398 2-Chloronaphthyl isomer); Benzoilindoli (de exemplu, JWH-302, JWH-307); Fenilacetilindoli (de exemplu, JWH-250, JWH-251); Naftilmetilindoli (de exemplu, JWH-081, JWH-210); Adamantoilindoli (de exemplu, JWH-018 Adamantyl analog, JWH-018 Adamantyl carboxamidă); și Naftoilpiroli (de exemplu, JWH-147, JWH-370);
- b. Clasa 2 conținând 250 de imagini digitale spectrale ale unor canabinoide sintetice non-JWH, acoperind mai multe grupuri distincte, cum ar fi: canabinoide clasice (de exemplu, HU-210, Tetrahidrocanabinol, Canabidiol, Canabinol, Canabichromene, Canabigerol); canabinoide hibride (de exemplu, AM 251 și URB-447), Aminoalchilindoli (de exemplu, WIN 55,212-2, RCS-8, CHMINACA, Cumyl-PICA, APINACA); Aminoalchilindazoli (de exemplu, AB-FUBINACA, AB-PINACA), etc.;
- c. Clasa 3 conținând un spectru larg de alte droguri de sinteză, totalizând un număr de 10.050 de imagini digitale spectrale. Această clasă heterogenă, substanțială în diversitatea sa, nu doar extinde spectrul de clasificare, dar și amplifică dimensiunea comparativă a procesului de învățare automată. Substanțele de abuz din această clasă provin în principal din categorii cum ar fi psihedelicele, piperazinele, disociativele, empatogenele, stimulantele, sedativele, medicamentele prescrise abuziv și alte droguri de importanță similară (de exemplu, Acidul Lisergic Alfa-Hidroxi-Etilamid, Etiltriptamină, Scalina, 25B-NBOMe, 25C-NBOH, Fentanyl-Furanyl, Testosteron, Flubromazepam, Cocaina, Diazepam, Heroina, Morfina, Scopolamina, Stricnina, Feniramina, etc.).

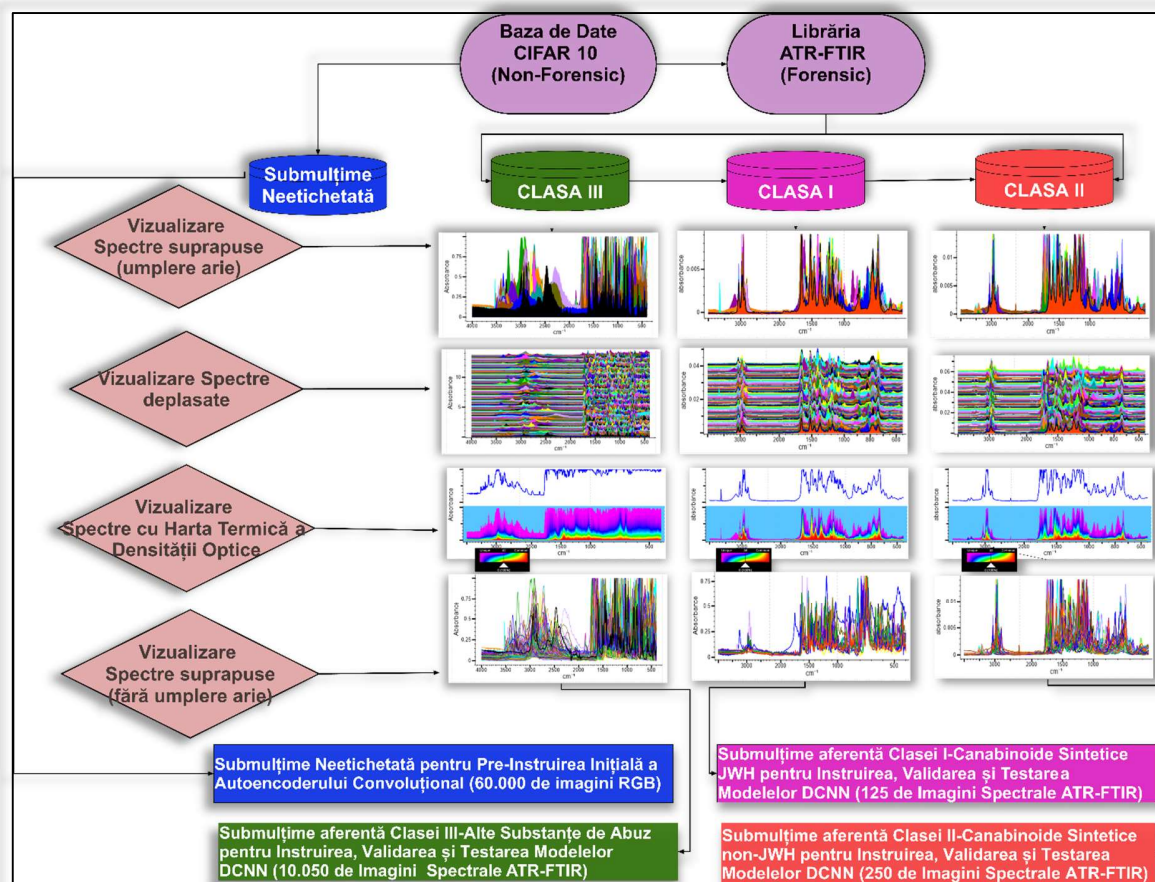


Figura 4.1 Schema integrată a seturilor de date cuprinzând setul de imagini *CIFAR 10* (60.000 de imagini RGB, 32x32) și setul de imagini digitale spectrale Forensic ATR-FTIR, extins și dezechilibrat (10.425 de imagini spectrale alb-negru, 128x128), utilizate în procesele de instruire, optimizare și evaluare a modelelor DCNN dezvoltate.

4.3 Material și metodă

❖ Platforma computațională

În cadrul experimentelor computaționale descrise în acest capitol, a fost utilizată o platformă informatică *Dell G15 5520* neagregată, echipată cu procesor *Intel Core™ i7-12700H* din generația a 12-a, dispunând de 14 nuclee, 20 de thread-uri și o frecvență maximă de funcționare de 4.540 GHz, datorată tehnologiei *Turbo Boost*. Sistemul informatic a fost dotat cu 32 GB de memorie RAM, placă grafică integrată *Intel Iris Xe Graphics*, o unitate grafică adițională *NVIDIA GeForce RTX 3060* cu 6 GB GDDR6, operând sub sistemele de operare Windows 11 Pro și Linux Ubuntu Server 23.04. Pentru evaluarea infrastructurii computaționale, s-au realizat o serie de teste de performanță utilizându-se implementările *High-Performance Linpack (HPL)* (*Intel Distribution for LINPACK Benchmark*, o interfață de consolă ce include modificări și aditii la *HPL* dezvoltate de către Laboratoarele de Computing Inovativ de la Universitatea din Tennessee, Knoxville) [465].

❖ Medii de programare și pachete software

În cadrul acestui capitol, procesele de concepere, instruire, optimizare, evaluare și implementare a modelelor de Rețele Neuronale Convoluționale Profunde (DCNN) au fost realizate utilizându-se limbajele de programare *Python* și *Wolfram Mathematica*. *Python* este bine-cunoscut pentru bibliotecile sale robuste precum *Keras*, *TensorFlow* și *PyTorch*, care facilitează construcția și antrenarea modelelor de învățare automată. *Keras* reprezintă o bibliotecă de învățare automată de nivel înalt, utilizată pentru a construi rapid modele de învățare profundă. Este cunoscută pentru interfața sa simplă și modulară, care permite experimentarea ușoară cu diferite arhitecturi de rețele neuronale. *TensorFlow* constituie o platformă comprehensivă, dezvoltată de Google, care permite crearea complexă de modele de învățare automată. Suportă atât antrenarea distribuită pe mai multe dispozitive, cât și o gamă largă de unelte pentru optimizare, vizualizare și producție. *PyTorch*, dezvoltat de Facebook, este apreciat pentru flexibilitatea și viteza sa, oferind un control excelent asupra grafurilor de calcul prin intermediul *autograd* și suportând antrenarea dinamică a modelelor. *Wolfram Mathematica* oferă un mediu sofisticat pentru prototipare rapidă și analiză matematică avansată, permițând executarea unor calcule complexe și vizualizarea datelor în moduri inovative.

Pentru identificarea, analiza și manipularea datelor spectroscopice și a imaginilor aferente au fost utilizate pachetele software *KnowItAll Analytical Edition Software*, *FDM SDK Spectroscopic Search Engine* și *Spectragryph*. *KnowItAll Analytical Edition Software* oferă o platformă integrată pentru gestionarea, analiza și interpretarea spectrelor ATR-FTIR. Este valoros pentru capacitatea sa de a efectua analize comparative complexe și de a identifica compuși în baza de date extinsă pe care o include. *FDM SDK Spectroscopic Search Engine* reprezintă un motor de căutare spectroscopic care permite identificarea rapidă și precisă a spectrelor necunoscute folosind algoritmi avansați de potrivire. Acesta suportă o gamă largă de formate spectrale și este integrat frecvent în fluxuri de lucru analitice complexe. *Spectragryph* prezintă funcționalități robuste pentru vizualizarea și analiza spectrelor optice, inclusiv ATR-FTIR. Este util pentru interfața sa prietenoasă și pentru capacitatea de a manipula și compara multiple spectre simultan [468-470].

❖ Protocol experimental

Protocolul experimental asigură o abordare sistematică și replicabilă, reprezentând un set de tehnici, metode și proceduri aplicate selectiv, în funcție de proprietățile fiecărui tip de ANN, în vederea asigurării dezvoltării eficiente și robuste și obținerea unor rezultate fiabile și relevante. Pentru dezvoltarea și implementarea modelelor DCNN propuse în prezenta lucrare s-a conceput un protocol integrat, aplicat și executat în mediile de programare *Python* și *Wolfram Mathematica*, incluzând ipotezele de lucru, codurile sursă, etapele și algoritmi destinați instruirii, optimizării, evaluării și testării modelelor DCNN propuse.

Ipotezele de lucru cu privire la dezvoltarea și implementarea unor DCNNs fundamentate pe metodologii spectrale și tehnici de învățare profundă și învățare activă prin transfer pentru detectarea și clasificarea automată a canabinoidelor sintetice au presupus următoarele direcții experimentale:

- Proiectarea, preinstruirea, evaluarea și testarea pe baze de date standardizate a unor unități de Autoencodere Convoluționale optimizate pentru sarcini de reducere a dimensionalității și învățare nesupervizată, urmărindu-se obținerea unor rezultate remarcabile în analiza și procesarea datelor de imagine.
- Dezvoltarea unor modele DCNN de clasificare multinomială (3 clase distincte, 2 pozitive și una negativă), concepute pentru sarcini complexe în domeniul viziunii computerizate, respectiv de achiziție, procesare, analiză și interpretare a imaginilor digitale spectrale, antrenate și optimizate pentru recunoașterea identității de clasă a canabinoidelor sintetice JWH, canabinoidelor sintetice non-JWH și a altor substanțe de abuz:
 - având la bază structurile și parametrii optimizați ai Autoencoderelor Convoluționale;

- fundamentate pe arhitecturile preantrenate ale modelelor din familia *Vision Transformer* și *GoogLeNet Inception*, remodelate și adaptate cerințelor specifice de clasificare în 3 clase.

Cerințele cu privire la tipul, volumul și structura datelor de intrare (eng., *input*) au vizat utilizarea unor imagini digitale și experimentarea cu seturi de volume diferite, organizate și structurate variat: limitate și extinse, respectiv echilibrate și dezechilibrate. Scopul variabilelor de ieșire (eng., *output*) a constat în sarcini de clasificare în 3 clase (identificarea categoriilor/claselor din imaginile digitale). Cadru integrat al proceselor de dezvoltare a modelelor DCNN propuse în această teză de doctorat este prezentat în Figura 4.2.

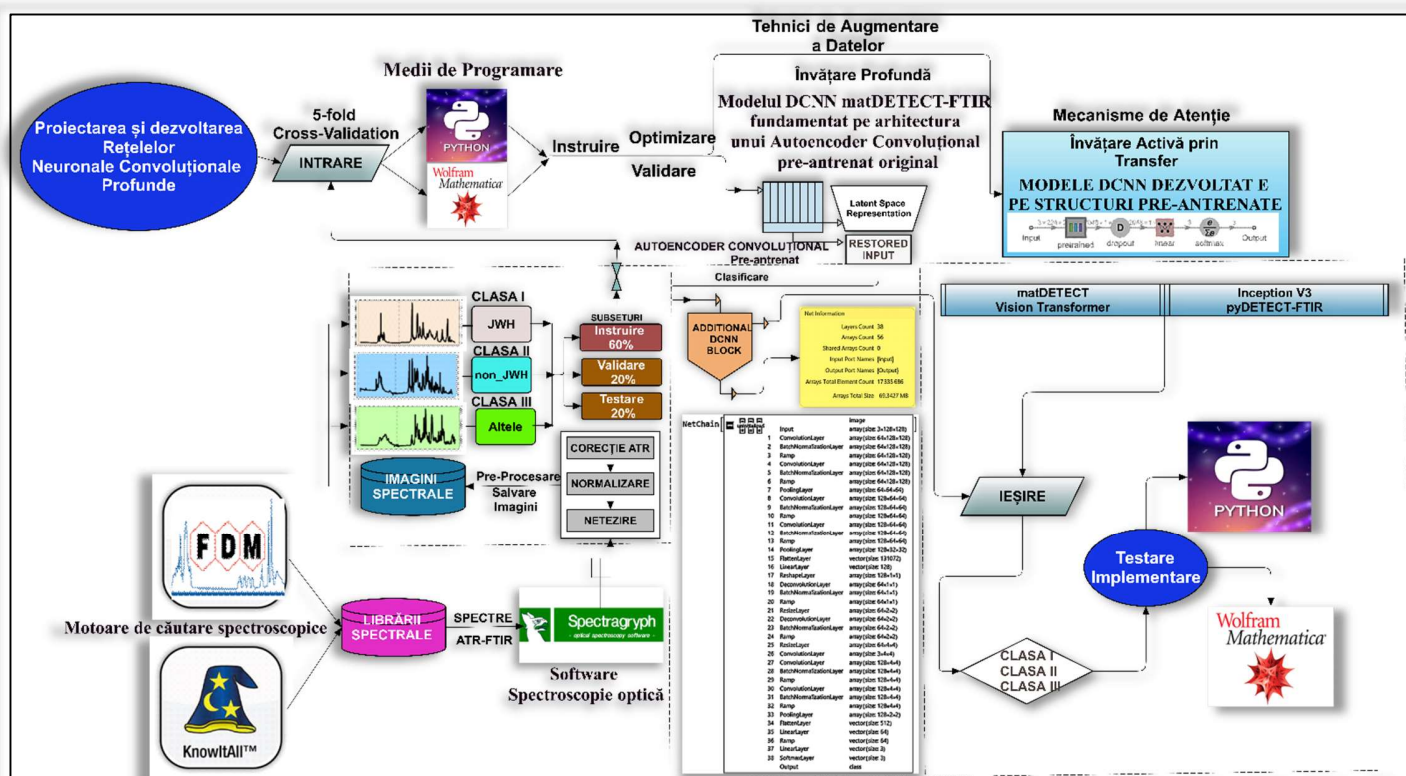


Figura 4.2 Reprezentarea schematică a cadrului metodologic pentru proiectarea, dezvoltarea și implementarea modelelor de Rețele Neuronale Convoluționale Profunde (DCNN).

Având în vedere utilizarea secvențială sau alternativă a mediilor de programare *Python* și *Wolfram Mathematica* în proiectul științific de dezvoltare a rețelelor neuronale evidențiate în prezenta lucrare, pentru asigurarea unei uniformități metodologice menite să asigure consistență și reproductibilitate în cercetare, în raportarea datelor, informațiilor și a rezultatelor experimentale obținute s-a adoptat o abordare unitară în tratamentul funcțiilor de activare, precum *ReLU*, *Sigmoid*, *Softmax*, etc., considerându-le ca straturi integrale ale rețelei neuronale, în pofida faptului că în *Python* acestea nu sunt evidențiate ca straturi independente în reprezentările arhitecturale grafice. Această metodologie are ca scop asigurarea unei prezentări riguroase și detaliate a structurilor rețelelor, permitând o analiză exhaustivă a modului în care datele sunt procesate și transformate în fiecare etapă.

Deosebirile dintre mediile de dezvoltare *Python* și *Wolfram Mathematica*, reflectă diverse filosofii de proiectare. În *Python*, funcțiile de activare sunt frecvent integrate ca parametri ai straturilor principale, cum sunt straturile complet conectate sau cele convoluționale. Aceasta simplifică vizualizarea arhitecturilor rețelei, accentuând pe o reprezentare mai compactă și directă. Pe de altă parte, *Wolfram Mathematica* tratează aceste funcții explicit ca straturi, oferind o transparentizare clară a fiecărei operațiuni.

Adoptarea acestui tratament unitar în protocolul experimental contribuie la clarificarea fluxului de date în rețea, făcând evidentă fiecare transformare a datelor și rolul specific al funcțiilor de activare în acest proces. Aceasta abordare nu doar sporește comprehensiunea structurală a rețelei, dar și evită ambiguitățile potențiale ce pot apărea în interpretarea comparativă a arhitecturilor din diferite medii de dezvoltare. Astfel, prin includerea funcțiilor de activare în contorizarea straturilor, s-a asigurat o descriere exhaustivă și meticuloasă a rețelelor, reflectând fidel complexitatea și detaliile constructive ale acestora. Strategia utilizată conferă o uniformitate metodologică și îmbunătățește calitatea raportării rezultatelor experimentale, facilitând o evaluare riguroasă și echidistantă a performanței modelelor neuronale analizate.

❖ Implementare pentru inferență și dezvoltări viitoare

În cadrul acestui proiect științific, implementarea pentru inferență și dezvoltări viitoare a fost realizată cu atenție deosebită, asigurându-se că toate expresiile matematice, scripturile și codurile sursă au fost elaborate și integrate corespunzător în mediile de programare avansate *Python* și *Wolfram Mathematica*. Aceste medii au fost alese pentru capacitatea lor de a gestiona modele complexe, oferind atât flexibilitate în dezvoltare, cât și putere de procesare pentru sarcini sofisticate de învățare automată.

Arhitecturile DCNNs dezvoltate și evidențiate au trecut prin procese riguroase de instruire, optimizare, validare și testare, rezultând modele robuste și eficiente pentru detectarea și clasificarea cannabinoidelor sintetice și altor substanțe de abuz. Aceste modele au fost ulterior exportate în formate standardizate precum *.h5* (eng. *Hierarchical Data Format version 5 format, HDF5*), *.onnx* (eng., *Open Neural Network Exchange*), *.py* (eng., *Python script*), și *.nb* (eng. *Wolfram Mathematica Notebook format*) pentru a facilita atât inferența, cât și dezvoltările viitoare.

Importanța acestor formate de export este semnificativă. Formatul *.h5* permite stocarea eficientă a modelelor mari, incluzând atât structura rețelei, cât și ponderile antrenate, fiind ideal pentru reutilizarea modelelor și pentru continuarea antrenamentului pe date noi. Formatul *.onnx* oferă portabilitate, permițând modelului să fie utilizat în diverse *framework-uri* de învățare automată, cum ar fi *TensorFlow*, *PyTorch* și *Caffe2*, asigurând astfel interoperabilitatea între diferite platforme. Formatul *.py* este esențial pentru execuția scripturilor în mediile de dezvoltare *Python*, permițând integrarea ușoară a modelelor în aplicații reale, iar *.nb* oferă un mediu interactiv de lucru în mediul de programare *Wolfram Mathematica*, ideal pentru vizualizarea și analiza rezultatelor, facilitând colaborarea între dezvoltatori.

Inferența reprezintă un aspect critic al acestui proiect științific, fiind procesul prin care modelele originale dezvoltate aplică cunoștințele acumulate pentru a face predicții pe seturi de date noi, neantrenate. Acest proces este esențial pentru testarea și validarea performanței modelelor în situații reale, precum și pentru îmbunătățirea continuă a acestora.

Toate aceste resurse, incluzând modelele exportate, au fost depuse în arhiva online Supporting Information a proiectului științific, unde pot fi consultate la cerere. Această arhivare asigură accesul la arhitecturile antrenate și la codurile sursă pentru dezvoltatorii interesați, facilitând reproducibilitatea rezultatelor și susținând viitoare colaborări și dezvoltări în domeniu. Implementarea și documentarea riguroasă în aceste medii avansate de programare contribuie semnificativ la consolidarea bazei științifice a proiectului și la extinderea posibilităților de cercetare în domeniul detectării și clasificării substanțelor de abuz.

4.4 Rezultate

4.4.1 Unitatea de Autoencoder Convoluțional (CAE) *py_AutoConv_DETECT*

I. Modelarea arhitecturii

Deciziile asupra tipurilor, ordinii, numărului de straturi, numărului de neuroni per strat sunt esențiale pentru modelarea non-linearităților complexe din seturile de date, permițând modelelor antrenate să învețe și să reprezinte relații complicate între caracteristicile de intrare și țintele de ieșire. În urma experimentelor iterative și a studiilor de ablație desfășurate s-a constatat că pentru modelarea unor structuri optime, inițializarea ponderilor nu trebuie să fie arbitrară, ci fundamentată pe necesitățile specifice ale funcțiilor de activare și ale arhitecturii selectate, contribuind la evitarea unor probleme, precum simetria inutilă între neuroni la începutul antrenamentului. În cadrul procesului de instruire a modelelor DCNN s-au utilizat inițializările ponderilor de tip *Xavier/Glorot* și *He*.

Inițializarea ponderilor de tip *Xavier/Glorot* propusă de către Xavier Glorot și Yoshua Bengio, este destinată special menținerii varianței activărilor și gradientilor pe măsură ce datele se propagă în rețea, înainte și înapoi, în timpul învățării. Utilizează o distribuție uniformă sau normală, scalată în funcție de dimensiunile straturilor anterioare și ulterioare ale rețelei, pentru a facilita o convergență mai rapidă și mai stabilă. Inițializarea *He*, dezvoltată de către Kaiming He și colegii săi, reprezintă o adaptare a inițializării *Xavier*, concepută pentru o funcționare mai bună cu funcții de activare *ReLU*. Utilizează o variantă a distribuției normale scalată cu factorul $\sqrt{\frac{2}{\text{dimensiunea stratului anterior}}}$, optimizând rețeaua pentru activările *ReLU* și prevenind problemele de gradient dispărut în straturile profunde ale rețelei [471, 472].

Autoencoderele Convoluționale sunt utilizate în diverse aplicații, cum ar fi reducerea dimensionalității pentru vizualizarea datelor, îndepărtarea zgomotului din imagini sau alte tipuri de date (eng., *denoising*), și, ca un pas preliminar pentru algoritmi mai complecși de învățare automată, ajutând la îmbunătățirea performanței acestora prin preprocesarea datelor. Blocurile Encoder și Decoder reprezintă componentele de bază ale unității CAE, conlucrând pentru învățarea unei reprezentări eficiente a datelor și pentru a permite reconstrucția sau generarea de noi date. Rolul Encoderului este de a captura caracteristicile esențiale ale datelor de intrare într-o formă mai compactă, Decoderul preluând reprezentarea comprimată și reconstruind datele originale din reprezentarea latentă. Codul latent sau reprezentarea comprimată a datelor de intrare reprezintă centrul nervos al unității CAE, unde datele sunt reprezentate într-o formă mult mai redusă.

Structura optimă și parametri tehnici ai unității CAE este evidențiată în Tabelul 4.6, incluzând un număr total de 32 de straturi conținând 8.963 de neuroni, 2.586.307 de parametri funcționali și un număr de 2.574.784 de conexiuni. Dimensiunea totală a structurii dezvoltate a fost de aproximativ 9,865978 Mb și evaluată la 0,252576 GFLOPS.

Tabelul 4.6 Structura unității de Autoencoder Convoluțional și parametri funcționali ai elementelor componente.

Index	Categorie	Denumire (Python)	Neuroni	Parametri	Conexiuni	Dimensiune (Mb)	Dimensiune (GFLOPS)
BLOCUL ENCODER							
1.	Strat de intrare	input_layer	0	0	0	0	0
2.	Strat convoluțional	conv2D	64	1.792	1.728	0,006836	0,003539
3.	Strat de activare	relu*	0	0	0	0	0
4.	Strat de normalizare	batch_normalization	0	256	0	0,000977	0
5.	Strat convoluțional	conv2D_1	64	36.928	36.864	0,140869	0,075497
6.	Strat de activare	relu	0	0	0	0	0
7.	Strat de normalizare	batch_normalization_1	0	256	0	0,000977	0
8.	Strat de eșantionare maximă	max_pooling2D	0	0	0	0	0
9.	Strat convoluțional	conv2D_2	128	73.856	73.728	0,281738	0,037749
10.	Strat de activare	relu	0	0	0	0	0

11.	Strat de normalizare	batch_normalization_2	0	512	0	0,001953	0	
12.	Strat convoluțional	conv2D_3	128	147.584	147.456	0,562988	0,075497	
13..	Strat de activare	relu	0	0	0	0	0	
14.	Strat de normalizare	batch_normalization_3	0	512	0	0,001953	0	
15.	Strat de eșantionare maximă	max_pooling2D_1	0	0	0	0	0	
16.	Strat de aplatizare	flatten	0	0	0	0	0	
17.	Strat complet conectat	dense	128	1.048.704	1.048.576	4,000488	0,002097	
18.	Strat de activare	relu	0	0	0	0	0	
BLOCUL DECODER								
19.	Strat complet conectat	dense_1	8.192	1.056.768	1.048.576	4,03125	0,002097	
20.	Strat de activare	relu	0	0	0	0	0	
21.	Strat de reconfigurare	reshape	0	0	0	0	0	
22.	Strat deconvoluțional	conv2D_transpose	128	147.584	147.456	0,562988	0,018874	
23.	Strat de activare	relu	0	0	0	0	0	
24.	Strat de normalizare	batch_normalization_4	0	512	0	0,001953	0	
25.	Strat deconvoluțional	conv2D_transpose_1	64	32.832	32.768	0,125244	0,016777	
26.	Strat de activare	relu	0	0	0	0	0	
27.	Strat de normalizare	batch_normalization_5	0	256	0	0,000977	0	
28.	Strat deconvoluțional	conv2D_transpose_2	64	36.928	36.864	0,140869	0,018874	
29.	Strat de activare	relu	0	0	0	0	0	
30.	Strat de normalizare	batch_normalization_6	0	256	0	0,000977	0	
31.	Strat deconvoluțional	conv2D_transpose_3	3	771	768	0,002941	0,001573	
32.	Strat de activare	sigmoid	0	0	0	0	0	
Total			32	8.963	2.586.307	2.574.784	9,865978	0,252576

* Potrivit convenției de raportare a datelor din protocolul experimental utilizat, pentru o abordare unitară, pe parcursul prezentei lucrări, funcțiile de activare (*ReLU* și *Sigmoid*) au fost apreciate ca straturi și contorizate, deși, în mod arbitrar, nu sunt evidențiate ca elemente independente în reprezentările grafice generate în mediul de programare *Python*.

Diagramele structurale simplificate, pe categorii și număr de straturi ale blocurilor Encoder - Decoder sunt următoarele:

- Blocul Encoder: Input (Imagini RGB 32 x 32) --> Straturi convoluționale (4) --> Activare (5) --> Straturi de normalizare (4)--> Straturi de eșantionare maximă (2) --> Strat de aplatizare (1) --> Strat complet conectat (1) --> Reprezentare Latentă (Tensor Plat).
- Blocul Decoder: Reprezentare Latentă (Tensor Plat) --> Strat complet conectat (1) --> Activare (5) --> Straturi de normalizare (3) --> Strat de reconfigurare (1) --> Straturi deconvoluționale (4) --> Output (Imagini reconstruite).

II. Instruirea, optimizarea și evaluarea unității CAE

Instruirea modelului CAE a implicat optimizarea parametrilor și ajustarea ponderilor pentru minimizarea diferenței dintre datele de intrare și ieșirile reconstruite. Procesul de antrenament a constat în mai multe etape, fiecare jucând un rol esențial în succesul final al modelului. Pentru facilitarea procesului de învățare, s-au preprocesat imaginile digitale ale bazei de date *CIFAR-10*, normalizând valorile pixelilor la intervalul [0, 1] și împărțind toate valorile la 255, valoarea maximă a unui pixel într-o imagine RGB. Pe parcursul antrenamentului, datele au fost împărțite între setul de antrenament și setul de validare. În timp ce setul de antrenament a fost utilizat pentru a învăța modelul, setul de validare a servit drept referință pentru evaluarea performanței modelului pe date care nu au fost folosite în timpul

învățării. Aceasta a ajutat la monitorizarea suprainstruirii (eng., *overfitting*), o problemă în care modelul învață foarte bine setul de antrenament, dar nu generalizează bine pe date noi.

S-au experimentat mai multe funcții de activare și mai mulți optimizatori, precum *ADAM*, *SGD* și *RMSProp*, cele mai optime valori fiind obținute prin utilizarea funcțiilor de activare de tip *ReLU* în straturile ascunse și de tip *Sigmoid* la vectorul de ieșire, prin aplicarea algoritmului de optimizare stocastică *ADAM*, la un număr de 25 de epoci (eng., *epochs*), mărimea lotului de date (eng., *batch size*) de 256 și evaluarea erorii medii pătratice (eng., *Mean Squared Error, MSE*) ca funcție de cost. Evaluarea modelului CAE a implicat analiza performanței acestuia în reconstrucția datelor de intrare, inclusiv analiza pierderii în timpul antrenamentului, compararea vizuală a imaginilor originale cu cele reconstruite și măsurarea erorii de reconstrucție utilizând *MSE* (vezi, Figura 4.5) [473].

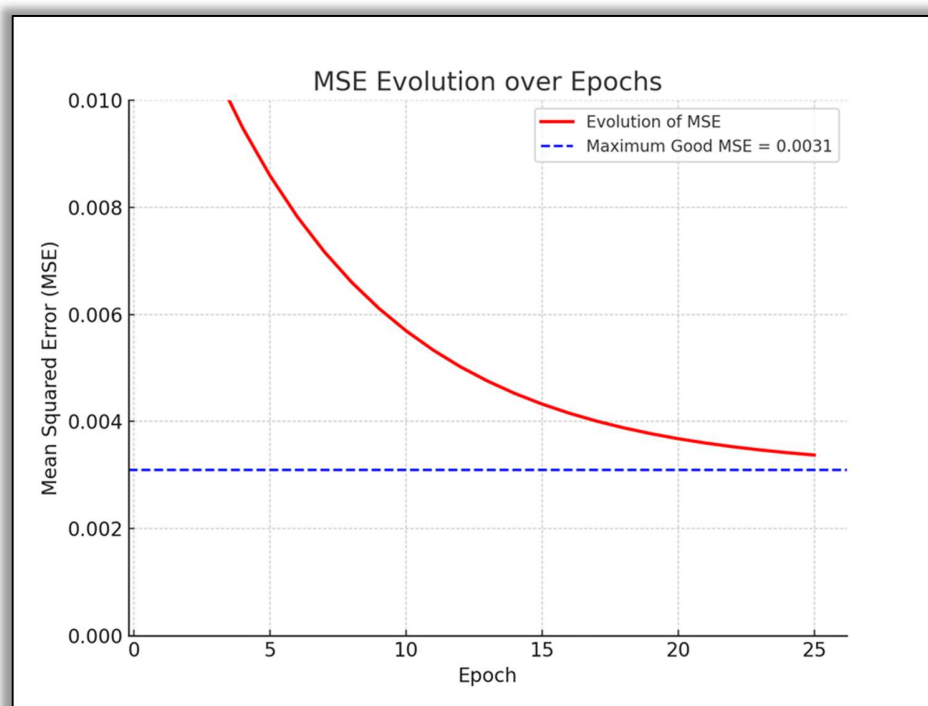


Figura 4.5 Analiza performanței de reconstrucție a imaginilor de către unitatea CAE utilizând Eroarea Medie Pătratică (*MSE*).

4.4.2 Modelul *matDETECT_FTIR* DCNN de clasificare bazat pe o unitate CAE

În cadrul celei de-a doua faze experimentale prezentate în această teză de doctorat, arhitectura preinstruită, optimizată și validată a unității CAE a fost integrată în mediul de programare *Wolfram Mathematica*. Prin experimente iterative și studii de ablație, structura unității CAE a fost adaptată, adăugându-se și un bloc nou de clasificare în trei clase. Modelul rezultat, denumit *matDETECT_FTIR DCNN*, a fost antrenat în regim supervizat, utilizându-se imagini digitale spectrale ATR-FTIR etichetate, fiecare instanță de antrenament fiind asociată cu o etichetă de ieșire corespunzătoare. Această abordare de instruire hibridă a permis modelului DCNN să învețe să coreleze caracteristicile de intrare cu cele trei clase de ieșire predefinite. Metodologia de antrenament, structurată pe mai multe etape, s-a dovedit esențială, mai ales în contextul seturilor de date spectrale ATR-FTIR extinse și dezechilibrate.

I. Arhitectura modelului *matDETECT_FTIR* DCNN

Structura acestei rețele neuronale a fost dezvoltată *ex novo*, implicând ajustări și optimizări ale mai multor hiperparametri în cadrul arhitecturilor experimentate. Aceste ajustări au inclus reglarea fină a elementelor, precum numărul de straturi convoluționale și complet conectate, selecția filtrelor, valorile de pas (eng., *stride*), zonele de *pooling* ori dimensiunile și configurarea unităților din straturile complet conectate. Determinarea acestor hiperparametri a fost realizată manual, printr-un proces de experimentare iterativă, având în vedere lipsa unui model matematic definitiv care să stabilească parametrii optimi pentru un astfel de set de date specific.

Structura integrată a modelului DCNN, ilustrată grafic în Figura 4.7 și evidențiată în Tabelul 4.7, include un total de 39 de straturi, 201.331 de neuroni, 17.446.598 de parametri (ponderi și *bias-uri*) și 56 de tablouri. Dimensiunea totală a modelului dezvoltat este de aproximativ 69,7864 Mb, cu o performanță estimată la 0,8974831 GFLOPS. Diagrama structurală simplificată, clasificată pe categorii și număr de straturi pentru blocurile Encoder – Decoder – Clasificator, este următoarea:

- Blocul Encoder: Input (Imagini *greyscale* 3x128x128) --> Straturi convoluționale (4) --> Straturi de activare (4) --> Straturi de normalizare (4) --> Straturi de eșantionare maximă (2) --> Strat de aplatizare (1) --> Strat complet conectat (1) --> Reprezentare Latentă (Tensor Plat).
- Blocul Decoder: Reprezentare Latentă (Tensor Plat) --> Strat de reconfigurare (1) --> Straturi de activare (2) --> Straturi de normalizare (2) --> Strat de redimensionare (1) --> Straturi deconvoluționale (2) --> Strat convoluțional (1).
- Blocul de Clasificare: Straturi convoluționale (4) --> Straturi de normalizare (4) --> Straturi de activare (4) --> Strat de eșantionare maximă (1) --> Strat de aplatizare (1) --> Straturi complet conectate (2) --> Output (3 clase).

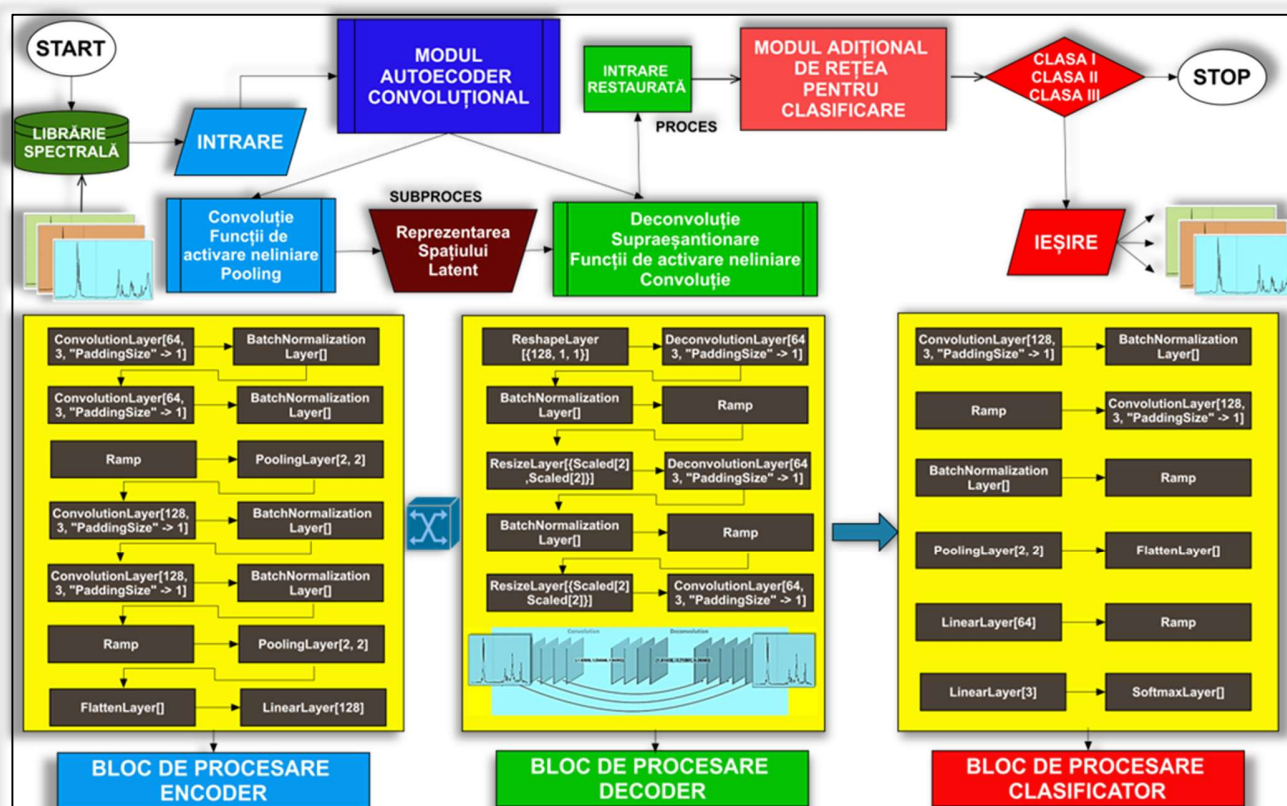


Figura 4.7 Structura integrată și cadrul de funcționare a modelului *matDETECT_FTIR* DCNN bazat pe o unitate de Autoencoder Convoluțional (CAE).

Tabelul 4.7 Structura, dimensiunea și hiperparametrii arhitecturii modelului *matDETECT_FTIR* DCNN.

Index	Categorie	Tip strat (Wolfram Mathematica)	Dimensiune (Tablou/Vector)	Hiperparametri
BLOCUL ENCODER				
1.	Strat de Intra	Input	Tablou[1x128x128]	0
2.	Strat Convoluțional	ConvolutionLayer	Tablou[64x128x128]	[64, 3, "PaddingSize" -> 1]
3.	Strat de Normalizare	BatchNormalizationLayer	Tablou[64x128x128]	0
4.	Strat de Activare	Ramp	Tablou[64x128x128]	0
5.	Strat Convoluțional	ConvolutionLayer	Tablou[64x128x128]	[64, 3, "PaddingSize" -> 1]
6.	Strat de Normalizare	BatchNormalizationLayer	Tablou[64x128x128]	0
7.	Strat de Activare	Ramp	Tablou[64x128x128]	0
8.	Strat de Eșantionare Maximă	PoolingLayer	Tablou[64x64x64]	[2, 2]
9.	Strat Convoluțional	ConvolutionLayer	Tablou[128x64x64]	[128, 3, "PaddingSize" -> 1]
10.	Strat de Normalizare	BatchNormalizationLayer	Tablou[128x64x64]	0
11.	Strat de Activare	Ramp	Tablou[128x64x64]	0
12.	Strat Convoluțional	ConvolutionLayer	Tablou[128x64x64]	[128, 3, "PaddingSize" -> 1]
13..	Strat de Normalizare	BatchNormalizationLayer	Tablou[128x64x64]	0
14.	Strat de Activare	Ramp	Tablou[128x64x64]	0
15.	Strat de Eșantionare maximă	PoolingLayer	Tablou[128x64x64]	[2, 2]
16.	Strat de Aplatizare	FlattenLayer	Vector[131072]	0
17.	Strat Complet Conectat	LinearLayer	Vector[128]	[128]
BLOCUL DECODER				
18.	Strat de Reconfigurare	ReshapeLayer	Tablou[128x1x1]	[[128, 1, 1]]
19.	Strat Deconvoluțional	DeconvolutionLayer	Tablou[128x1x1]	[128, 3, "PaddingSize" -> 1]
20.	Strat de Normalizare	BatchNormalizationLayer	Tablou[128x1x1]	0
21.	Strat de Activare	Ramp	Tablou[128x1x1]	0
22.	Strat de Redimensionare	ResizeLayer	Tablou[128x2x2]	[[Scaled[2], Scaled[2]]]
23.	Strat Deconvoluțional	DeconvolutionLayer	Tablou[64x2x2]	[64, 3, "PaddingSize" -> 1]
24.	Strat de Normalizare	BatchNormalizationLayer	Tablou[64x2x2]	0
25.	Strat de Activare	Ramp	Tablou[64x2x2]	0
26.	Strat de Redimensionare	ResizeLayer	Tablou[64x4x4]	[[Scaled[2], Scaled[2]]]
27.	Strat Convoluțional	ConvolutionLayer	Tablou[3x4x4]	[3, 1]
BLOCUL DE CLASIFICARE				
28.	Strat Convoluțional	ConvolutionLayer	Tablou[128x4x4]	[128, 3, "PaddingSize" -> 1]
29.	Strat de Normalizare	BatchNormalizationLayer	Tablou[128x4x4]	0
30.	Strat de Activare	Ramp	Tablou[128x4x4]	0
31.	Strat Convoluțional	ConvolutionLayer	Tablou[128x4x4]	[128, 3, "PaddingSize" -> 1]
32.	Strat de Normalizare	BatchNormalizationLayer	Tablou[128x4x4]	0
33.	Strat de Activare	Ramp	Tablou[128x4x4]	0
34.	Strat de Eșantionare Maximă	PoolingLayer	Tablou[128x2x2]	[2, 2]
35.	Strat de Aplatizare	FlattenLayer	Vector[512]	0
36.	Strat Complet Conectat	LinearLayer	Vector[64]	[64]
37.	Strat de Activare	Ramp	Vector[64]	0
38.	Strat Complet Conectat	LinearLayer	Vector[3]	[3]
39.	Strat de Activare	SoftmaxLayer	Vector[3]	0

În contextul modelelor DCNN dezvoltate, tablourile (eng., *arrays*) se referă la structuri de date care stochează parametrii modelului, cum ar fi ponderile și *bias-urile* pentru fiecare strat, precum și alte statistici legate de normalizarea loturilor (eng., *Batch Normalization*), cum ar fi media mobilă (eng.,

Moving Mean) și varianța mobilă (eng., *Moving Variance*). Aceste elemente reprezintă parametri și statistici esențiale asociate cu straturile modelelor de Rețele Neuronale Convoluționale Profunde, fiecare dintre acești termeni având un rol important în funcționarea și antrenarea acestora. Astfel, fiecare dintre elementele evidențiate în Tabelul 4.8 este esențial pentru funcționarea corectă a modelului DCNN dezvoltat, contribuind la explicitarea arhitecturii, permițând justificarea deciziilor de design și identificarea posibilelor puncte de îmbunătățire.

Tabelul 4.8 Analiza parametrilor de învățare și normalizare ai structurii modelului *matDETECT_FTIR* DCNN: Distribuția Ponderilor, *Bias-urilor*, Mediei Mobile, Varianței Mobile și a Scalării.

Straturi		Parametri de normalizare			Parametri de învățare	
Index	Poziție secvențială	Medie Mobilă	Varianță Mobilă	Scalare	Ponderi	Bias-uri
1.	1	0	0	0	1.728	64
2.	11	0	0	0	147.456	128
3.	12	128	128	128	0	128
4.	16	0	0	0	16.777.216	128
5.	18	0	0	0	147.456	128
6.	19	128	128	128	0	128
7.	2	64	64	64	0	64
8.	22	0	0	0	73.728	64
9.	4	0	0	0	36.864	64
10.	5	64	64	64	0	64
11.	30	0	0	0	147.456	128
12.	31	128	128	128	0	128
13.	35	0	0	0	128	64
14.	37	0	0	0	192	3
15.	27	0	0	0	3.456	128
16.	28	128	128	128	0	128
17.	23	64	64	64	0	64
18.	26	0	0	0	192	3
19.	8	0	0	0	73.728	128
20.	9	128	128	128	0	128

Analiza valorilor maxime și minime din fiecare categorie de parametri evidențiați indică modul în care complexitatea și echilibrul între straturi influențează performanța generală a modelului DCNN. Straturile cu valori mari de parametri sunt esențiale pentru învățarea reprezentărilor complexe, în timp ce valorile mai mici ajută la stabilizarea rețelei și prevenirea problemelor de antrenament. Gestionarea acestor parametri și aplicarea unor tehnici adecvate de regularizare și optimizare au fost critice pentru obținerea unei performanțe optime a modelului.

Numărul mare de parametri indică o rețea profundă, capabilă să învețe reprezentări detaliate și să efectueze clasificări precise. Această complexitate vine, totuși, cu un cost ridicat în ceea ce privește resursele computaționale necesare. Un număr foarte mare de parametri poate duce la supraantrenare, mai ales dacă setul de date de antrenament este limitat. Este esențial să se aplice tehnici de regularizare, cum ar fi cele de *dropout* sau penalizări *L2*, pentru a preveni acest fenomen. Straturile cu ponderi mari sunt critice pentru performanța modelului, contribuind la capacitatea sa de a învăța din date complexe. Distribuția *bias-urilor* reflectă importanța și rolul fiecărui strat în rețea. Straturile cu *bias-uri* mari sunt critice pentru performanța generală, în timp ce straturile cu *bias-uri* mici sunt mai specializate și contribuie la rafinarea predicțiilor finale. Ponderile mici sunt utile pentru sarcini specializate și contribuie la reducerea complexității generale a rețelei. Parametrii de normalizare cu valori mari sunt esențiali pentru stabilitatea activărilor în straturi complexe, asigurând o învățare

eficientă și prevenind problemele de stabilitate. Parametrii mai mici sunt utilizați în straturi mai simple, unde stabilitatea este mai ușor de menținut.

Graful computațional constituie reprezentarea matematică utilizată pentru a descrie calculele efectuate într-un model de rețea neuronală sau într-un algoritm de învățare automată. În contextul modelelor DCNN dezvoltate, graful computațional reprezintă toate operațiunile matematice, funcțiile și straturile prin care datele trec de la intrare până la ieșire, incluzând și fluxul de date între acestea. În graful computațional, fiecare nod reprezintă o operație (adunare, înmulțire, convoluție, activare, etc.) sau un tensor (o structură de date) pe care modelul îl folosește. Arcele sau muchiile care leagă nodurile indică fluxul de date sau rezultatul unei operațiuni care este transmis ca *input* la o altă operațiune, descriind dependențele dintre diferitele operații ale modelului. Graful urmărește fluxul de date de la intrare la ieșire, ilustrând cum sunt combinate și manipulate datele pentru a ajunge la o predicție finală. Fiecare operație este executată în ordinea specificată de graful computațional.

În contextul învățării automate, graful computațional este esențial pentru calculul derivatei parțiale a funcției de pierdere în raport cu fiecare parametru al modelului, proces cunoscut sub numele de retropropagare a erorii (eng., *backpropagation*). Graful păstrează traseul operațiunilor, facilitând calculul eficient al gradientilor. Acest grafic oferă o vizualizare clară a arhitecturii rețelei neuronale, permițând cercetătorilor să înțeleagă structura și modul în care datele sunt prelucrate în cadrul modelului DCNN. Reprezentarea vizuală a grafului este esențială pentru diagnosticarea și optimizarea rețelelor neuronale, permițând o identificare facilă a complexităților și dependențelor dintre straturi, fiind utilă în special în fazele de dezvoltare și optimizare a modelelor, unde înțelegerea clară a fluxului de date și a interacțiunilor dintre componente este importantă pentru ajustarea hiperparametrilor și îmbunătățirea performanței generale a rețelei neuronale. Figura 4.8 ilustrează graful computațional (fluxul de calcul) al modelului *matDETECT_FTIR* DCNN, generat prin intermediul algoritmului *MXNetNodeGraphPlot* implementat în mediul de programare *Wolfram Mathematica*.

Această reprezentare grafică conținând 95 de elemente (tensori și noduri) ilustrează fluxul de date și interacțiunile dintre diferitele straturi componente ale rețelei neuronale dezvoltate. În analiza grafului computațional al modelului DCNN, fiecare nod indexat, etichetat și conectat reprezintă un strat sau o operațiune specifică din cadrul rețelei neuronale, cum ar fi: convoluțiile (*Convolution*, etichetate prin litera C), activările (*relu*, *softmax*, etichetate prin literele r și s), normalizările (*BatchNorm*, etichetate prin acronimul BN), *pooling-ul* (*Pooling*, etichetat prin litera P), sau operațiuni mai complexe, precum reconfigurările (*Reshape*, etichetate prin litera R), aplatizările (*Flatten*, etichetate prin litera F), redimensionările (reprezentate în legendă prin termenul *_contrib_BilinearResize2d*, și pe graf prin acronimul cBRD), operațiunilor de decizie sau straturile de clasificare (*FullyConnected*, etichetate prin acronimul FC) ori deconvoluțiile (*Deconvolution*, etichetate prin litera D). Elementul reprezentat pe graf sub eticheta de *_copy* reflectă operațiunile de copiere a datelor între diferite straturi sau ramuri ale rețelei neuronale, necesare în fluxurile paralele de date. Fluxul de date este indicat prin arcele (ilustrate prin simbolul ---->----) care conectează intrările tensorilor și nodurile între ele, simbolizând fluxul de date între aceste elemente și noduri sau indicând modul în care ieșirile unui strat devin intrările unui alt strat în rețea.

Tensorii (eng., *Tensors*) reprezintă structurile multidimensionale de date utilizate ca intrări în straturi. Modelul DCNN a fost proiectat să proceseze simultan aceeași imagine prin diferite sub-rețele sau canale paralele. În acest context specific, straturile convoluționale, deconvoluționale și complet conectate primesc câte trei tensori, straturile de normalizare primesc câte patru, iar celelalte categorii de noduri nu primesc niciunul. Pentru o evidențiere corectă a fluxului de date paralelizat, trebuie să se distingă între primul strat convoluțional și straturile convoluționale, deconvoluționale și complet conectate ulterioare.

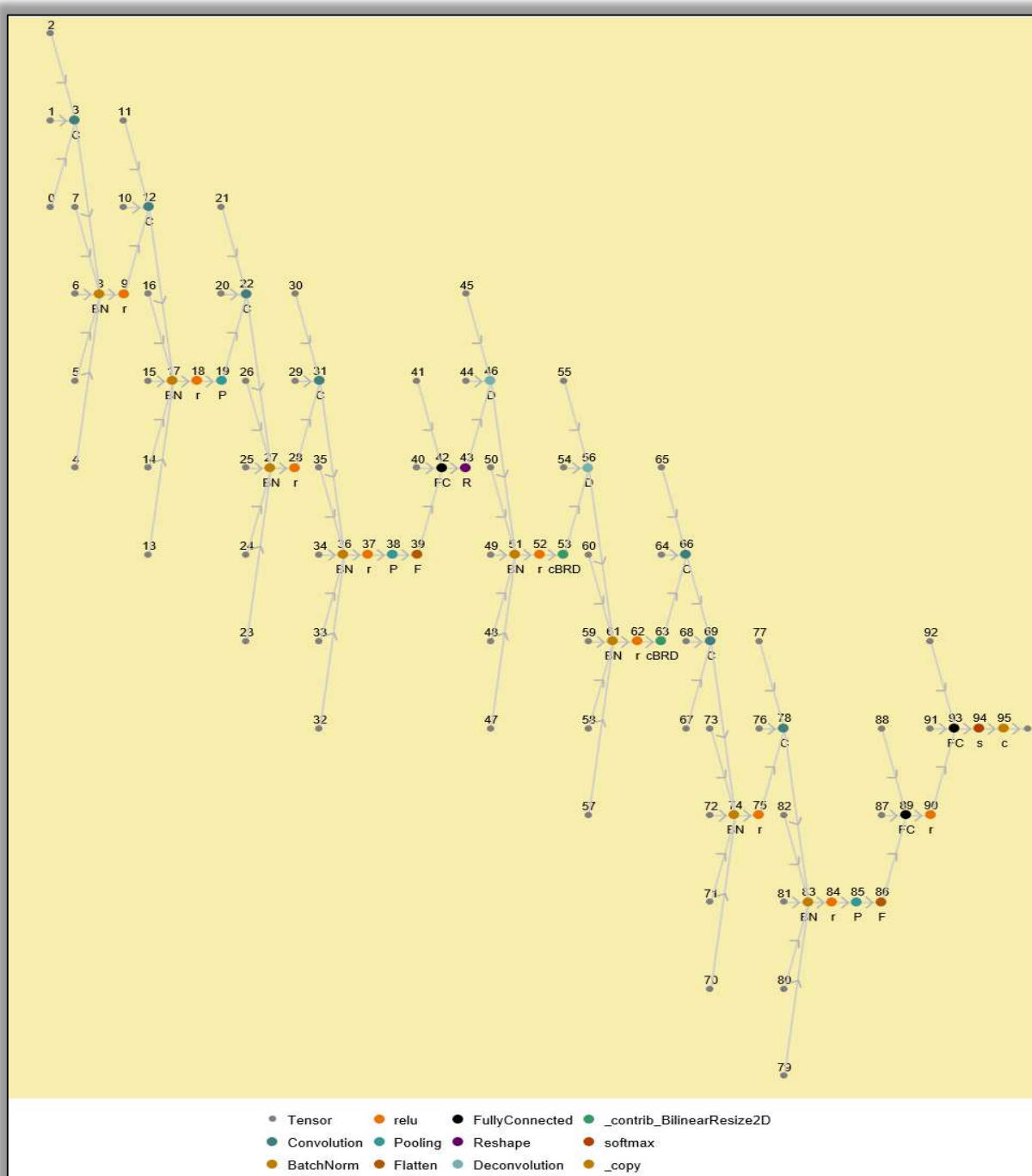


Figura 4.8 Diagrama topologică a structurii și ilustrarea interconexiunilor tensoriale în modelul *matDETECT_FTIR DCNN*.

Fluxul de date din graful computațional descris reflectă o arhitectură DCNN modulară bine structurată și eficientă, capabilă să gestioneze imagini alb-negru (eng., *greyscale*) de 128x128 pixeli. Împărțirea în trei fluxuri paralele la intrare și complexitatea straturilor de convoluție și deconvoluție asigură un proces robust de extracție și reconstrucție a caracteristicilor, cu scopul final de a clasifica imaginile în mod corect în funcție de cele trei clase predefinite. Performanța modelului depinde de

finețea ajustării hiperparametrilor și de optimizarea fiecărei componente individuale a fluxului de date, de la tensori la straturi complet conectate și până la outputul final.

În concluzie, documentarea și analiza detaliată a structurii, dimensiunii, a parametrilor de învățare și normalizare, precum și a hiperparametrilor arhitecturii modelului *matDETECT_FTIR DCNN* subliniază complexitatea și eficiența acestui sistem de Inteligență Artificială în extragerea și procesarea informațiilor din imaginile digitale spectrale. Fiecare strat și operațiune contribuie în mod esențial la performanța generală a modelului, iar structura bine organizată, ilustrată în graful computațional, reflectă un design atent, optimizat pentru a atinge un echilibru între acuratețe și eficiență computațională.

II. Strategia de antrenament, optimizare și evaluare a modelului *matDETECT_FTIR DCNN*

❖ Inițializarea ponderilor

Pentru inițializarea ponderilor în straturile convoluționale și complet conectate ale modelului DCNN, au fost utilizate inițializări de tip *He*. Acestea sunt metode de inițializare a ponderilor, dezvoltate pentru a asigura o propagare adecvată a semnalului prin rețea, în special atunci când se utilizează funcții de activare de tip *ReLU* (eng., *Rectified Linear Unit*). Inițializarea de tip *He*, cunoscută și sub numele de inițializarea *He* normală sau *He* uniformă, a fost propusă pentru a rezolva problemele legate de dispariția și explozia gradientilor în rețele neuronale adânci. Aceste probleme apar în timpul antrenării rețelelor neuronale profunde, atunci când gradientul devine fie prea mic (dispare), fie prea mare (explodează), ceea ce face dificilă optimizarea rețelei. Această tehnică menține varianța activărilor constantă de la un strat la altul, în special în rețelele adânci care utilizează funcția de activare *ReLU*. Este esențială pentru menținerea unui flux adecvat de informații prin rețea, permițând modelului să învețe mai eficient și să evite problemele de dispariție sau explozie a gradientilor.

În arhitectura modelului, descrisă anterior, de exemplu, stratul convoluțional 1, *ConvolutionLayer [64, 3, "PaddingSize" -> 1]* și straturile complet conectate 16, 35, *LinearLayer[128]* și *LinearLayer[3]* au fost inițializate prin metoda *He*. Această inițializare a presupus generarea ponderilor inițiale dintr-o distribuție normală (sau uniformă) cu o varianță scalată, astfel încât valorile să fie mai mari decât cele produse de inițializarea standard Gaussiană, dar controlate pentru a preveni creșteri excesive ale activărilor. După fiecare strat convoluțional și complet conectat, a fost aplicată o funcție de activare *ReLU* (în *Wolfram Mathematica*, *Ramp*), nelineară ajutând la introducerea de non-liniarități în rețea și la învățarea caracteristicilor complexe din datele de intrare. Utilizarea inițializării *He* a permis ca gradientul să fie mai bine distribuit în timpul retropropagării (eng., *backpropagation*), ceea ce a condus la o convergență mai rapidă și mai stabilă a modelului în timpul antrenamentului.

❖ Preprocesarea spectrală și procesarea digitală a imaginilor

Tehnicile de preprocesare spectrală au constituit factori importanți în asigurarea integrității și calității datelor analizate de către modelul DCNN dezvoltat, implementarea corectă a acestor metode optimizând performanța sistemului prin îmbunătățirea capacității de interpretare și predicționare a imaginilor spectrale. Aplicațiile *ProcessIR* implementate în pachetul software *KnowItAll Informatics System 2023 Analytical Edition* au permis procesarea individuală a spectrelor pentru a îmbunătăți aspectul acestora în vederea corecției, analizei și comparării. S-au utilizat diverse metode de procesare a spectrelor, cum ar fi: corecția ATR, corecția liniilor plate, normalizarea, trunchierea/completarea, derivata, corecția de bază, netezirea, metoda *Kubelka-Munk*, adăugarea/scăderea spectrală, spectrul mediu, identificarea și calcularea ariilor de vârfuri. Dintre acestea, cele mai importante metode au fost :

- Normalizarea (eng., *Normalization*):
 - Normalizarea Min-Max (eng., *Min-Max Normalization*): S-au ajustat spectrele pentru a fi redimensionate într-un interval specific, între 0 și 1.

- Standardizarea Z-Score (eng. *Z-Score Standardization*): S-au scalat spectrele pentru a avea media 0 și deviația standard 1.
- Corecția *Attenuated Total Reflectance* (eng., *ATR Correction*): S-au corectat adâncimile de penetrare (eng., *Penetration Depth Correction*), ajustându-se intensitățile reflectate în spectre pentru corecția efectelor de adâncime variabilă a penetrației radiației infraroșii.
- Netezirea (eng., *Smoothing*):
 - Filtrul *Savitzky-Golay* (eng., *Savitzky-Golay Filter*): S-a aplicat un polinom de interpolare pentru netezirea spectrelor ATR, păstrându-se acuratețea vârfurilor de absorbție.
- Filtrul Median (eng., *Median Filter*): S-a redus zgomotul aplicându-se medieri, care au stabilizat variațiile abrupte ale semnalului.
- Derivarea (eng., *Spectral Derivatization*): S-au aplicat derivatele de ordinul întâi și al doilea (eng., *First and Second Order Derivative*), amplificându-se diferențele subtile dintre caracteristicile spectrale și îmbunătățindu-se detectabilitatea detaliilor fine.
- Alinierea (eng., *Spectral Alignment*): S-au efectuat alinieri bazate pe caracteristici (eng., *Feature-Based Alignment*), corectându-se decalajele dintre spectre prin identificarea și ajustarea punctelor de referință comune.

În Figura 4.10 este prezentat fluxul de preprocesare spectrală evidențiindu-se trei dintre principalele tehnici utilizate: normalizarea, corecția ATR și netezirea.

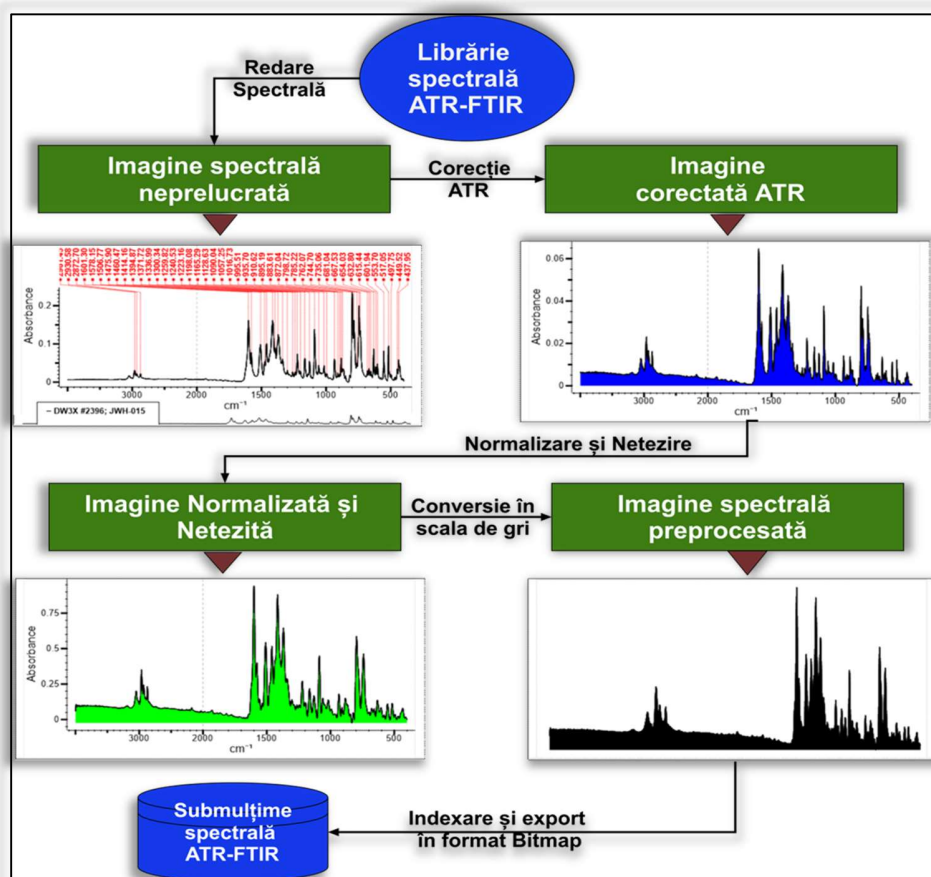


Figura 4.10 Diagrama fluxului de preprocesare spectrală: ilustrarea tehnicilor de normalizare, corecție ATR și netezire.

În procesul de pregătire a seturilor de date pentru antrenarea modelului DCNN, alături de tehnicile de preprocesare spectrală au fost utilizate și o serie de tehnici de procesare a imaginilor digitale. Aceste tehnici au îmbunătățit calitatea și relevanța imaginilor, facilitând învățarea prin expunerea la date variate și relevante. În cadrul acestei proceduri, au fost utilizate o serie de metode care au optimizat performanța modelului DCNN și au prevenit suprainstruirea, cum ar fi:

- Filtrarea imaginilor (eng., *Image Filtering*): esențială pentru extragerea și evidențierea caracteristicilor relevante din imagini.
- Filtrul de detecție a conturilor (eng., *Edge Detection Filter*): au fost aplicate filtre precum *Sobel* sau *Canny* pentru accentuarea marginilor, facilitând detectarea formelor și obiectelor, aspecte critice pentru sarcinile de recunoaștere ale modelului.
- Filtrul *Pasa-Jos* (eng., *Low-pass Filter, Blur*): au fost estompate detaliile fine prin aplicarea unor filtre Gaussiene sau mediane, reducând zgomotul și îmbunătățind uniformitatea regiunilor din imagini.
- Conversia în scala de gri (eng., *Greyscale Conversion*): s-a efectuat conversia imaginilor în tonuri de gri pentru reducerea complexității computationale, contribuind, astfel, la simplificarea datelor și reducerea dimensiunilor acestora fără a compromite informațiile structurale critice.
- Egalizarea histogramei (eng. *Histogram Equalization*): s-au ajustat distribuțiile pixelilor pentru îmbunătățirea contrastului global, asigurând o mai bună distincție între diverse regiuni ale imaginilor și facilitând identificarea detaliilor critice în contextul învățării automate.
- Transformări geometrice (eng., *Geometric Transformations*):
 - Rotire și Scalare (eng., *Rotation and Scaling*): s-au modificat orientarea și dimensiunilor imaginilor, antrenând sistemul să recunoască obiectele în diverse poziții și dimensiuni și sporind, astfel, generalizarea modelului.
 - Decuparea (eng., *Cropping*): Eliminarea părților nerelevante din imagine permite concentrarea analizei pe zonele de interes, ceea ce este deosebit de util pentru focalizarea pe detalii esențiale.
- Augmentarea imaginilor (eng., *Image Augmentation*): au fost definite, implementate și aplicate un total de 108 tehnici de augmentare pentru generarea de noi instanțe în vederea compensării dezechilibrului din setul de date extins utilizat.
- Tehnici avansate de netezire și filtrare (eng., *Advanced Smoothing and Filtering Techniques*):
 - Filtrul Bilateral (eng., *Bilateral Filter*): filtrul combină un filtru Gaussian cu un filtru de medie pentru a păstra marginile în timp ce reduce zgomotul, ceea ce a permis menținerea clarității conturilor esențiale.
 - Filtrul *Non-local Means* (eng., *Non-local Means Filter*): s-au comparat toate *patch-urile* (segmentele) din imagine pentru a realiza o netezire care păstrează textura și detaliile importante, oferind astfel o imagine clară și detaliată.
- Utilizarea *patch-urilor* (eng., *Patch-based Processing*): s-a utilizat metoda divizării în segmente (eng., *Patch-based Division*) constând în împărțirea imaginilor în regiuni mai mici, permițând modelului să se concentreze pe detalii specifice, facilitând, astfel, procesarea eficientă a imaginilor de mari dimensiuni (128x128) și îmbunătățind acuratețea detectării.

În contextul utilizării unui set de date dezechilibrat, metodele de augmentare a imaginilor au reprezentat o abordare esențială pentru creșterea diversității și echilibrarea claselor deficitare, în acest sens, fiind selectate, adaptate și implementate în mediul *Wolfram Mathematica* un număr de aproximativ 108 tehnici de augmentare care au fost aplicate aleatoriu, în mod virtual, în timpul antrenamentului modelului, fără a stoca fizic imaginile augmentate. Datele au fost augmentate „din zbor” (eng., *on-the-fly*) în timpul fiecărei epoci de antrenament, printr-o metodă de tip *pipeline de date*

dinamice, imaginile fiind augmentate în mod aleatoriu la fiecare trecere prin setul de date, în timpul fiecărei epoci de antrenament. În loc să fie stocate, aceste imagini augmentate au fost create și utilizate imediat în timpul antrenamentului și apoi eliminate.

Abordarea de tip *pipeline de date dinamice* a presupus crearea și implementarea unei funcții ipotetice de tip *DynamicAugmentedData* care creează dinamic, în timpul procesului de antrenament, augmentări, lot cu lot și a unei funcții de tip *applyAugmentationBatch* care a aplicat aceste augmentări fără a stoca instanțele rezultate, ci doar utilizându-le aleatoriu în trecerea curentă prin rețea. În Figura 4.11 sunt prezentate exemplificativ câteva tipuri de modificări ale unei imagini spectrale prin augmentare virtuală care au stat la baza generării de noi instanțe în procesul de instruire, lista completă a tehnicilor de augmentare a imaginilor utilizate, codurile funcțiilor implementate și modelele de instanțe generate fiind inclusă, din motive de concizie a lucrării, în arhiva online Supporting Information a proiectului științific, putând fi consultată la cerere.

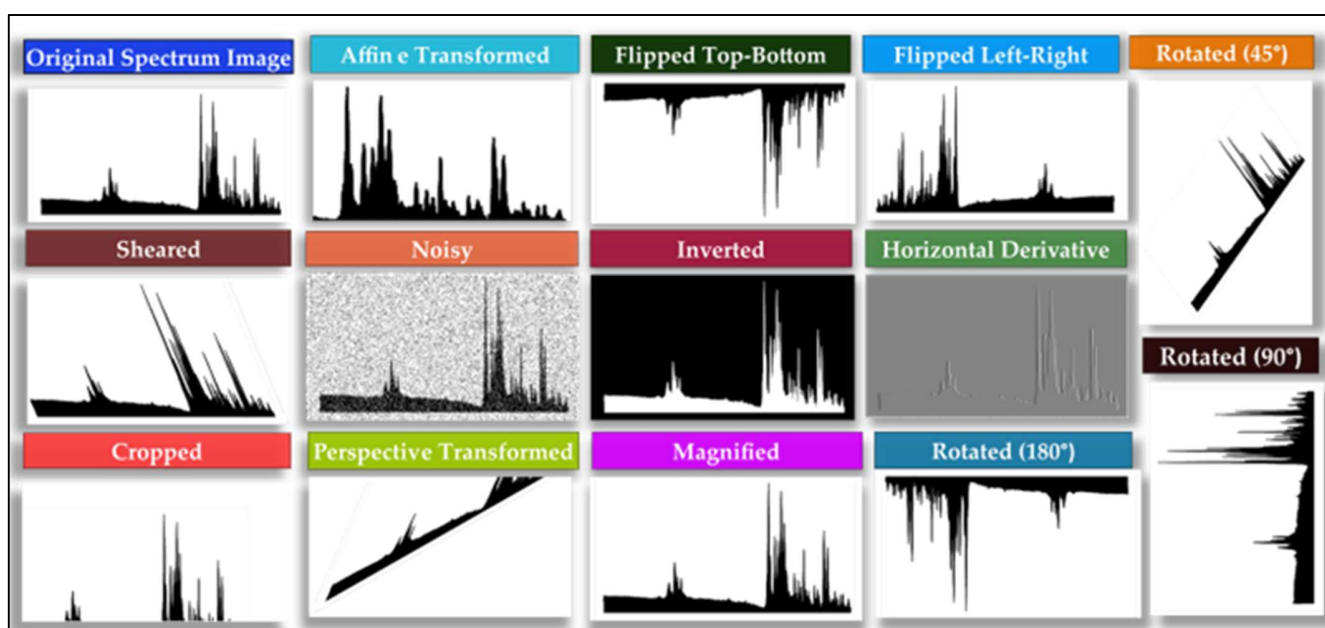


Figura 4.11 Evidențierea unor strategii de augmentare a imaginilor utilizate în procesul de instruire și optimizare a modelelor DCNN dezvoltate, incluzând: Transformări Afine, Inversări Sus-Jos și Stânga-Dreapta, Rotații (45°, 90°, 180°), Decupare, Derivativă Orizontală, Transformări de Perspectivă, Mărire, Filtrare Zgomot și Inversie.

❖ Indexarea și codificarea seturilor de date

S-au efectuat operațiuni de indexare și codificare ale seturilor de date de intrare (eng., *input*) corespunzătoare substanțelor de abuz de interes, potrivit următoarelor configurații:

- Fișierele spectrale (.jdx) preprocesate și imaginile digitale spectrale (.bmp) procesate corespunzătoare cannabinoidelor sintetice JWH primesc codificarea „PY_CSJ”, fiind indexate de la „PY_CSJ_000001” la „PY_CSJ_000125” în Clasa 1 („JWH”).
- Fișierele spectrale (.jdx) preprocesate și imaginile digitale spectrale (.bmp) procesate corespunzătoare cannabinoidelor sintetice non-JWH primesc codificarea „PY_CSNJ”, fiind indexate de la „PY_CSNJ_000001” la „PY_CSNJ_000250” în Clasa 2 („Cannabinoids_non-JWH” sau non_JWH).
- Fișierele spectrale (.jdx) preprocesate și imaginile digitale spectrale (.bmp) procesate corespunzătoare altor substanțe de interes criminalistic altele decât cannabinoidele au

primit codul „PY_DSNC”, fiind indexate de la „PY_DSNC_000001” la „PY_DSNC_100050.sdf” în Clasa 3 („Others”).

❖ Strategii de antrenament și optimizare

1. Definierea funcției de cost sau pierdere (eng., *Loss Function*)

Strategia de instruire (eng. *Training Strategy*) aplicată în dezvoltarea modelului *matDETECT_FTIR* DCNN a vizat minimizarea pierderilor (eng., *Minimum Loss*) prin ajustarea eficientă a parametrilor rețelei. Indicele de pierdere (eng., *Loss index*) a avut o importanță deosebită în acest proces, fiind compus din două elemente fundamentale: un termen de eroare (eng., *Error Term*) și un termen de regularizare (eng. *Regularization Term*).

Termenul de eroare a evaluat discrepanța dintre predicții și valorile reale, furnizând o măsură directă a performanței modelului. În funcție de natura problemei și de tipul datelor, în cazul utilizării celor două seturi de date limitat și echilibrat și extins și dezechilibrat acesta a adoptat două forme: Eroarea entropiei încrucișate și funcția de pierdere focală.

Pentru setul de date limitat și echilibrat s-a utilizat eroarea entropiei încrucișate (eng., *Cross Entropy Error, CEE*) care reprezintă o metrică fundamentală în domeniul învățării automate, fiind larg utilizată pentru evaluarea performanței modelelor de clasificare [474]. Această măsură a cuantificat diferența dintre două distribuții de probabilitate: distribuția probabilităților prezise de model și distribuția probabilităților reale, asociate claselor din setul de date. În contextul învățării automate, entropia încrucișată compară eficient cât de bine predicțiile modelului corespund cu adevăratele etichete ale datelor. Valori mai mici ale entropiei încrucișate au indicat o concordanță mai mare între distribuțiile probabilităților prezise și cele reale, reflectând o performanță mai bună a modelelor.

În cazul setului de date extins și dezechilibrat s-a utilizat funcția de pierdere focală (eng., *Focal Loss*) [475]. Funcția de pierdere focală, inițial dezvoltată ca o soluție la problema dezechilibrului semnificativ între clase, observată frecvent în domeniul detectării obiectelor s-a dovedit a fi deosebit de eficientă în scenariul multi-clasă, unde diferențele în frecvența apariției claselor ar fi putut distorsiona grav performanța modelelor DCNN. Principiul de bază al pierderii focale a fost de a ajusta contribuția fiecărei instanțe sau exemplu la eroarea totală a modelelor, punând un accent mai mare pe acele instanțe greșit clasificate și diminuând impactul exemplilor pentru care modelele prezic corect clasificarea. Această strategie a împiedicat predominanța instanțelor ușor de clasificat în procesul de învățare și a asigurat o atenție adecvată acordată exemplilor dificile, care au fost esențiale pentru îmbunătățirea acurateței sistemelor dezvoltate. Astfel, funcția de pierdere focală a contribuit la echilibrarea procesului de antrenament, facilitând dezvoltarea robustă a modelelor DCNN, fiind capabile să performeze eficient chiar și în condiții de distribuție inegală majoră a claselor. Aceasta abordare nu numai că a optimizat performanța, dar a sporit și capacitatea modelelor de a generaliza în situații complexe de clasificare.

Termenii de regularizare au contribuit la controlul complexității modelelor DCNN, prevenind fenomenul de suprainstruire (eng., *overfitting*) și au îmbunătățit capacitatea de generalizare a acestora. S-a utilizat doar regularizările de tip *L2* (algoritmii de tip *L1* penalizează valorile mari ale ponderilor rețelei promovând sparsitatea, mai multe ponderi fiind zero, nefiind cazul în contextul de față), care au restrâns creșterea arbitrară a ponderilor și au menținând simplitatea modelelor, acestea fiind, astfel, mai puțin predispuse la ajustarea excesivă pe datele de antrenament.

2. Configurarea algoritmilor de optimizare

Antrenarea modelelor DCNN a implicat selecția unor algoritmi de optimizare eficienți, esențiali pentru actualizarea parametrilor modelelor în vederea minimizării funcției de cost. Condiția necesară pentru ca rețeaua neuronală să atingă un minim al funcției de pierdere presupune ca gradientul acesteia să fie zero. Totuși, funcția de pierdere este, de regulă, o funcție neliniară a parametrilor, ceea ce face imposibilă identificarea exactă a unui algoritm de optimizare capabil să determine toate minimele globale. În consecință, optimizarea se realizează printr-o căutare iterativă în spațiul parametrilor, care constă într-o serie de pași, denumiți epoci (eng., *Epochs*). La fiecare epocă, pierderea este redusă prin

ajustarea parametrilor rețelei neuronale, iar modificarea parametrilor între două epoci consecutive este cunoscută sub denumirea de increment de parametri.

În procesul de antrenare a modelelor DCNN dezvoltate, s-a pornit de la un vector de parametri inițial (selectat aleatoriu), după care s-a generat o secvență de vectori de parametri care au avut rolul de a reduce indicele de pierdere la fiecare iterație a algoritmului de optimizare. Algoritmul s-a oprit atunci când oricare dintre următoarele condiții a fost îndeplinită:

- Îmbunătățirea pierderii între două epoci consecutive a fost sub un prag prestabilit ($\approx 0,01$).
- Pierderea a atins o valoare țintă minimizată ($\approx 0,1$).
- S-a atins numărul maxim de epoci prevăzut (30 sau 50).
- Timpul alocat pentru calcul a fost depășit (≥ 4 ore).
- Eroarea pe subsetul de validare a crescut pe parcursul mai multor epoci consecutive (dacă pierderea de validare ajunge la 1.0 sau mai mare, reprezintă un semnal că modelul se supraspecializează pe datele de antrenament).

Această abordare a asigurat că procesul de antrenare a fost eficient și convergent, contribuind, astfel, la performanța finală a modelelor DCNN. Pentru instruirea modelelor DCNN propuse în prezenta teză de doctorat s-au utilizat iterativ următorii algoritmi de optimizare: ADAM, RMSProp, SGD, SignSGD.

3. Optimizarea hiperparametrilor

Fine-Tuning-ul hiperparametrilor a reprezentat un proces important în antrenarea modelelor DCNN, având scopul de a optimiza performanța acestora prin ajustarea atentă a unor parametri care nu sunt învățați direct din date, ci sunt setați înainte de antrenare. Acești parametri au inclus:

- Rata de învățare (eng., *Learning Rate*), reprezentând un hiperparametru care controlează dimensiunea pașilor pe care algoritmul de optimizare îi face în timpul ajustării ponderilor modelului. O rată de învățare prea mare poate duce la o convergență instabilă, unde modelul sare peste minimele funcției de cost, în timp ce o rată prea mică poate face ca antrenarea să fie foarte lentă, rămânând blocată în minime locale. În cazul acestui model DCNN, pentru ambele seturi de date, ratele de învățare optime au fost mai mici sau egale cu 0,001.
- Numărul de epoci (eng., *Number of Epochs*), care s-a referit la o trecere completă prin setul de date de antrenament. Numărul de epoci influențează direct timpul de antrenare și performanța modelelor antrenate. Un număr prea mic de epoci conduce la subinstruire (eng., *underfitting*), unde modelul nu învață suficient din date, în timp ce un număr prea mare duce la suprainstruire (eng., *overfitting*), unde modelul învață prea bine caracteristicile setului de date de antrenament, dar performează slab pe date noi. În cazul modelului *matDETECT_FTIR* DCNN, numărul optim experimentat a fost de 50 de epoci, pentru ambele seturi de date.
- Dimensiunea lotului de date (eng., *Batch Size*), definind numărul de eșantioane care sunt propagate prin rețea înainte de a actualiza parametrii. Dimensiuni mici ale *batch-ului* conduc la o estimare mai zgomotoasă a gradientului, dar permit antrenarea pe sisteme cu memorie limitată, cum ar fi GPU-urile de capacitate redusă. Pe de altă parte, dimensiuni mari ale lotului de date asigură o estimare mai precisă a gradientului, dar necesită resurse computaționale mai mari. Pentru modelul prezentat în această subsecțiune, dimensiunile optime ale loturilor de date au fost de 64, pentru ambele seturi de date.
- Rata de abandon (eng., *Dropout Rate*) constituie o tehnică de regularizare utilizată pentru a preveni *overfitting-ul*, în care, la fiecare pas de antrenare, un set aleatoriu de neuroni este „inactivat” (deconectat temporar) în timpul propagării înainte (eng., *forward pass*). *Dropout rate* se referă la proporția de neuroni care sunt dezactivați. Pentru straturile de convoluție, unde este important să se păstreze mai multe conexiuni pentru a nu pierde informații esențiale, s-au utilizate rate de abandon cuprinse între 0,2 - 0,3 iar pentru straturile dense sau complet conectate, în straturile finale ale rețelei, acestea au fost cuprinse între 0,4 - 0,5.

4. Funcția de activare

Funcțiile de activare au un rol esențial în dezvoltarea rețelelor neuronale, fiind responsabile pentru introducerea non-linearității, permițând modelelor DCNN să învețe și să reprezinte relații complexe în date. Fără aceste funcții, o rețea neuronală ar fi echivalentă cu un model liniar, limitându-i astfel capacitatea de a rezolva probleme non-liniare complexe. În cazul instruirii modelelor DCNN propuse, s-au utilizat iterativ următoarele funcții de activare: *ReLU* (eng., *Rectified Linear Unit*), *Sigmoid*, *Tanh* și *Softmax*. Fiecare dintre acestea are propriile sale caracteristici, avantaje și dezavantaje, care le fac potrivite pentru diferite tipuri de sarcini și arhitecturi. La ratele de învățare mai mari ReLU a prezentat și câteva dezavantaje, cum ar fi problema denumită în engleză „*dying ReLU*”, unde un procent mare de neuroni au deveni inactivi (adică, au produs întotdeauna 0) pentru orice intrare [476].

- ❖ Evaluarea performanței: validarea, testarea, metrice, statistici, teste parametrice, teste neparametrice, interpretări

Validarea și testarea modelelor DCNN au reprezentat etape esențiale în procesul de dezvoltare fiind importante pentru evaluarea și asigurarea performanței acestora într-un mod generalizabil. Aceste etape au fost distincte, fiecare având un scop și o funcție specifică în cadrul fluxului de lucru al învățării automate. Validarea a reprezentat un instrument de calibrare, permițând ajustarea hiperparametrilor modelelor și prevenirea supraînvățării (eng., *overfitting*) prin monitorizarea performanței modelelor pe seturi de date care nu au fost utilizate în procesul de antrenament, dar care fac parte din datele disponibile. Astfel, validarea a oferit o evaluare intermediară care a ghidat îmbunătățirea modelelor DCNN înainte de testările finale. Pe de altă parte, testarea a reprezentat etapa finală de evaluare, în care modelele au fost evaluate pe un set de date complet separat, care nu a fost utilizat nici în antrenament, nici în validare.

În cadrul etapelor experimentale au existat două abordări esențiale pentru evaluarea performanței modelelor DCNN, oferind o perspectivă detaliată asupra eficienței acestora. Prima abordare s-a concentrat pe analiza performanței modelelor în funcție de rezultatele extreme, cele mai bune și cele mai slabe valori de *loss* obținute în fiecare fold și pentru fiecare clasă. Subsetul de validare încrucișată (eng., *Fold*) sau clasa cu cea mai mică valoare a *loss-ului* (eng. *Ranked Min*) au fost evaluate ca reprezentând cea mai bună performanță, semnalând o potrivire excelentă a modelului la datele respective. În contrast, *fold-ul* sau clasa cu cea mai mare valoare a *loss-ului* (eng., *Ranked Max*) au fost interpretate ca având cea mai slabă performanță, sugerând dificultăți semnificative în adaptarea modelului la datele specifice aceluși fold sau clasă. Această metodă este instrumentală în evidențierea variabilității și a consistenței performanței modelelor pe diverse subseturi de date de antrenament și testare, contribuind, astfel, la o evaluare profundă a robusteții modelelor DCNN.

A doua abordare adoptată a implicat calcularea metricilor agregate și a deviațiilor standard aferente, pentru a oferi o evaluare integrată a performanței modelelor pe ansamblul tuturor *fold-urilor*, claselor și la nivelul întregului model. Cele două metode au furnizat o imagine cuprinzătoare asupra performanței generale a modelelor DCNN și au facilitat comparații riguroase între diferite modele sau configurații. Prin utilizarea acestor două abordări complementare, studiile experimentale au asigurat o evaluare complexă și nuanțată a capacităților modelelor DCNN, reflectând atât variabilitatea, cât și performanța agregată în diverse scenarii de testare.

Pentru a asigura o evaluare calitativă a performanței modelelor DCNN construite, s-au utilizat scripturi special concepute și executate în mediul de programare *Python* pentru calculul metricilor agregate și instrumente analitice avansate integrate în mediul de programare *Wolfram Mathematica*, cum ar fi instrumentul *Classifier Measurements*, care s-a dovedit a fi deosebit de util pe parcursul etapelor de antrenare, optimizare, validare și testare. Acest instrument nu doar a simplificat procesul de calcul al metricilor individuale critice, dar a oferit și o vizualizare cuprinzătoare a acestora, facilitând o înțelegere profundă a performanței modelului instruit. Simultan, instrumentul *Net Train Results Object* a fost indispensabil pentru furnizarea de perspective detaliate asupra dinamicii antrenării. Acesta a înregistrat meticolos date privind pierderea și metricile de performanță la fiecare iterație, împreună cu

informații relevante despre viteza de antrenare și parametrii asociați, oferind astfel o viziune holistică asupra evoluției modelului în timpul fazei de antrenare.

Aceste instrumente au generat un set cuprinzător de măsurători sau metrici, denumite proprietăți (eng., *Properties*), care au furnizat o platformă robustă pentru evaluarea și compararea diferitelor caracteristici ale modelelor. Metricile au inclus o gamă largă de elemente, inclusiv, dar fără a se limita la: Matricea de Confuzie (eng., *Confusion Matrix*), Acuratețe (eng., *Accuracy*), Precizie (eng., *Precision*), Funcție de cost sau pierdere (eng., *Loss*), Specificitate (eng., *Specificity*), Senzitivitate (eng., *Sensitivity* sau *Recall*), Scorul F1 (eng., *F1 Score*) și Rata de eroare (eng., *Error Rate*), oferind astfel o înțelegere profundă a nuanțelor performanțelor modelelor DCNN.

Totodată, au fost evaluate și o serie de statistici importante evidențiate în Tabelul 4.9, pentru dinamica procesului de instruire, optimizare și validare, cum ar fi: Loturi pe rundă (epocă) (eng., *Batches Per Round*), Dimensiunea lotului (eng., *Batch Size*), Loturi pe secundă (eng., *Batches Per Second*), Medie loturi pe secundă (eng., *Mean Batches Per Second*), Total loturi (eng., *Total Batches*), Instanțe procesate (eng., *Examples Processed*), Rata de învățare inițială (eng., *Initial Learning Rate*), Rata de învățare finală (eng., *Final Learning Rate*), Medie instanțe pe secundă (eng., *Mean Examples Per Second*), Total runde (epoci) (eng., *Total Rounds*) și Timp total de antrenament (eng., *Total Training Time*).

În procesul de evaluare s-au utilizat și alte categorii de statistici pentru a oferi o imagine mai detaliată și completă a performanței modelelor DCNN. Aceste statistici au inclus intervalul interquartilic (eng., *interquartile range*), media geometrică (eng. *geometric mean*), mediana (eng., *median*), minimul clasat (eng., *ranked min*), maximul clasat (eng., *ranked max*), deviația medie (eng., *mean deviation*), varianța (eng., *variance*), asimetria (eng. *skewness*) și *kurtosis-ul* (eng. *kurtosis*). Fiecare dintre aceste statistici a fost calculată, în principal, pentru metricile Acuratețe și *F1 Score*, având în vedere că modelele DCNN evaluate au fost dezvoltate pentru sarcini de clasificare, iar unul dintre seturile de antrenament utilizate a fost dezechilibrat. Pentru modele DCNN care au scopul de a maximiza acuratețea, calcularea acestor statistici ajută la înțelegerea consistenței și robusteții acestei metrici, iar pentru metrica *F1 Score*, evidențiază modul cum modelele gestionează diferitele clase și pot identifica posibile dezechilibre în performanță.

Evaluarea performanței modelelor DCNN a reprezentat un proces esențial în stabilirea fiabilității și robusteții acestora, în acest context, protocolul de evaluare implicând mai mulți pași fundamentali, care au inclus atât calcularea și analiza metricilor de performanță, cât și aplicarea unor teste statistice adecvate pentru a valida distribuția acestor metrici. Primul pas în această procedură a constat în calcularea și evaluarea metricilor de performanță, odată calculate aceste metrici, următorul pas a implicat aplicarea unor teste parametrice pentru verificarea normalității distribuției acestor metrici. Testele parametrice precum *Jarque-Bera ALM*, *Mardia Combined*, *Mardia Kurtosis* și *Mardia Skewness* au fost esențiale în acest context. Testul *Jarque-Bera ALM* evaluează dacă distribuția datelor respectă o distribuție normală, bazându-se pe măsurile de *skewness* și *kurtosis*. *Mardia Combined* este un test de normalitate multivariată, care combină atât *kurtosis-ul*, cât și *skewness-ul* pentru a oferi o evaluare comprehensivă a normalității. *Mardia Kurtosis* și *Mardia Skewness* sunt teste care măsoară separat *kurtosis-ul* și *skewness-ul*, oferind informații detaliate despre asimetria și concentrarea extremelor în datele analizate [480].

În cazul în care aceste teste parametrice au indicat faptul că distribuția metricilor nu a fost normală, a fost necesar să se aplice un set de teste non-parametrice. Aceste teste au inclus *Anderson-Darling*, *Baringhaus-Henze*, *Cramér-von Mises*, *Kolmogorov-Smirnov*, *Kuiper*, *Pearson Chi-Square*, *Shapiro-Wilk* și *Watson U²*.

Interpretarea rezultatelor obținute în urma acestor teste statistice a fost esențială pentru validarea performanței modelelor DCNN. Fiecare statistică a oferit *insight-uri* specifice despre comportamentul distribuției. De exemplu, un rezultat semnificativ al testului *Jarque-Bera ALM* ar sugera că distribuția metricii de performanță se abate de la normalitate, ceea ce ar putea indica necesitatea unei transformări a datelor sau a unei ajustări a modelului. În schimb, un rezultat nesemnificativ în testul *Shapiro-Wilk* ar sugera că distribuția este compatibilă cu normalitatea, validând aplicabilitatea anumitor teste parametrice suplimentare sau metode de inferență statistică.

Pe de altă parte, teste neparametrice precum *Kolmogorov-Smirnov* sau *Anderson-Darling* au oferit o flexibilitate mai mare în interpretare, deoarece nu presupun normalitatea datelor. Dacă unul dintre aceste teste a indicat o conformitate bună cu distribuția de referință, s-a putut considera că modelul este robust și că metricile de performanță au fost distribuite într-un mod previzibil și stabil. În cazurile în care aceste teste au indicat abateri semnificative, au fost investigate mai profund cauzele acestor abateri, care au inclus probleme legate de datele utilizate pentru antrenament, configurarea modelelor sau chiar natura complexă a problemei de clasificare. Astfel, această procedură de evaluare detaliată și stratificată a performanței modelelor DCNN a asigurat o înțelegere profundă și completă a comportamentului modelelor DCNN, contribuind la îmbunătățirea și optimizarea acestora în contexte complexe și variate.

Testele parametrice și neparametrice pentru evaluarea distribuției metricilor de performanță s-au aplicat pe subsetul de date de validare. Acest lucru a permis monitorizarea și optimizarea modelelor pe parcursul antrenamentului, asigurând că acestea au fost ajustate optim înainte de evaluarea finală pe setul de testare. Evaluarea modelelor DCNN s-a efectuat atât pe setul de date limitat și echilibrat, cât și pe setul de date extins și dezechilibrat, analizându-se performanța pentru fiecare dintre subseturile de date de instruire, validare și testare.

Tabelul 4.9 Statistici de instruire pentru modelul *matDETECT-FTIR* DCNN pe seturi de date limitate și extinse

Statistici instruire matDETECT-FTIR DCNN	Setul de date limitat	Setul de date extins
Loturi pe rundă (epocă)	5	131
Dimensiunea lotului	64	64
Loturi pe secundă	5,28705	52,1053
Medie loturi pe secundă	4,38966	46,9154
Total loturi	250	6.550
Instanțe procesate	16.000	419.200
Instanțe instruire	300	8.340
Instanțe validare	75	2.085
Rata de învățare inițială	0,001	0,001
Rata de învățare finală	0,000470422	0,000999287
Medie instanțe pe secundă	280,939	3.002,58
Total runde (epoci)	50	50
Timp total de antrenament (min)	136,952	242,759

Matrici de confuzie agregate

Analiza matricilor de confuzie agregate pentru seturile de date echilibrat și dezechilibrat oferă o înțelegere detaliată a performanței modelului în clasarea corectă a instanțelor din cele trei clase de interes. În cadrul acestei analize, s-au examinat în mod detaliat matricile de confuzie pentru cele două seturi de date, punându-se accent pe componența fiecărei matrici și pe interpretarea rezultatelor obținute.

I. Setul de date limitat și echilibrat

Acest set de date a conținut 375 de imagini spectrale digitale, repartizate echilibrat în cele trei clase de interes, fiecare având câte 125 de instanțe. În urma validării încrucișate pe 5 subseturi (eng., *5-fold cross-validation*), s-au generat cinci matrici de confuzie.

II. Setul de date extins și dezechilibrat

Setul de date a conținut 10.425 de imagini spectrale digitale, repartizate dezechilibrat între cele trei clase: 125 de instanțe în clasa 1, 250 în clasa 2 și 10.050 în clasa 3. Validarea încrucișată pe 5 subseturi a generat, deasemenea, cinci matrici de confuzie.

Aceste matrici de confuzie reflectă performanța modelului DCNN pe fiecare subset în parte, evidențiind modul în care modelul a clasificat instanțele de date pe parcursul procesului de validare încrucișată. După generarea matricilor de confuzie individuale pentru fiecare dintre cele cinci subseturi (eng., *folds*) atât pentru setul de date limitat și echilibrat, cât și pentru setul extins și dezechilibrat,

următorul pas în evaluarea performanței modelului DCNN a fost calcularea unor matrici de confuzie agregate prin metoda mediei geometrice, ilustrate grafic în Figura 4.12. Acest proces a permis o evaluare centralizată și unificată a performanței modelului pe întregul set de date, ținând cont de variațiile existente între folduri. Matricea de confuzie agregată prin media geometrică reprezintă o tehnică de combinare a matricilor de confuzie individuale obținute pentru fiecare fold într-o singură matrice reprezentativă, care reflectă performanța generală a modelului. Media geometrică a fost preferată în acest context datorită capacității sale de a atenua efectul valorilor extreme, oferind astfel o măsură mai robustă a performanței [481].

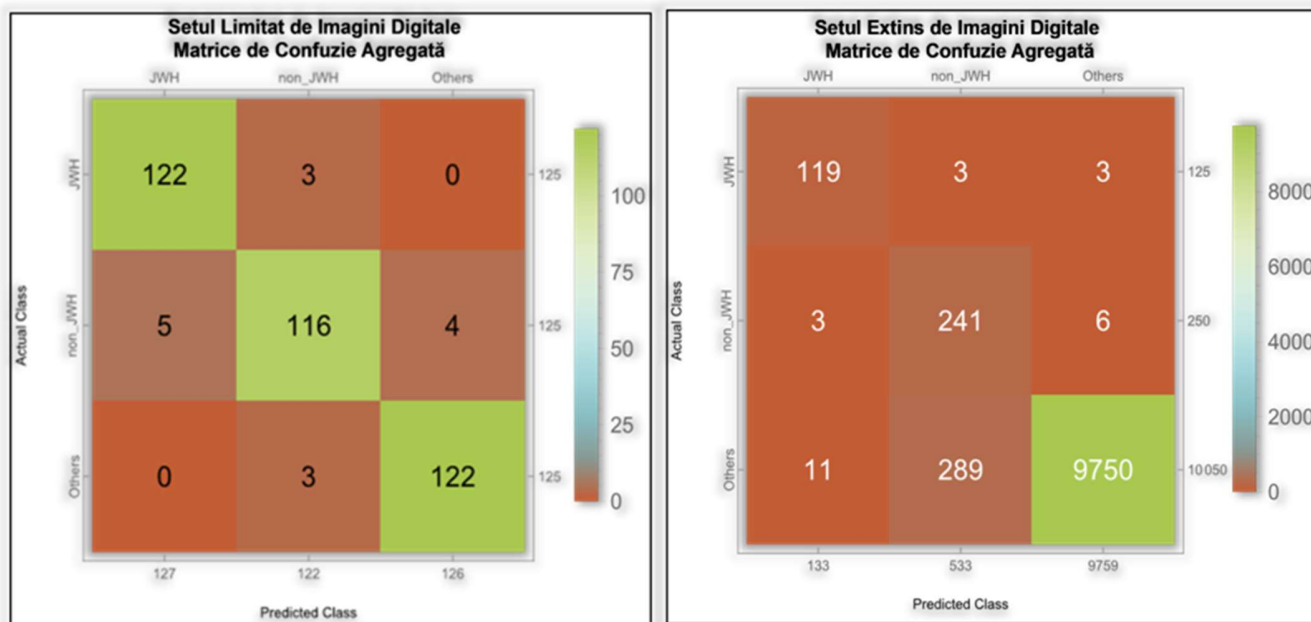


Figura 4.12 Matricile de confuzie agregate prin metoda mediei geometrice generate pentru evaluarea performanței modelului *matDETECT_FTIR* DCNN. În cadranul din stânga este evidențiată matricea de confuzie agregată aferentă setului de date limitat și echilibrat iar în cel din dreapta este reprezentată matricea de confuzie pentru setul de date extins și dezechilibrat.

Matricile de confuzie agregate obținute prin metoda mediei geometrice au oferit o imagine globală a capacității modelului de a clasifica corect instanțele din toate *fold-urile*, reducând impactul variațiilor și extremele care ar fi apărut în cazul unei simple medii aritmetice. Astfel, această abordare a fost utilă în situația evaluării cât mai robuste și corecte a modelului DCNN, în special în prezența dezechilibrelor în distribuția claselor. În cazul setului limitat și echilibrat, modelul a demonstrat o acuratețe ridicată, cu foarte puține erori în toate clasele. În cazul setului extins și dezechilibrat, deși modelul a întâmpinat dificultăți în clasificarea corectă a tuturor instanțelor, în special în clasa 2, performanța generală a rămas ridicată, evidențiind capacitatea modelului de a se adapta la seturi de date complexe și dezechilibrate. Aceste rezultate sunt esențiale pentru înțelegerea limitărilor și punctelor forte ale modelului și pentru ghidarea ajustărilor viitoare în procesul de instruire și validare.

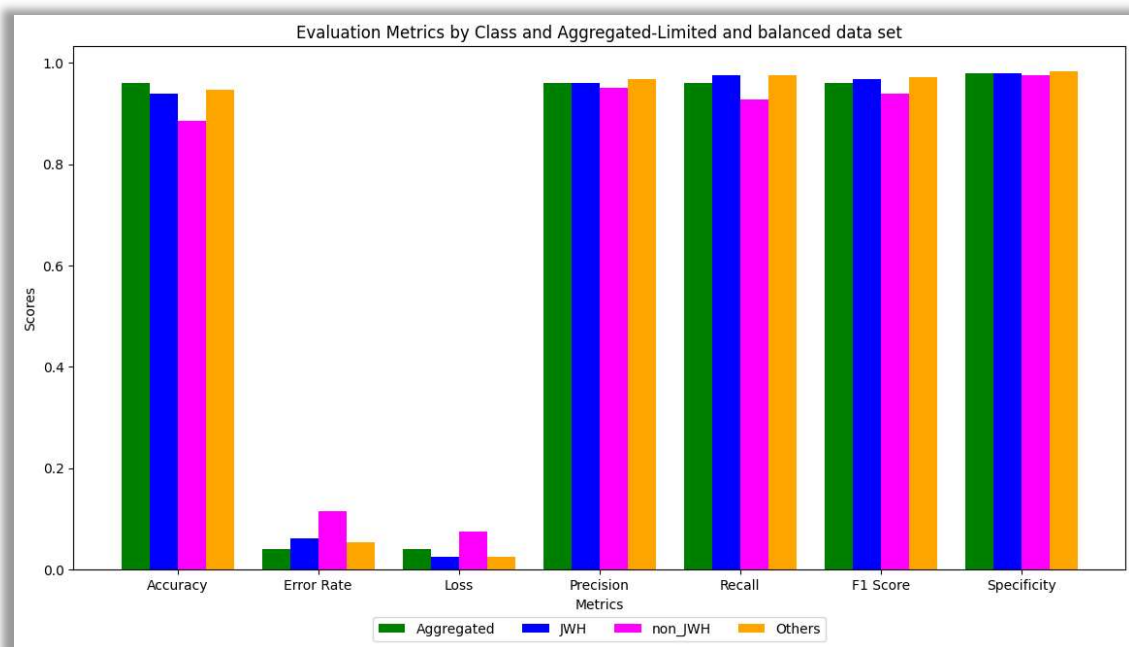
📊 Metrici agregate

- ❖ Subsetul de date de validare

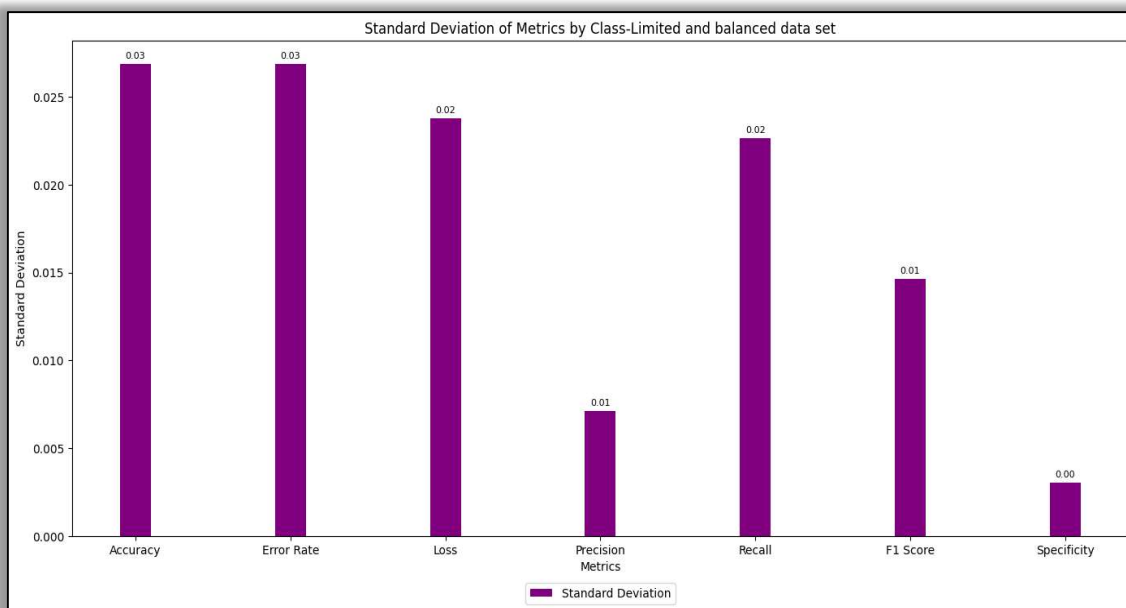
Analiza metricilor de performanță pentru modelul *matDETECT_FTIR* DCNN, pe seturile de date limitate și extinse, evidențiată în Tabelul 4.9 și ilustrată în Figurile 4.13 - 4.20 oferă o perspectivă detaliată asupra comportamentului modelului în diverse condiții de echilibrare și dimensiune a datelor.

Tabelul 4.9 Metrici agregate în subsetul de date de validare pentru modelul *matDETECT-FTIR* DCNN.

Modelul <i>matDETECT-FTIR</i> DCNN				
Set de date limitat și echilibrat Subset de date de validare				
Metrică (Metrics)	Clasa 1 (JWH)	Clasa 2 (non_JWH)	Clasa 3 (Others)	Agregată (Aggregated)
Acuratețe (Accuracy)	0,9585	0,9062	0,9457	0,9600 ± 0,0268
Rată de Eroare (Error Rate)	0,0615	0,1145	0,0543	0,0768 ± 0,0268
Pierdere (Loss)	0,0243	0,0747	0,0243	0,0411 ± 0,0238
Precizie (Precision)	0,9606	0,9508	0,9683	0,9599 ± 0,0071
Senzitivitate (Recall)	0,9760	0,9280	0,9760	0,9600 ± 0,0226
Scor F1 (F1 Score)	0,9683	0,9393	0,9721	0,9599 ± 0,0147
Specificitate (Specificity)	0,9800	0,9760	0,9835	0,9798 ± 0,0031
Set de date extins și dezechilibrat Subset de date de validare				
Metrică (Metrics)	Clasa 1 (JWH)	Clasa 2 (non_JWH)	Clasa 3 (Others)	Agregată (Aggregated)
Acuratețe (Accuracy)	0,9561	0,84446	0,9693	0,9698 ± 0,2254
Rată de Eroare (Error Rate)	0,1439	0,5554	0,0307	0,2433 ± 0,2254
Pierdere (Loss)	0,0492	0,0367	0,0303	0,0387 ± 0,0078
Precizie (Precision)	0,8947	0,7522	0,9991	0,7820 ± 0,2371
Senzitivitate (Recall)	0,9520	0,9640	0,9701	0,9620 ± 0,0075
Scor F1 (F1 Score)	0,9225	0,7156	0,9844	0,8408 ± 0,1613
Specificitate (Specificity)	0,9986	0,9713	0,9756	0,9818 ± 0,0120

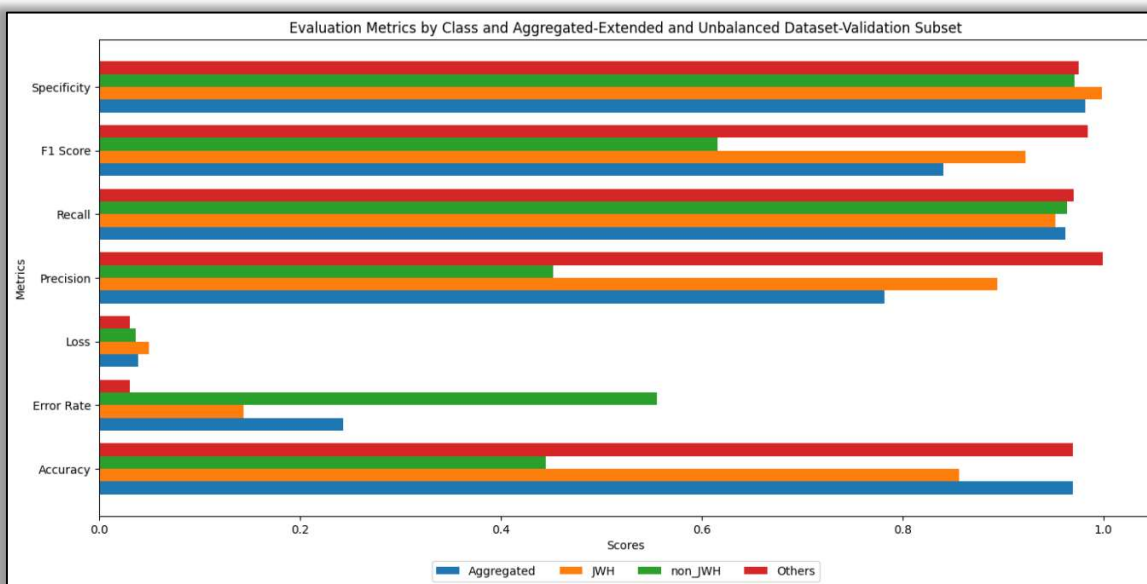


(a)

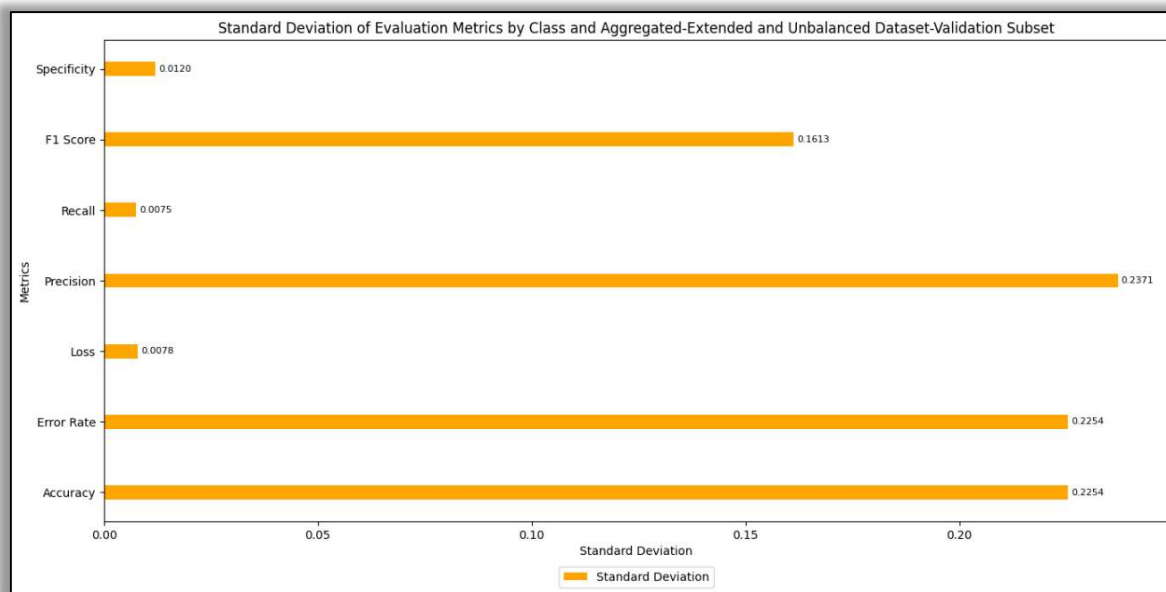


(b)

Figura 4.13 Analiza comparativă a metricilor de validare pentru un set de date limitat și echilibrat în modelul *matDETECT-FTIR* DCNN: (a) pe clase și agregate; (b) în funcție de deviația standard.

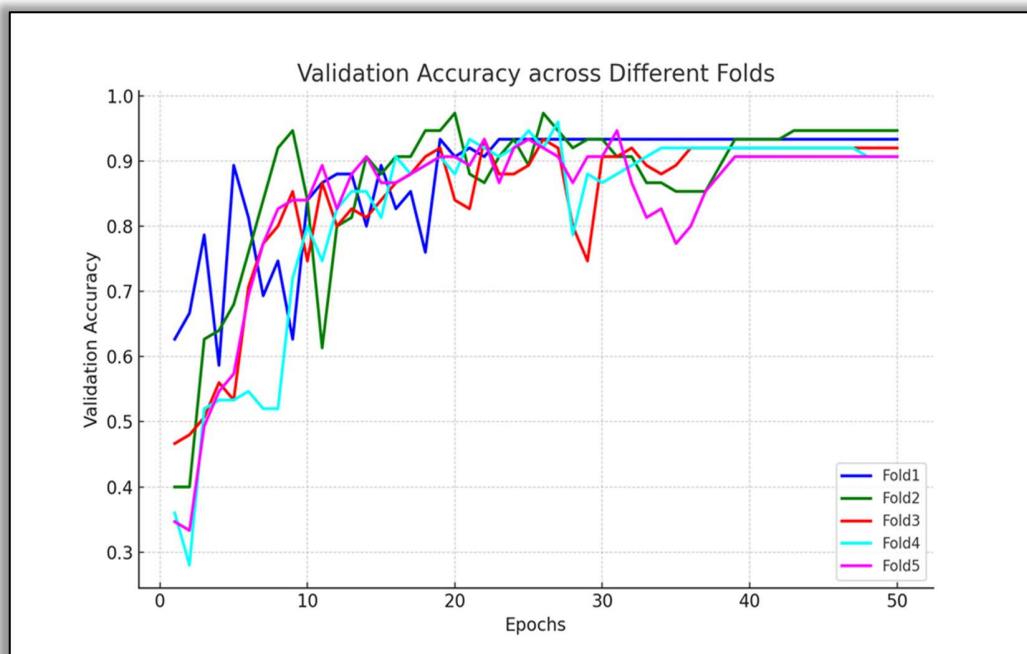


(a)

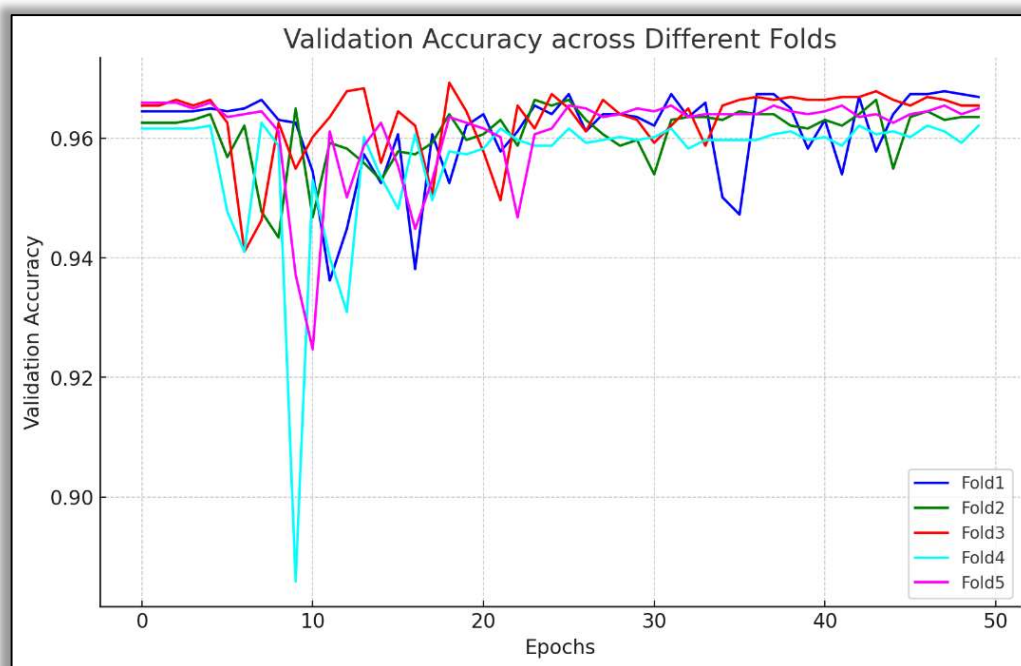


(b)

Figura 4.14 Evaluarea metricilor de validare pentru un set de date extins și dezechilibrat în modelul *matDETECT-FTIR* DCNN: (a) pe clase și agregate; (b) în funcție de deviația standard.

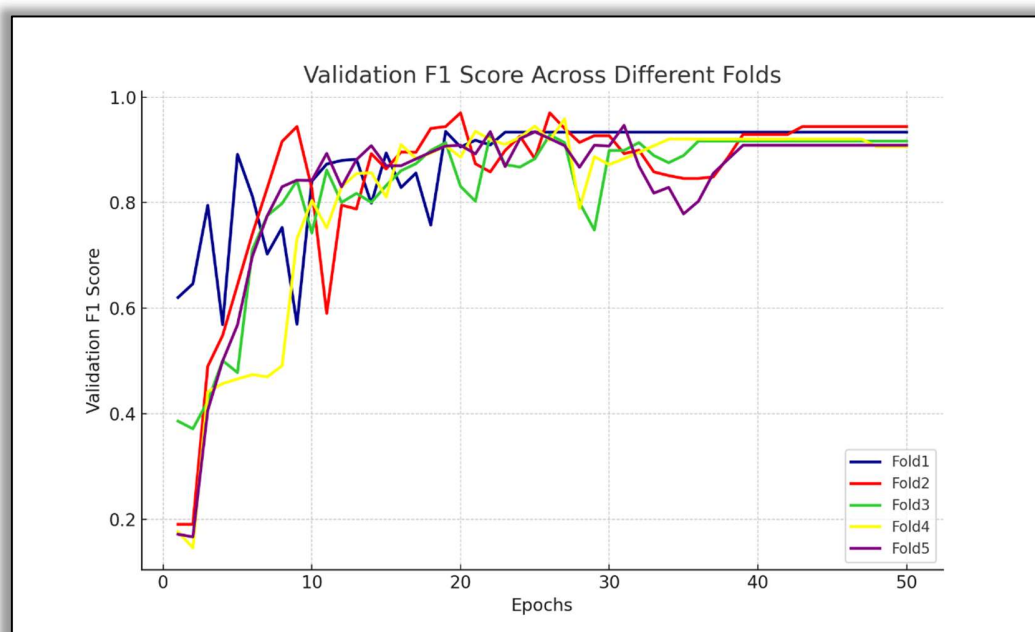


(a)

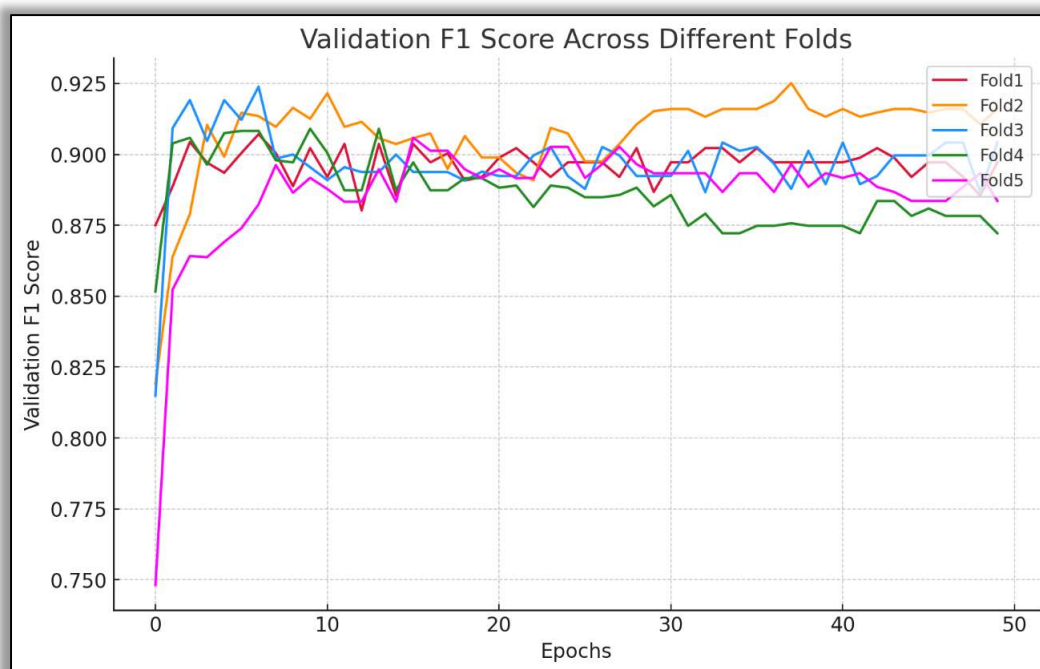


(b)

Figura 4.15 Analiza comparativă a metricii de validare Accuracy pentru 5 folds, în modelul matDETECT-FTIR DCNN: (a) pentru un set de date limitat și echilibrat; (b) pentru un set de date extins și dezechilibrat.



(a)

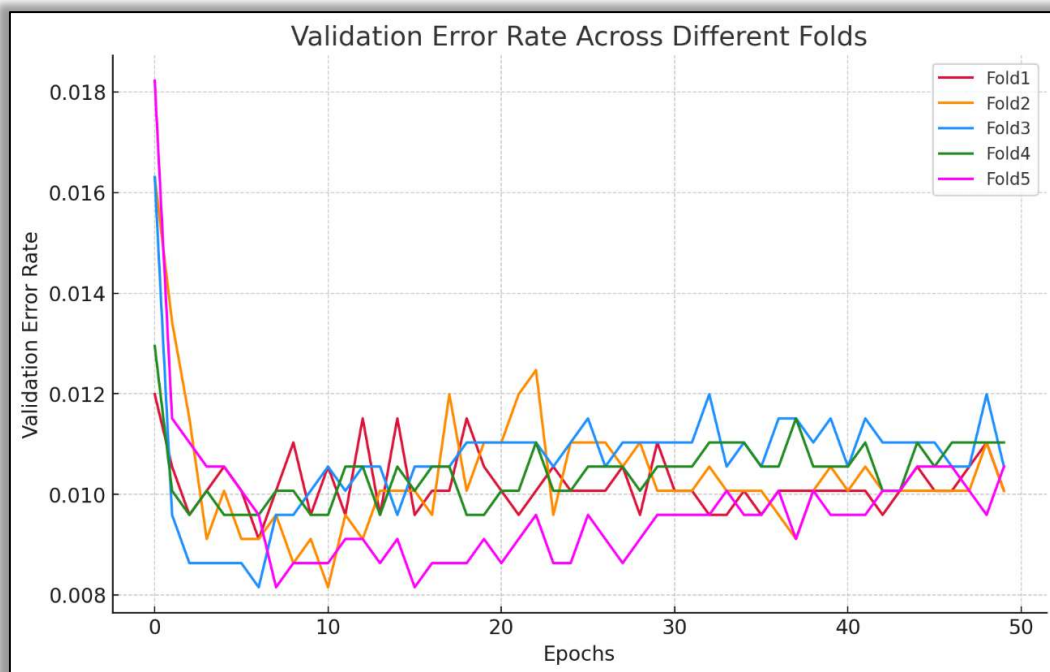


(b)

Figura 4.16 Analiza comparativă a metricii de validare *F1 Score* pentru 5 *fold*s, în modelul *matDETECT-FTIR* DCNN: (a) pentru un set de date limitat și echilibrat; (b) pentru un set de date extins și dezechilibrat.

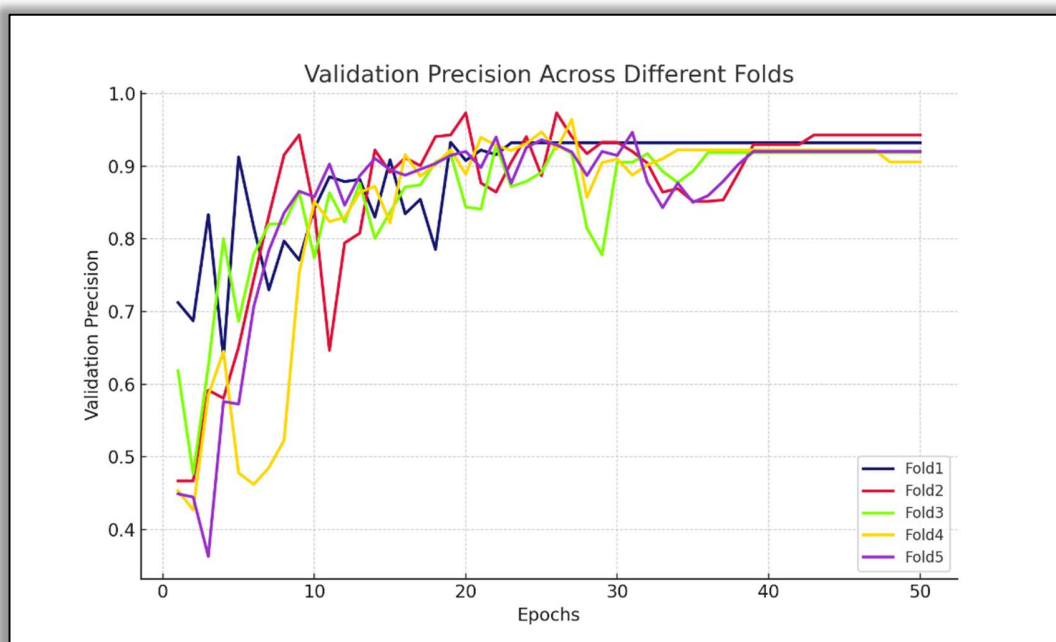


(a)

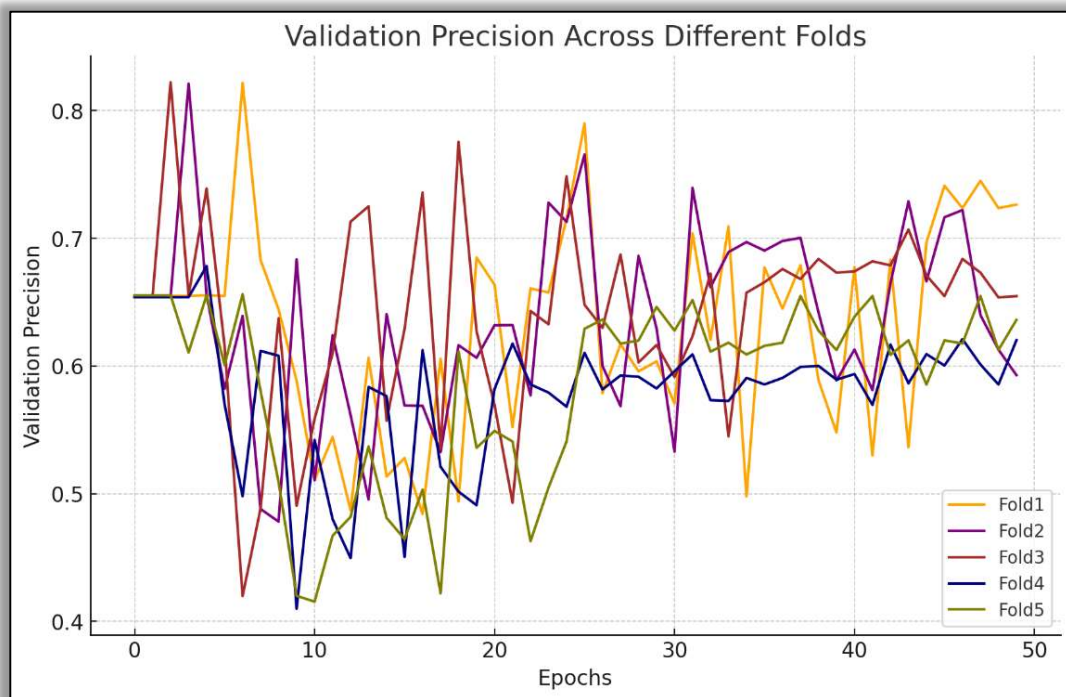


(b)

Figura 4.17 Analiza comparativă a metricii de validare *Error Rate* pentru 5 *folds*, în modelul *matDETECT-FTIR* DCNN: (a) pentru un set de date limitat și echilibrat; (b) pentru un set de date extins și dezechilibrat.

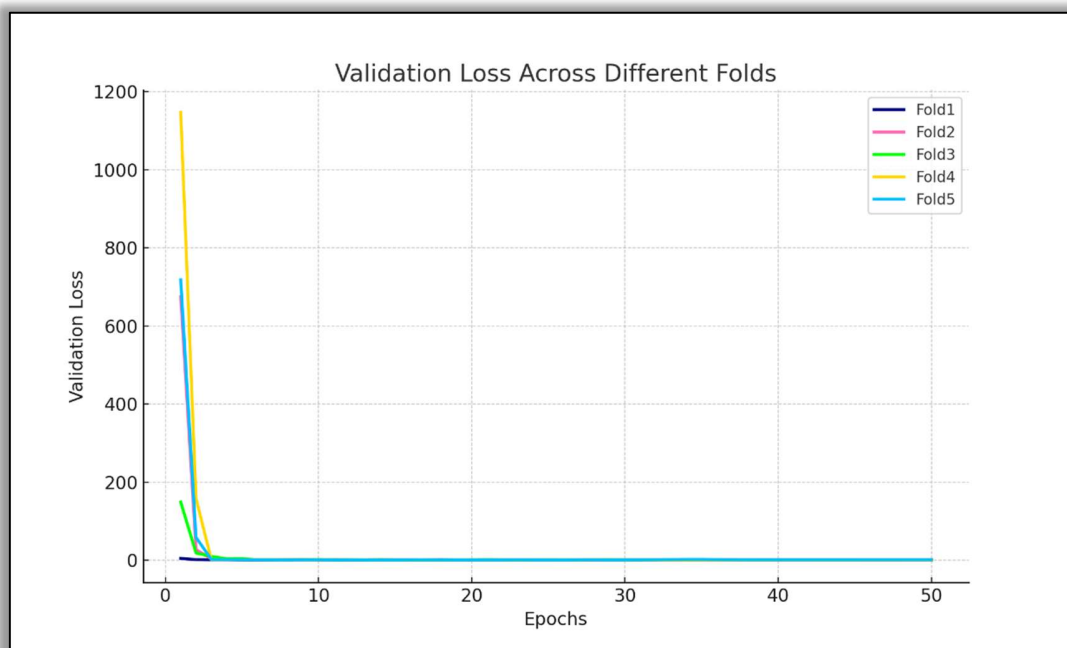


(a)

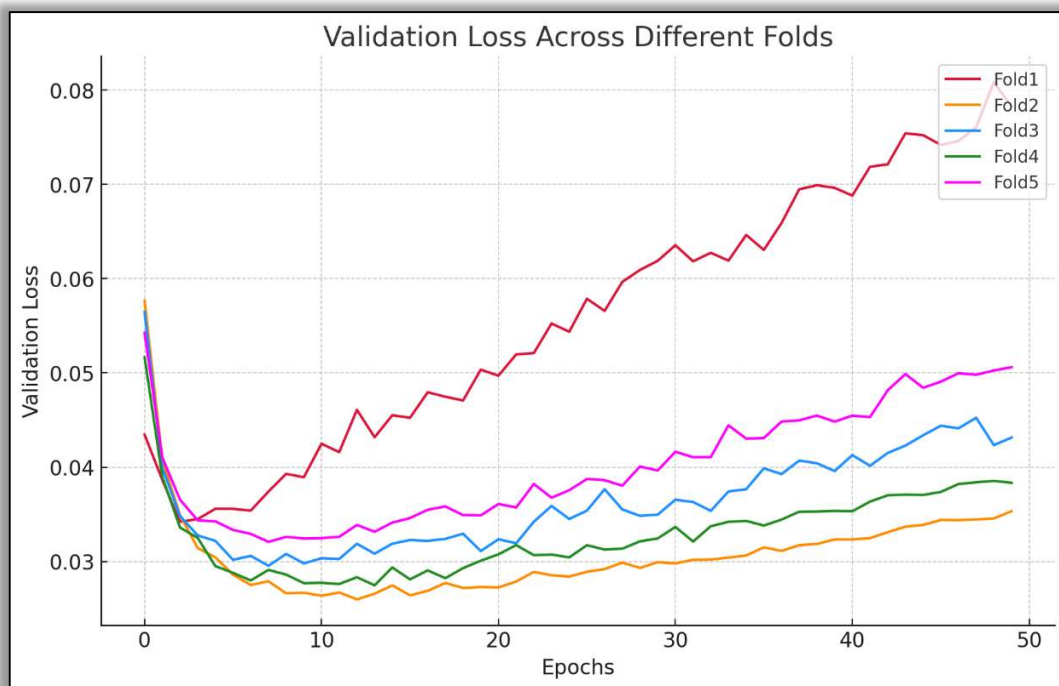


(b)

Figura 4.18 Analiza comparativă a metricii de validare *Precision* pentru 5 *fold*s, în modelul *matDETECT-FTIR* DCNN: (a) pentru un set de date limitat și echilibrat; (b) pentru un set de date extins și dezechilibrat.

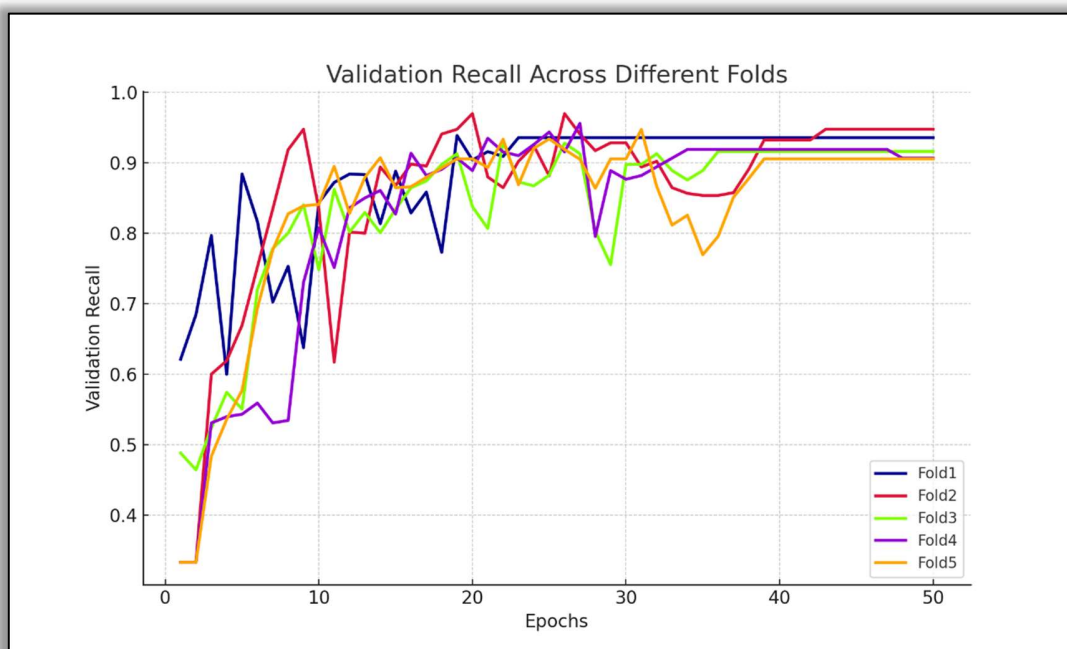


(a)

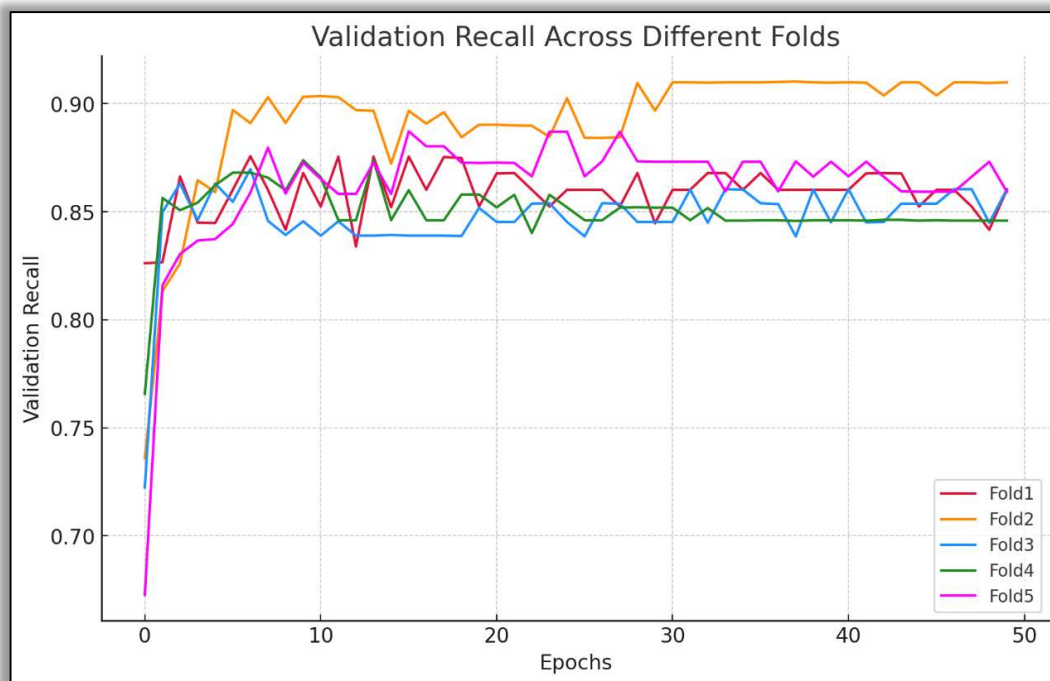


(b)

Figura 4.19 Analiza comparativă a metricii de validare *Loss* pentru 5 *folds*, în modelul *matDETECT-FTIR* DCNN: (a) pentru un set de date limitat și echilibrat; (b) pentru un set de date extins și dezechilibrat.



(a)



(b)

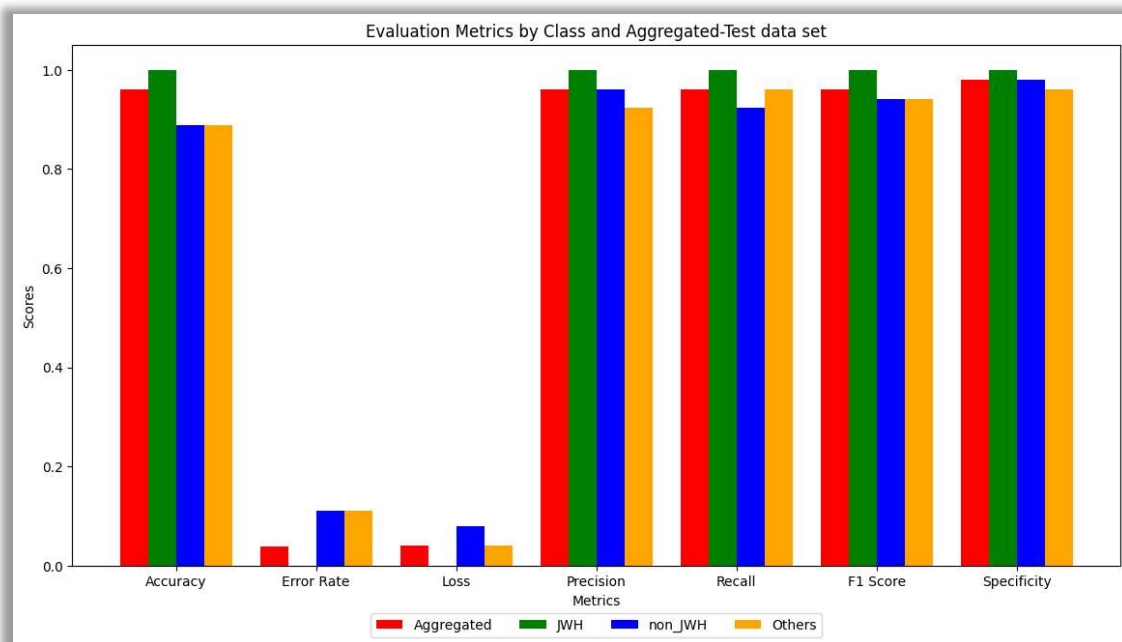
Figura 4.20 Analiza comparativă a metricii de validare *Recall* pentru 5 *folds*, în modelul *matDETECT-FTIR* DCNN: (a) pentru un set de date limitat și echilibrat; (b) pentru un set de date extins și dezechilibrat.

❖ Subsetul de date de testare

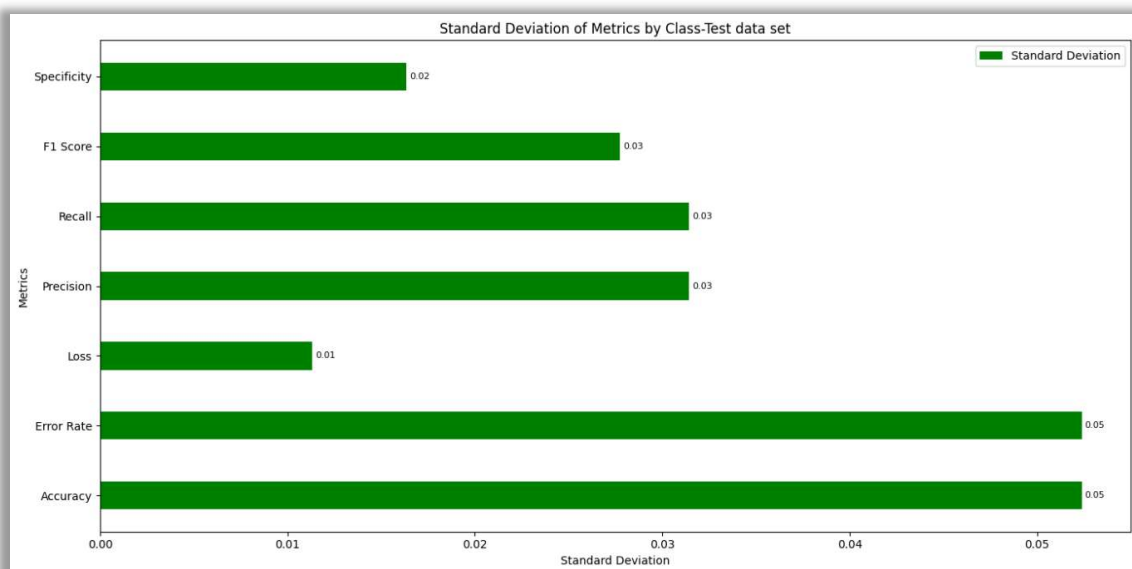
Analizele detaliate ale performanței modelului *matDETECT-FTIR* DCNN pe setul de date de testare prezentate în tabelul 4.10 și ilustrate grafic în Figura 4.22 dezvăluie o imagine complexă a capacității acestuia de a clasifica corect diferitele clase de substanțe analizate. Acuratețea agregată a modelului, de $0,9600 \pm 0,05$, indică o performanță generală solidă, sugerând că modelul este capabil să clasifice corect majoritatea exemplarelor din setul de testare. Cu toate acestea, există variații notabile între clase, ceea ce sugerează diferențe în complexitatea sau în natura datelor specifice fiecărei clase.

Tabelul 4.10 Metrici agregate pe setul de date de testare pentru modelul *matDETECT-FTIR* DCNN.

Modelul <i>matDETECT-FTIR</i> DCNN				
Metrică (Metrics)	Subset de date de testare			Agregată (Aggregated)
	Clasa 1 (JWH)	Clasa 2 (non_JWH)	Clasa 3 (Others)	
Acuratețe (Accuracy)	1,00	0,9289	0,9320	$0,9600 \pm 0,05$
Rată de Eroare (Error Rate)	0,00	0,1111	0,0112	$0,0741 \pm 0,05$
Pierdere (Loss)	0,00	0,0800	0,0408	$0,0403 \pm 0,01$
Precizie (Precision)	1,00	0,9600	0,9683	$0,9610 \pm 0,03$
Senzitivitate (Recall)	1,00	0,9231	0,9231	$0,9610 \pm 0,03$
Scor F1 (F1 Score)	1,00	0,9412	0,9412	$0,9608 \pm 0,03$
Specificitate (Specificity)	1,00	0,9796	0,9600	$0,9799 \pm 0,02$



(a)



(b)

Figura 4.22 Analiza comparativă a metricilor de testare agregate în modelul *matDETECT-FTIR* DCNN: (a) Accuracy, Error Rate, Loss, Precision, Recall, F1 Score, Specificity; (b) deviația standard pentru metricile de performanță, evaluată pe clase și agregată.

4.4.3 Modelul *matDETECT_VisionTransformer* DCNN de clasificare derivat din arhitectura preantrenată a modelului *Vision Transformer (ViT-B/32)*

Introducerea modelelor *Vision Transformer (ViT)* în 2021 de către echipa Google Research's Brain Team a reprezentat un punct de cotitură în viziunea computerizată, extinzând utilizarea arhitecturilor *Transformer*, inițial concepute pentru procesarea limbajului natural (*NLP*), prin implementarea mecanismului de auto-atentie (eng., *self-attention*) în analiza secvențială a segmentelor de imagini. Aceasta adaptare a fost facilitată de succesul prealabil înregistrat în competiția *ImageNet*. În contextul procesării imaginilor, aceasta permite modelului să acorde importanță diferitelor părți ale imaginii în funcție de context, ajutând la identificarea caracteristicilor relevante pentru sarcina de procesare. Diferența principală față de metodele tradiționale, care utilizează Rețele Neuronale Convoluționale (CNNs) pentru procesarea integrală a imaginilor, constă în abordarea adoptată de *ViT* care fragmentează imaginea în mai multe părți și le tratează ca pe niște *token-uri* într-o secvență. Acest proces este analog tratării cuvintelor într-un text în cadrul *NLP*.

I. Arhitectura modelului *matDETECT_VisionTransformer* DCNN

Familia de modele *Vision Transformer (ViT)*, evidențiată în Tabelul 4.11, constă într-o suită de rețele neuronale individuale, fiecare identificată printr-o combinație specifică de parametri. Dezvoltarea modelului *matDETECT_VisionTransformer* DCNN prezentat în această secțiune s-a efectuat în mediul de programare *Wolfram Mathematica*, pentru acest proces experimental, modelul *Vision Transformer ViT-B/32* preantrenat pe baza de date *ImageNet Competition Data*, obținut din *Wolfram Neural Net Repository* fiind modificat, instruit, optimizat, validat, testat și adaptat cerințelor specifice ale proiectului științific. Modelul *ViT-B/32* reprezintă una dintre variantele mai mici ale acestei familii de model, oferind un echilibru între performanță și complexitate computațională, fiind astfel potrivit pentru diverse aplicații criminalistice. Arhitectura modelului *matDETECT_VisionTransformer* DCNN include mai multe mecanisme specifice și componente arhitecturale esențiale, fiecare având un rol distinct în procesarea și transformarea datelor vizuale în predicții.

Tabelul 4.11 Analiza comparativă a modelelor *Vision Transformer* antrenate pe setul de date *ImageNet*, conform *Wolfram Neural Net Repository*: Structură, Statistici și Evaluare a performanței.

Parametri		Statistici			Top-5 Accuracy	Top-1 Accuracy
Model	Dimensiune patch	Număr de straturi	Număr de ponderi	Mărime model (Mb)	ImageNet-1k (%)	ImageNet-1k (%)
Base (ViT-B/16)	16	168	86.567.656	346,354	95,318	81,072
Base (ViT-B/32)	32	168	88.224.232	352,981	92,466	75,912
Large (ViT-L/16)	16	324	304.326.632	1.217,44	94,638	79,662
Large (ViT-L/32)	32	324	306.535.400	1.226,28	93,070	76,972

❖ Mecanisme specifice de procesare a imaginilor spectrale

Conceptul fundamental al acestui model DCNN rezidă în segmentarea imaginii de intrare într-o matrice de 7x7 segmente (eng., *patches*), fiecare fiind transformat într-un vector de caracteristici (eng., *tokens*). Această abordare permite aplicarea mecanismului de auto-atentie (eng., *self-attention*) asupra acestui ansamblu de 49 de *tokens*, adițional utilizându-se un vector de caracteristici suplimentar, numit *token de clasificare* (eng., *Classification Token*), care acumulează informații referitoare la clasificare pe parcursul procesării și le reflectă la finalul acesteia. Incorporarea segmentelor (eng., *Patch Embedding*) reprezintă procesul de transformare a fiecărui segment al unei imagini într-un vector de caracteristici, acesta fiind obținut prin aplatizarea pixelilor din segment și proiectarea lor într-un spațiu latent de dimensiuni fixe prin intermediul unei matrice de ponderi învățate.

Încorporările poziționale (eng., *Positional Embeddings*) generate, pentru exemplificare, în Figura 4.23 reprezintă vectori adăugați la *embedding-urile* segmentelor pentru a oferi informații despre poziția segmentelor în structura originală a imaginii. Acest pas este important pentru ca modelul să poată înțelege ordinea și aranjamentul spațial al segmentelor în cadrul imaginii. *Embedding-urile poziționale* sunt utilizate în arhitecturile *Transformer* pentru a oferi informații despre relațiile spațiale între diferite părți ale unei intrări, care, în acest caz, sunt segmente (eng., *patch*) ale unei imagini. Fiecare segment al imaginii este transformat într-un vector de caracteristici, iar *embedding-ul pozițional* adaugă informații suplimentare legate de poziția fiecărui segment în configurația spațială originală a imaginii. În cadrul arhitecturilor de tip *Vision Transformer*, cum este și *matDETECT_VisionTransformer* DCNN, absența unei structuri ordonate pentru reprezentarea pozițiilor în secvențe de date necesită introducerea explicită a unor informații de poziție. Aceasta se realizează prin încorporări poziționale, care adaugă context spațial și temporal, esențial pentru analiza și înțelegerea profundă a datelor imagistice spectrale utilizate.

Fiecare subgrafic tridimensional din figura evidențiată anterior reprezintă o proiecție detaliată a spațiului de caracteristici (eng., *feature space*) generat de încorporările poziționale pentru diferite poziții în cadrul unei matrice de tip *positionEmbeddings*, cu dimensiuni {50,768}. Această matrice capturează relațiile complexe dintre diferitele locații spațiale din datele de intrare, oferind o reprezentare densă a contextului pozițional care este critic pentru interpretarea corectă a trăsăturilor vizuale din imagini. Proiecțiile tridimensionale evidențiază distribuția și modificările vectorilor de caracteristici în funcție de poziția relativă a fiecărei componente din secvența de date.

Analiza tridimensională a suprafețelor și curbelor din aceste subgrafice relevă variațiile subtile și complexe ale încorporărilor poziționale, evidențiind astfel capacitatea modelului de a învăța reprezentări spațiale bogate și interrelații contextuale din setul de date imagistic. Aceste variații sunt fundamentale pentru performanța modelului în sarcinile de detectare și clasificare, deoarece permit să se discearnă între diverse tipuri de obiecte și caracteristici în funcție de poziționările lor relative și contextuale în cadrul imaginii spectrale. Încorporările poziționale adaugă, astfel, o dimensiune suplimentară de complexitate și detaliu la procesul de învățare, îmbunătățind capacitatea modelului de a generaliza și de a face predicții precise pe baza unor seturi de date de intrare variate.

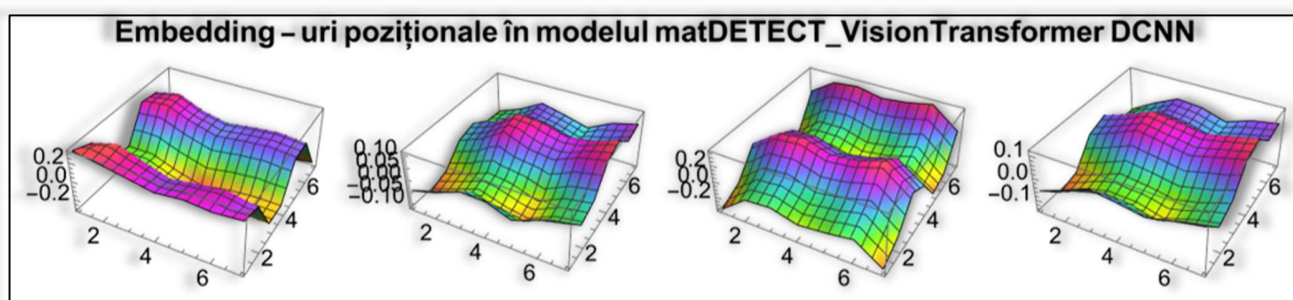


Figura 4.23 Vizualizarea variațiilor încorporărilor poziționale în modelul *matDETECT_VisionTransformer* DCNN: Analiza modificărilor vectorilor de caracteristici în diferite poziții ale unei matrice *positionEmbeddings* {50,768}.

Auto-atenția multi-cap (eng., *Multi-head self-attention*) reprezintă o extensie a mecanismului de auto-atenție, unde atenția este calculată în paralel pe mai multe „capete”, fiecare având capacitatea de a captura diferite aspecte ale datelor [482]. Aceasta îmbunătățește capacitatea modelului de a se concentra simultan pe mai multe caracteristici ale secvenței de intrare. Segmentul, jetonul sau *token-ul* de clasă (eng., *Token Class*) constituie un element adăugat la începutul secvenței de *embedding-uri* în modelele *Transformer* utilizate pentru clasificare. Acesta este actualizat prin fiecare strat al encoderului și la finalul procesării acestuia conține informații agregate despre întreaga imagine, fiind utilizat pentru predicția finală.

În Figura 4.24 sunt ilustrate diferitele mecanisme de procesare a imaginilor spectrale caracteristice modelului DCNN, după cum urmează:

1. Reprezentarea discretizată (eng., *Discretized Representation*)

În cadranul din stânga este reprezentat procesul de discretizare a unei instanțe (imagine de intrare) într-o grilă de 7x7, unde fiecare celulă reprezintă un segment de 32x32 pixeli din imaginea originală, această abordare constituind o tehnică specifică utilizată în prelucrarea imaginilor de către modelele de învățare automată avansate, precum cele din familia *Vision Transformer (ViT)*.

2. Harta de Atenție (eng., *Attention Map*)

Cadranul din centrul figurii indică o Hartă de Atenție conținând matricea completă de atenție de dimensiuni 49x768, care vizualizează modul în care diferite segmente ale imaginii sunt ponderate pe parcursul procesării. Fiecare rând din matricea de atenție arată distribuția ponderilor de atenție pentru un anumit segment față de toate celelalte segmente, arătând cum fiecare cap de atenție contribuie la modelarea relațiilor inter-segmente și oferind o perspectivă asupra complexității și diversității modelelor de atenție care pot fi capturate prin *Multi-Head Self-Attention* [483].

3. Vizualizarea Încorporărilor Poziționale (eng., *Visualization of Positional Embeddings*)

Cadranul din dreapta al figurii prezintă o Matrice a Distanțelor de la Segmentul din Colțul Stânga-Sus. Aceasta arată modul în care încorporările poziționale influențează relația dintre segmente, reflectând distanța spațială între segmentele de intrare în cadrul modelării atenției. Este utilizată pentru a cuantifica și vizualiza relațiile spațiale dintre segmentul de imagine din colțul stânga-sus și toate celelalte segmente ale grilei de intrare, fiind o componentă cheie pentru înțelegerea modului în care modelul DCNN procesează informațiile spațiale și modul cum sunt integrate acestea pentru a sprijini sarcini, cum ar fi clasificarea sau segmentarea [484].

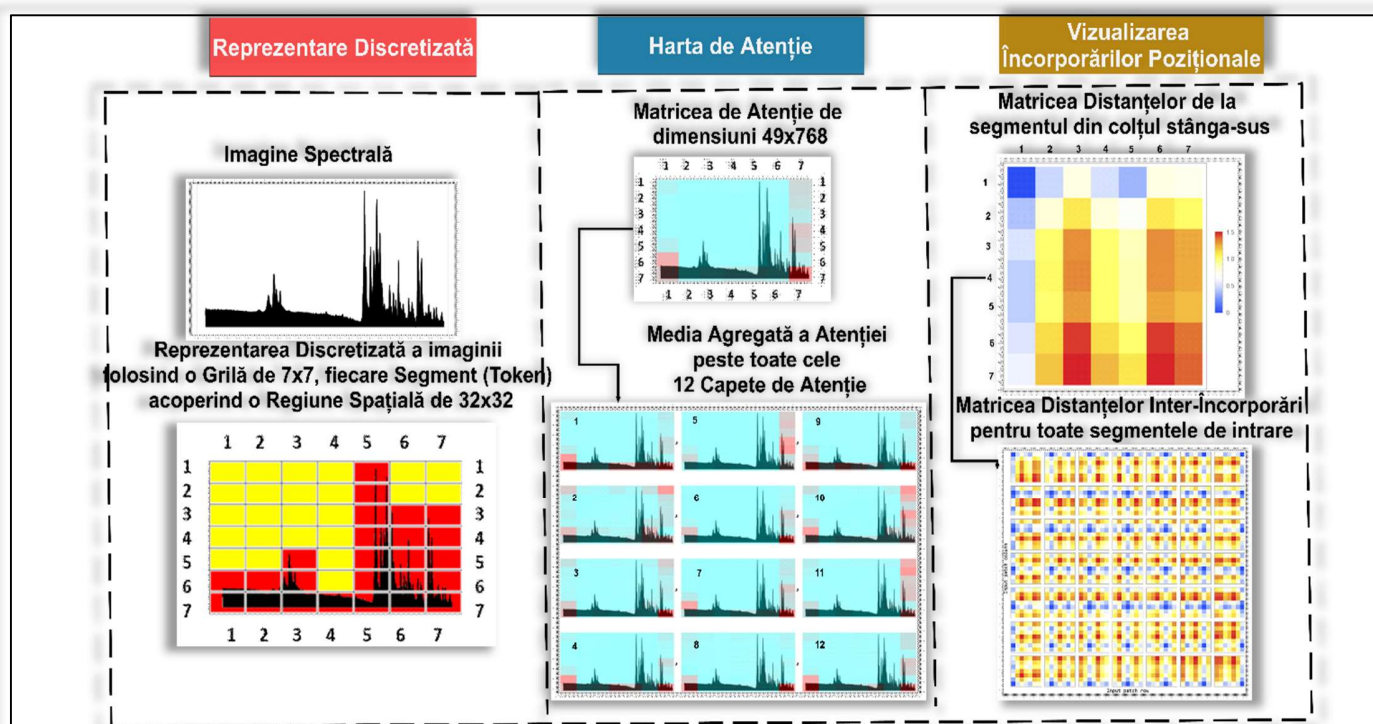


Figura 4.24 Mecanismele cheie de procesare a imaginilor spectrale în modelul *matDETECT_VisionTransformer* DCNN: Reprezentarea discretizată, Încorporarea pozițională, Matricea de Atenție și Matricea distanțelor față de segmentul din colțul stânga-sus.

Aceste componente demonstrează capacitatea modelului *matDETECT_VisionTransformer* DCNN de a transforma spațiul tradițional al imaginilor spectrale într-o formă susceptibilă la procesări

secvențiale, similar procesării limbajului, evidențiind astfel versatilitatea și eficiența arhitecturilor bazate pe *Transformer* pentru identificarea cu precizie a canabinoidelor sintetice JWH și a canabinoidelor sintetice non JWH dar și pentru alte sarcini extinse din domeniul viziunii computerizate.

❖ Componente arhitecturale esențiale

În Figura 4.25 este ilustrată o vizualizare integrată a arhitecturii modelului DCNN, detaliind componentele fundamentale și fluxul complex al procesării datelor prin diversele module neuronale. Fiecare etapă a procesului este prezentată schematic, evidențiind structura și parametrii specifici fiecărui modul. Arhitectura acestui model este compusă din multiple componente esențiale, fiecare având un rol bine definit în transformarea și prelucrarea datelor vizuale în predicții precise. Începând cu etapa de preprocesare a datelor, imaginile sunt inițial încărcate și segmentate în unități mai mici, denumite *patch-uri*, care sunt ulterior convertite într-o secvență de *embedding-uri*. Acestea trec printr-un proces riguros de encoding și normalizare prin intermediul unor module specializate, menite să optimizeze datele pentru faza finală de clasificare. După parcurgerea acestor etape, modelul produce predicția de clasă, reflectând o evaluare precisă bazată pe analiza profundă a caracteristicilor vizuale extrase. Această structură integrată subliniază complexitatea și eficiența arhitecturii, evidențiind modul în care fiecare componentă contribuie la performanța generală a modelului.

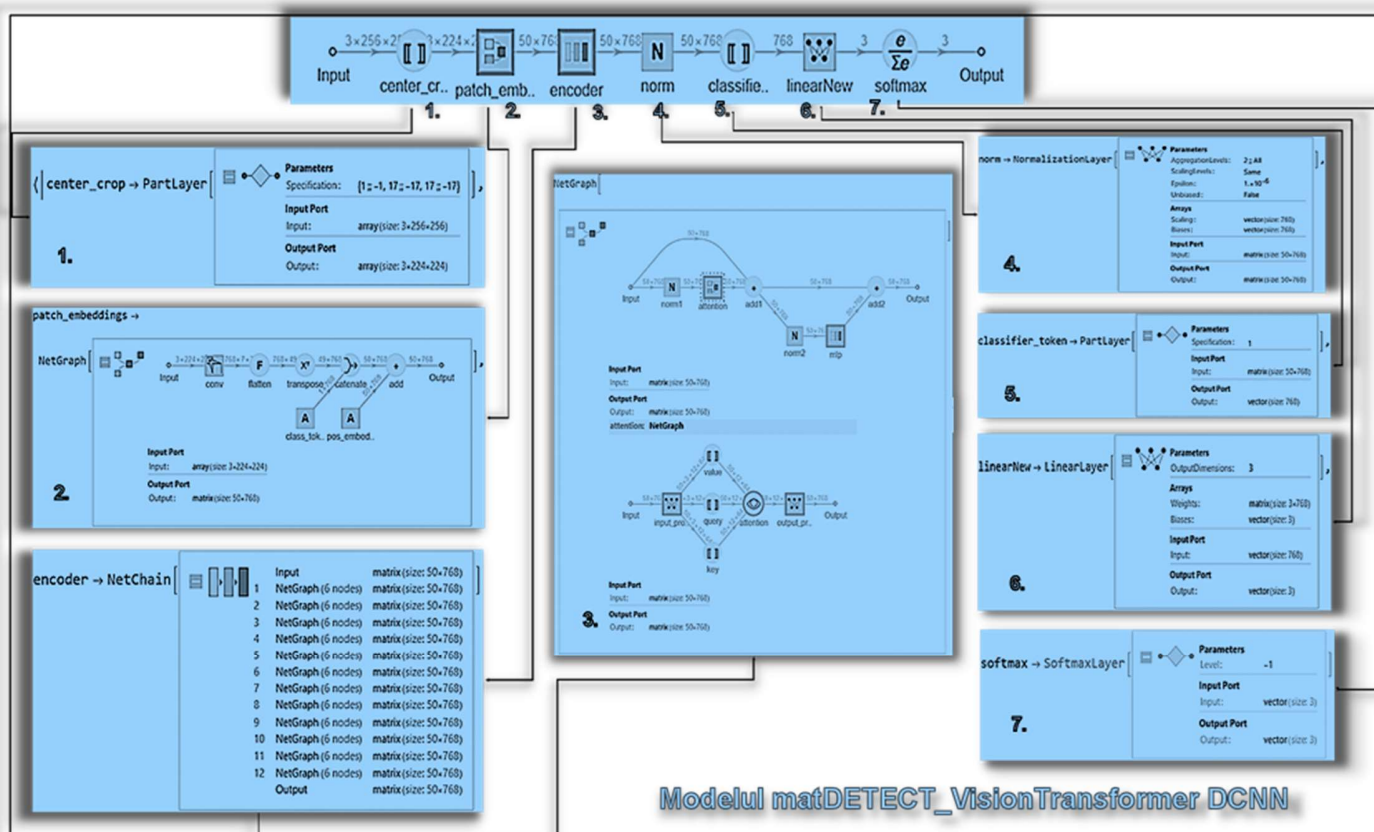


Figura 4.25 Arhitectura integrată a modelului *matDETECT_VisionTransformer* DCNN, cu detalii privind cele 168 de straturi, 152 de tablouri, 87.457.539 de parametri și o dimensiune totală a datelor de 349,83 Mb.

Configurația modelului cuprinde un total de 168 de straturi, 152 de tablouri, 87.457.539 de parametri și o dimensiune totală a datelor de 349,83 Mb. Figura 4.31 ilustrează procesul metodologic de dezvoltare a arhitecturii modelului *matDETECT_VisionTransformer* DCNN, evidențiind procesul de ablație a componentelor, urmat de adăugarea straturilor și optimizarea finală a structurii rețelei

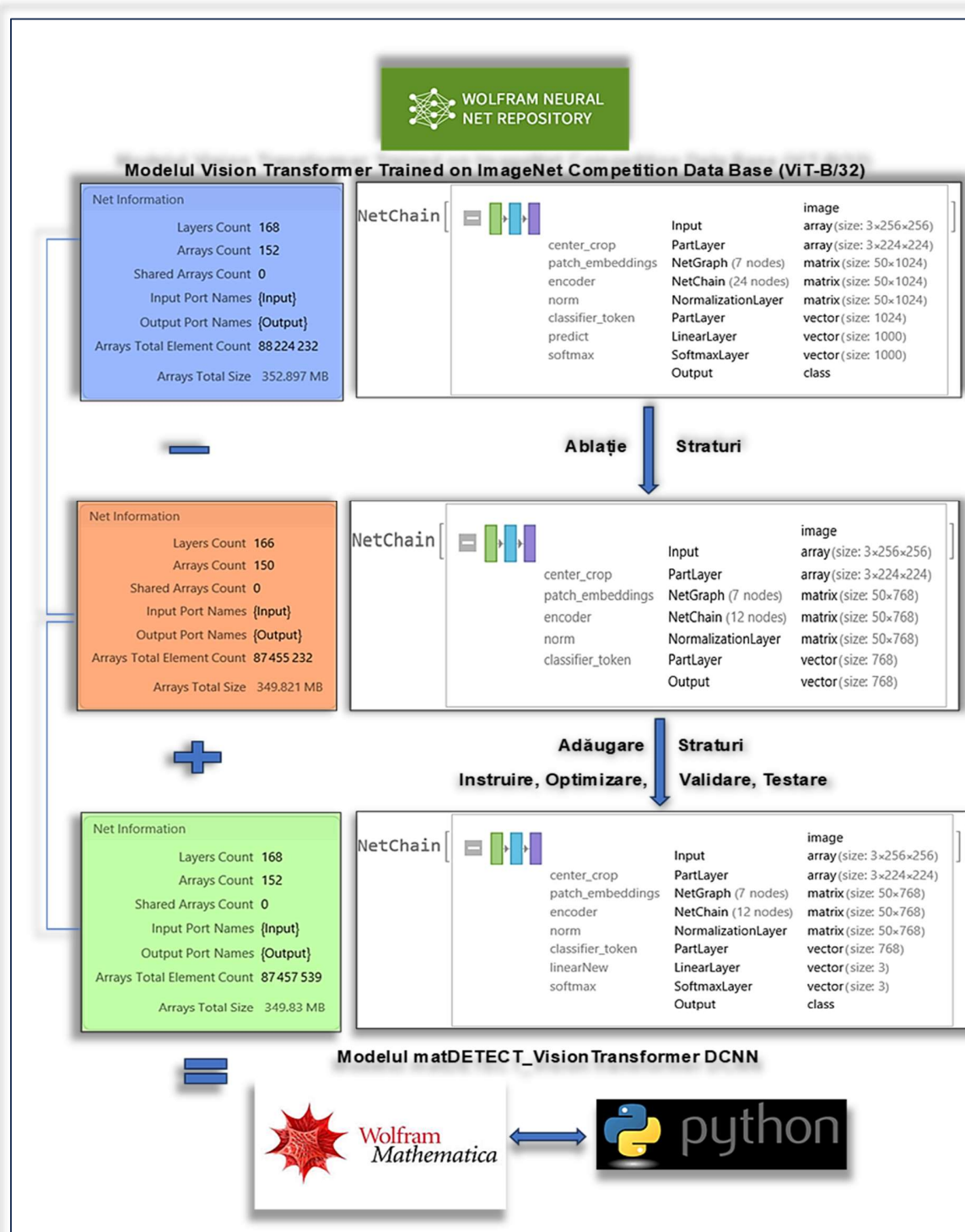


Figura 4.31 Procesul de dezvoltare a arhitecturii modelului *matDETECT_VisionTransformer* DCNN: Faza de ablație a elementelor, procesul de adăugare de componente și configurarea finală a structurii rețelei.

La baza acestui demers s-a aflat modelul *Vision Transformer (ViT-B/32)*, antrenat pe baza de date *ImageNet Competition Data*. Acest model cuprinde modulele *center_crop*, *patch_embeddings*, *encoder*, *norm*, *classifier_token* și *linearLayer*, având 168 de straturi și 152 de matrici (tablouri), însumând 88.224.322 de parametri și ocupând o dimensiune totală de 352,897 MB. *ViT-B/32* utilizează o arhitectură standard pentru *Vision Transformers*, integrând operații precum *patch_embedding*, *positional encoding* și *multi-head self-attention*, straturile fiind dispuse secvențial pentru a transforma imaginile în reprezentări vectoriale potrivite pentru sarcini complexe de clasificare.

Etapă de ablație a implicat eliminarea unor elemente specifice incluzând componentele *predict* și *softmax* supraspecializate pentru setul de date *ImageNet*, acestea nefiind necesare noului context aplicativ, respectiv identificarea și clasificarea cabinoidelor sintetice și a altor substanțe de abuz. Această reducere a complexității a avut ca scop simplificarea modelului și reducerea cerințelor computaționale, fără a compromite semnificativ performanța, rezultând un model intermediar cu 166 de straturi și 150 de module, numărul total de parametri fiind de 87.455.232 și dimensiunea modelului de 349,821 Mb.

Consecutiv fazei de ablație, procesul de dezvoltare a continuat prin adăugarea și optimizarea unor straturi suplimentare noi, conducând la versiunea finală a modelului DCNN. Acest model final a fost configurat cu 168 de straturi și 152 de matrici (tablouri), având un număr total de parametri de 87.457.539 și o dimensiune de 349,83 Mb. Straturile nou adăugate au inclus stratul complet conectat și stratul softmax, asigurând astfel capacitatea modelului de a realiza eficient sarcini complexe în domeniul de interes.

Sintetizând, dezvoltarea modelului *matDETECT_VisionTransformer* DCNN evidențiază o abordare iterativă și riguroasă în adaptarea și optimizarea arhitecturilor de tip *Transformer* pentru aplicații avansate în domeniul identificării și clasificării cabinoidelor sintetice și a altor substanțe de abuz. Procesul de ablație a permis identificarea și eliminarea componentelor neesențiale, reducând dimensiunea modelului fără a renunța la performanță, în timp ce etapa de reconfigurare a straturilor a adus îmbunătățiri esențiale care au condus la un model final robust și eficient. Utilizarea platformelor *Wolfram Mathematica* și *Python* a facilitat implementarea și testarea acestui model DCNN, demonstrând succesul abordării propuse pentru dezvoltarea unor modele *Transformer* adaptate sarcinilor de viziune artificială.

II. Strategia de instruire, optimizare și evaluare

Strategia de instruire, optimizare și evaluare a modelului *matDETECT_VisionTransformer* DCNN a urmat un parcurs metodologic similar cu procedurile aplicate pentru modelul *matDETECT-FTIR* DCNN, descrise în secțiunea anterioară. Abordarea a implicat utilizarea aceleiași rigurozități și precizii în selecția seturilor de date și în ajustarea parametrilor modelului, asigurând, astfel, o comparabilitate directă între modele. Pentru acest model, cele mai bune performanțe au fost obținute prin implementarea optimizatorilor *SGD* și *ADAM*, utilizând iterativ aceleași combinații de parametri și hiperparametri detaliate anterior, demonstrând consistența și eficacitatea acestor tehnici de instruire și optimizare în cadrul experimentelor efectuate. Această strategie a permis maximizarea performanței modelului, evidențiind importanța unei abordări metodologice consistente în dezvoltarea și testarea modelelor DCNN.

III. Evaluarea performanței modelului DCNN

Analiza performanței modelului *matDETECT_VisionTransformer* DCNN pe subșutul de date de validare este detaliată în tabelele 4.14 și 4.15 și ilustrată în Figurile 4.32 – 4.36 oferind o perspectivă clară asupra capacităților sale de clasificare în funcție de clase și de seturile de date utilizat. Modelul a fost evaluat pe cele două tipuri de seturi de date: limitat și echilibrat, respectiv extins și dezechilibrat. Metricile evaluate, cum ar fi acuratețea, rata de eroare, pierderea, precizia, sensibilitatea, scorul F1 și specificitatea, oferă o imagine detaliată a performanței sale în fiecare context.

Tabelul 4.14 Statistici de instruire pentru modelul *matDETECT_VisionTransformer* DCNN pe seturi de date limitate și extinse.

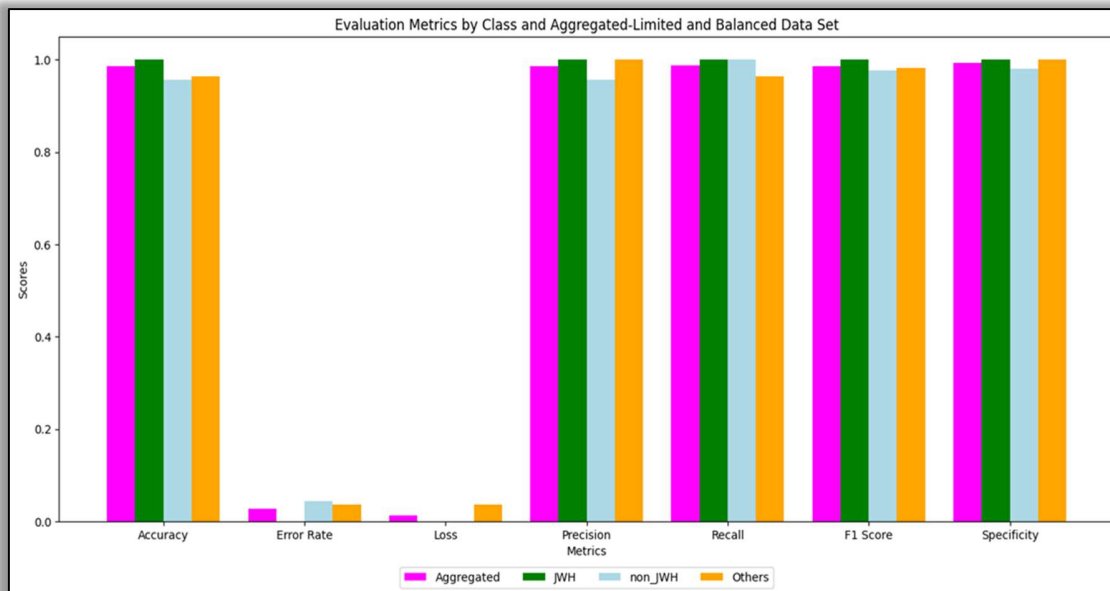
Statistici instruire matDETECT_VisionTransformer DCNN	Setul de date limitat	Setul de date extins
Loturi pe rundă (epocă)	5	298
Dimensiunea lotului	64	28
Loturi pe secundă	5,17906	4,447
Medie loturi pe secundă	5,03678	3,86913
Total loturi	150	14.900
Instanțe procesate	9.600	417.200
Instanțe instruire	300	8.340
Instanțe validare	75	2.085
Rata de învățare inițială	0,001	0,001
Rata de învățare finală	0,000631194	0,001
Medie instanțe pe secundă	322.354	108,336
Total runde (epoci)	30	50
Timp total de antrenament (min)	20	64

Tabelul 4.15 Metrice agregate în subsetul de date de validare pentru modelul *matDETECT_VisionTransformer* DCNN.

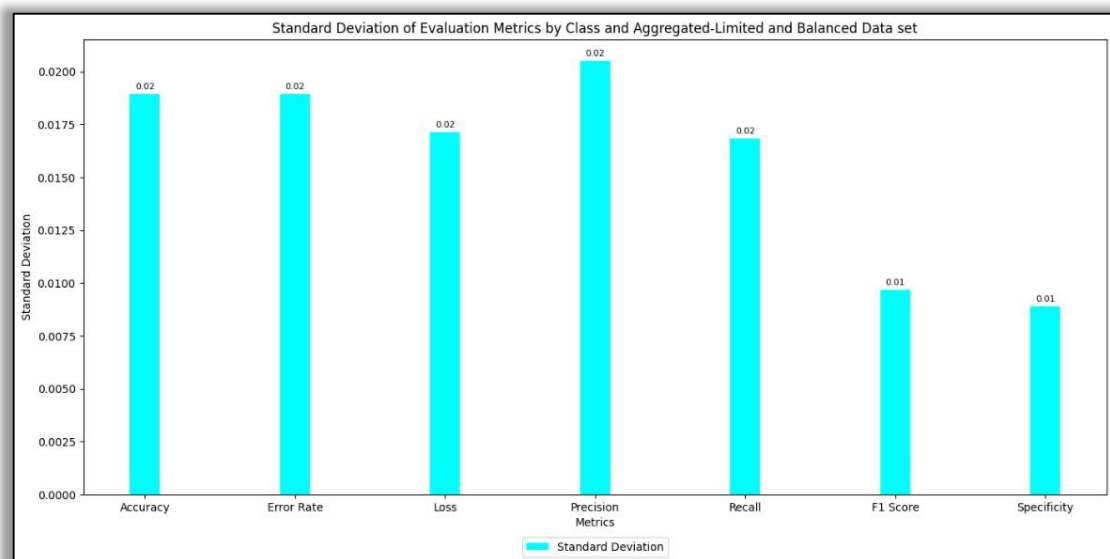
Modelul matDETECT_VisionTransformer DCNN				
Set de date limitat și echilibrat Subset de date de validare				
Metrică (Metrics)	Clasa 1 (JWH)	Clasa 2 (non_JWH)	Clasa 3 (Others)	Agregată (Aggregated)
Acuratețe (Accuracy)	1,0000	0,9565	0,9643	0,9867 ± 0,0189
Rată de Eroare (Error Rate)	0,0000	0,0435	0,0357	0,0264 ± 0,0189
Pierdere (Loss)	0,0000	0,0000	0,0364	0,0121 ± 0,0171
Precizie (Precision)	1,0000	0,9565	1,0000	0,9855 ± 0,0205
Senzitivitate (Recall)	1,0000	1,0000	0,9643	0,9881 ± 0,0168
Scor F1 (F1 Score)	1,0000	0,9778	0,9818	0,9865 ± 0,0097
Specificitate (Specificity)	1,0000	0,9811	1,0000	0,9937 ± 0,0089
Set de date extins și dezechilibrat Subset de date de validare				
Metrică (Metrics)	Clasa 1 (JWH)	Clasa 2 (non_JWH)	Clasa 3 (Others)	Agregată (Aggregated)
Acuratețe (Accuracy)	0,8125	0,6667	0,9901	0,9899 ± 0,1323
Rată de Eroare (Error Rate)	0,1875	0,3333	0,0099	0,1769 ± 0,1323
Pierdere (Loss)	0,1759	0,2955	0,0025	0,1579 ± 0,1203
Precizie (Precision)	0,9630	0,8649	0,9926	0,9401 ± 0,0546
Senzitivitate (Recall)	0,8387	0,7442	0,9975	0,8601 ± 0,1045
Scor F1 (F1 Score)	0,8966	0,8000	0,9950	0,8972 ± 0,0796
Specificitate (Specificity)	0,9995	0,9975	0,7945	0,9305 ± 0,0962

Subsetul de date de validare

➤ Setul de date limitat și echilibrat

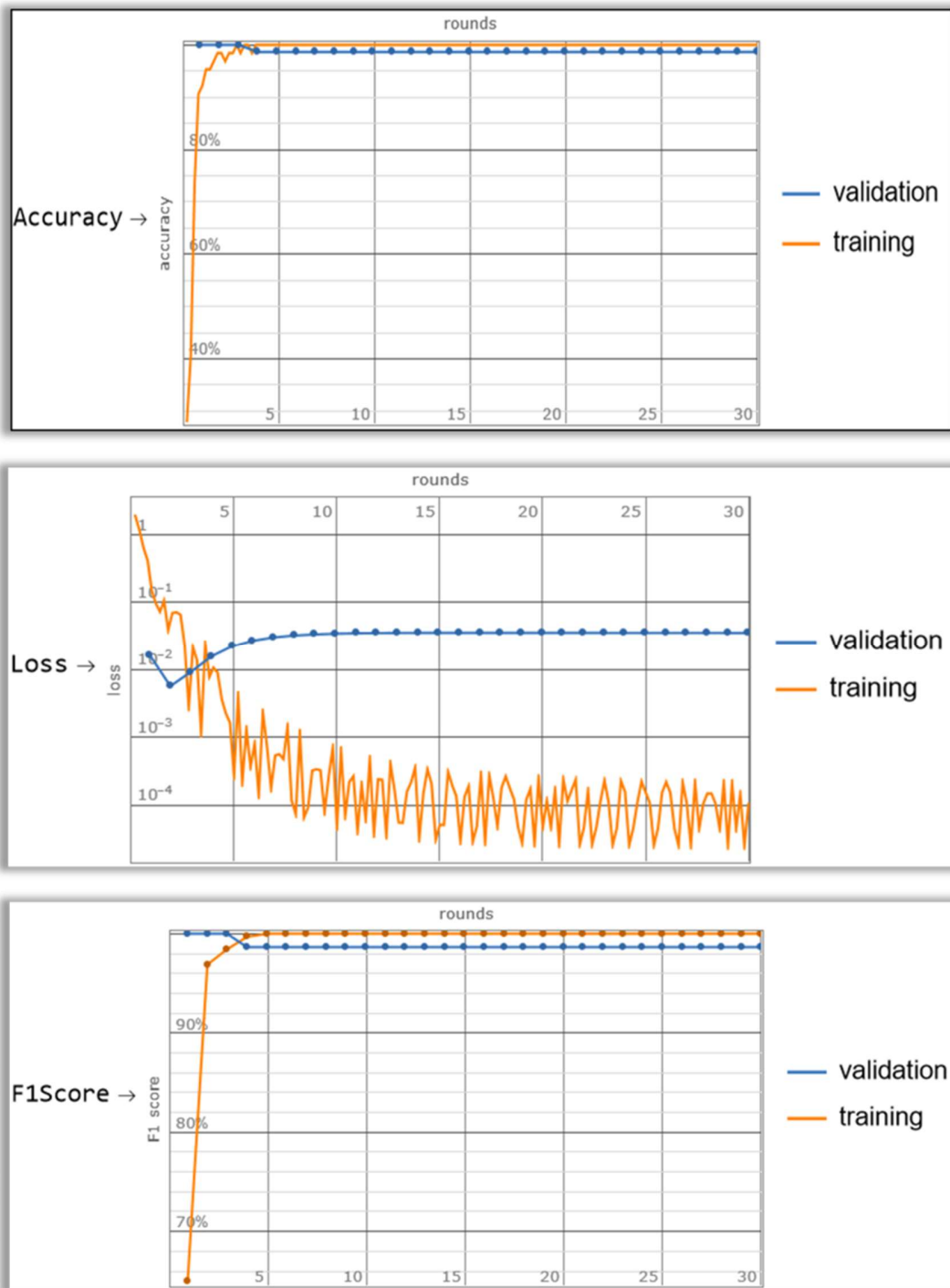


(a)

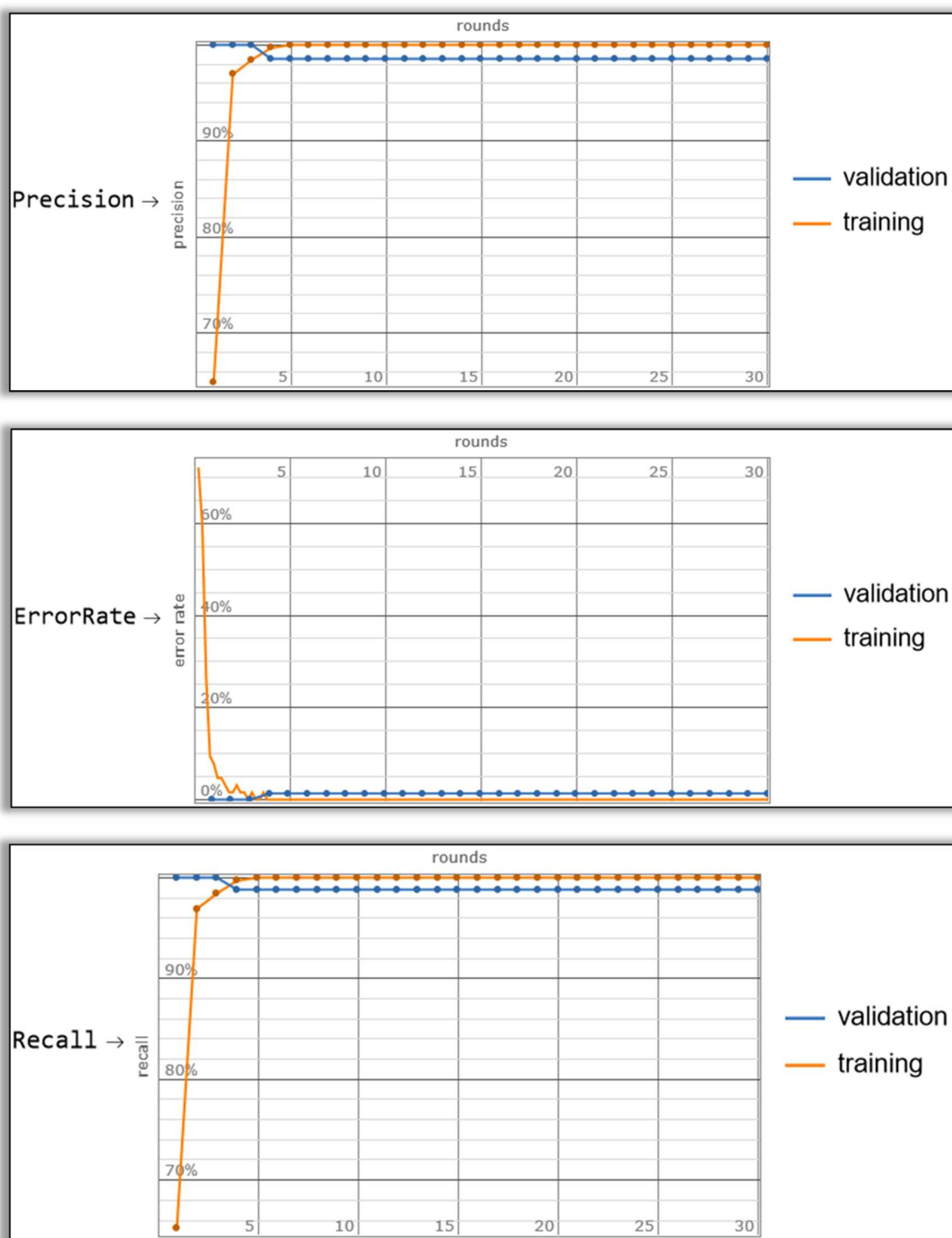


(b)

Figura 4.33 Analiza comparativă a metricilor de validare pentru un set de date limitat și echilibrat în modelul *matDETECT_VisionTransformer* DCNN: (a) pe clase și agregate; (b) în funcție de deviația standard.



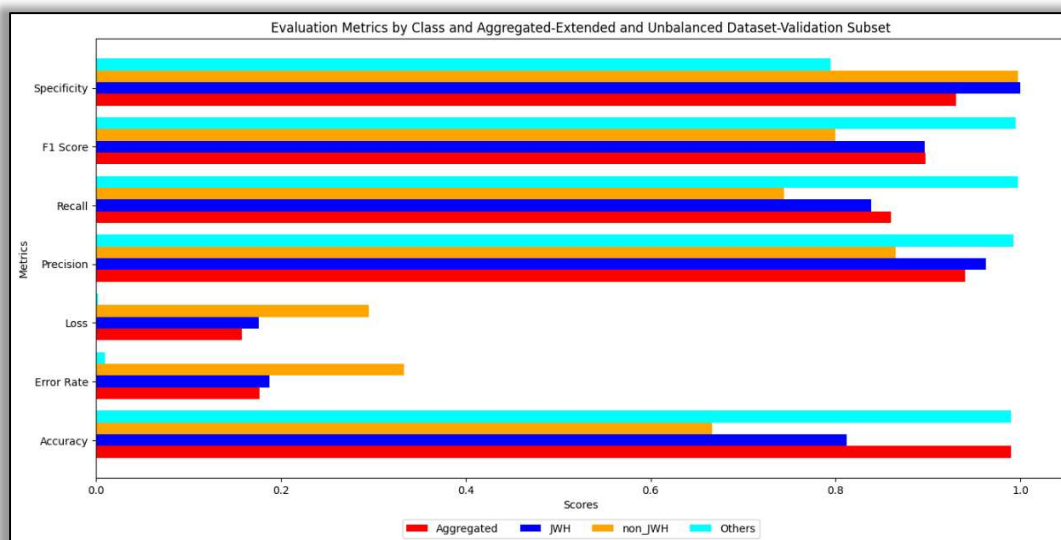
(a)



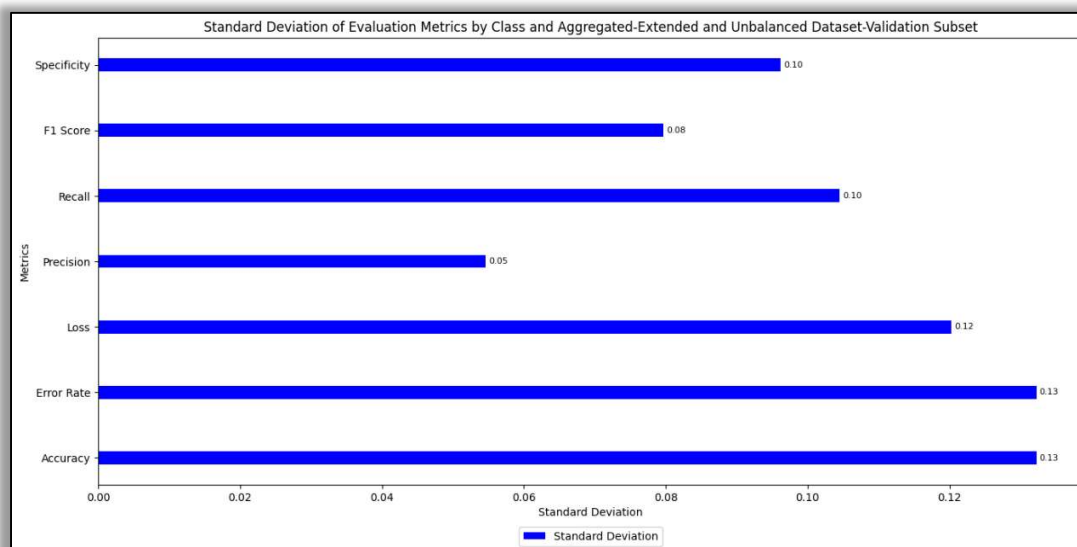
(b)

Figura 4.34 Analiza comparativă a metricilor de instruire și validare pe epoci, pentru un set de date limitat și echilibrat în modelul *matDETECT_VisionTransformer* DCNN: (a) Accuracy, Loss, F1 Score; (b) Precision, Error Rate, Recall.

➤ Setul de date extins și dezechilibrat

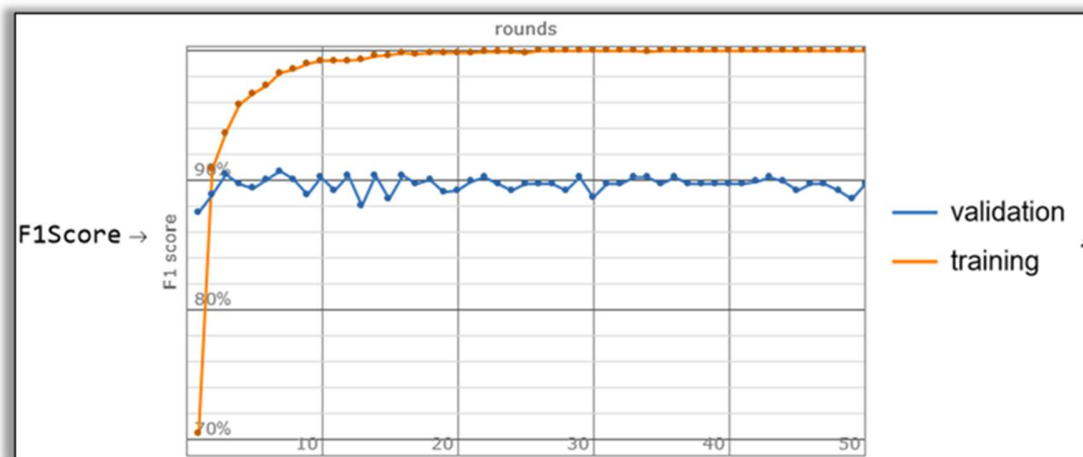
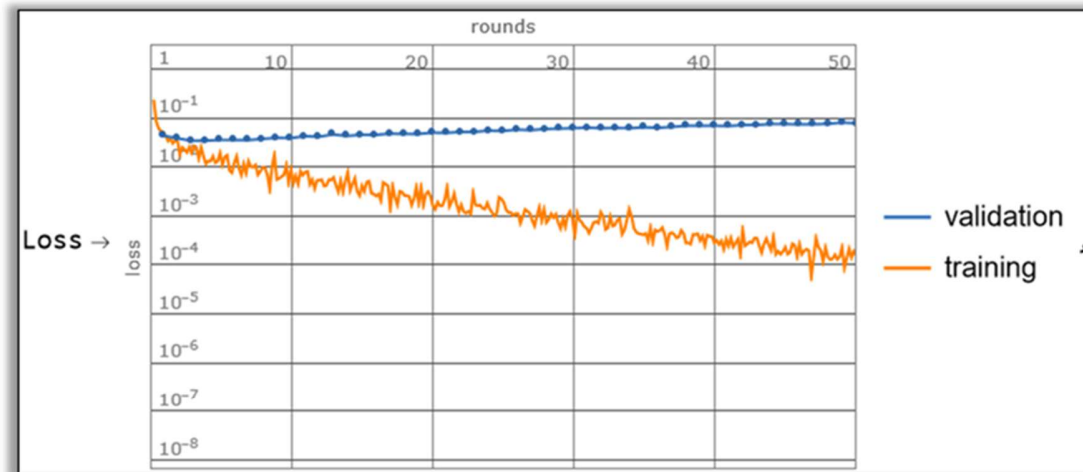
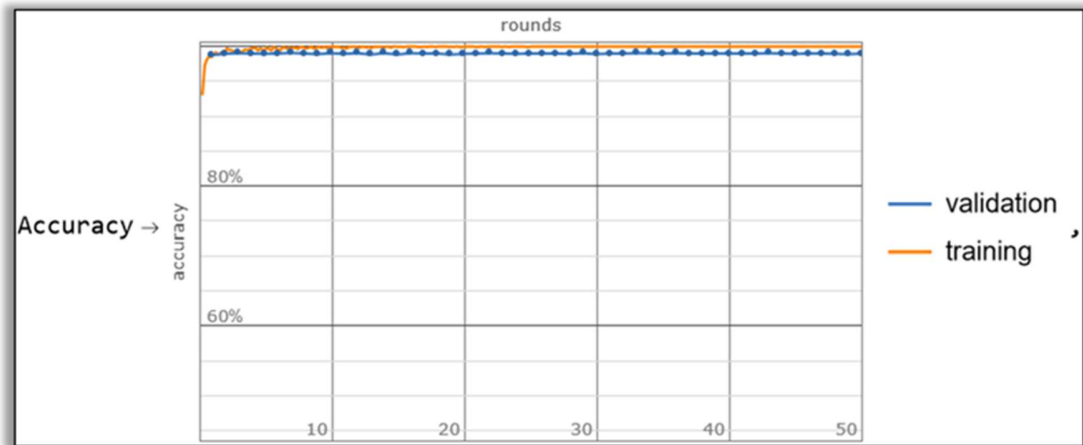


(a)

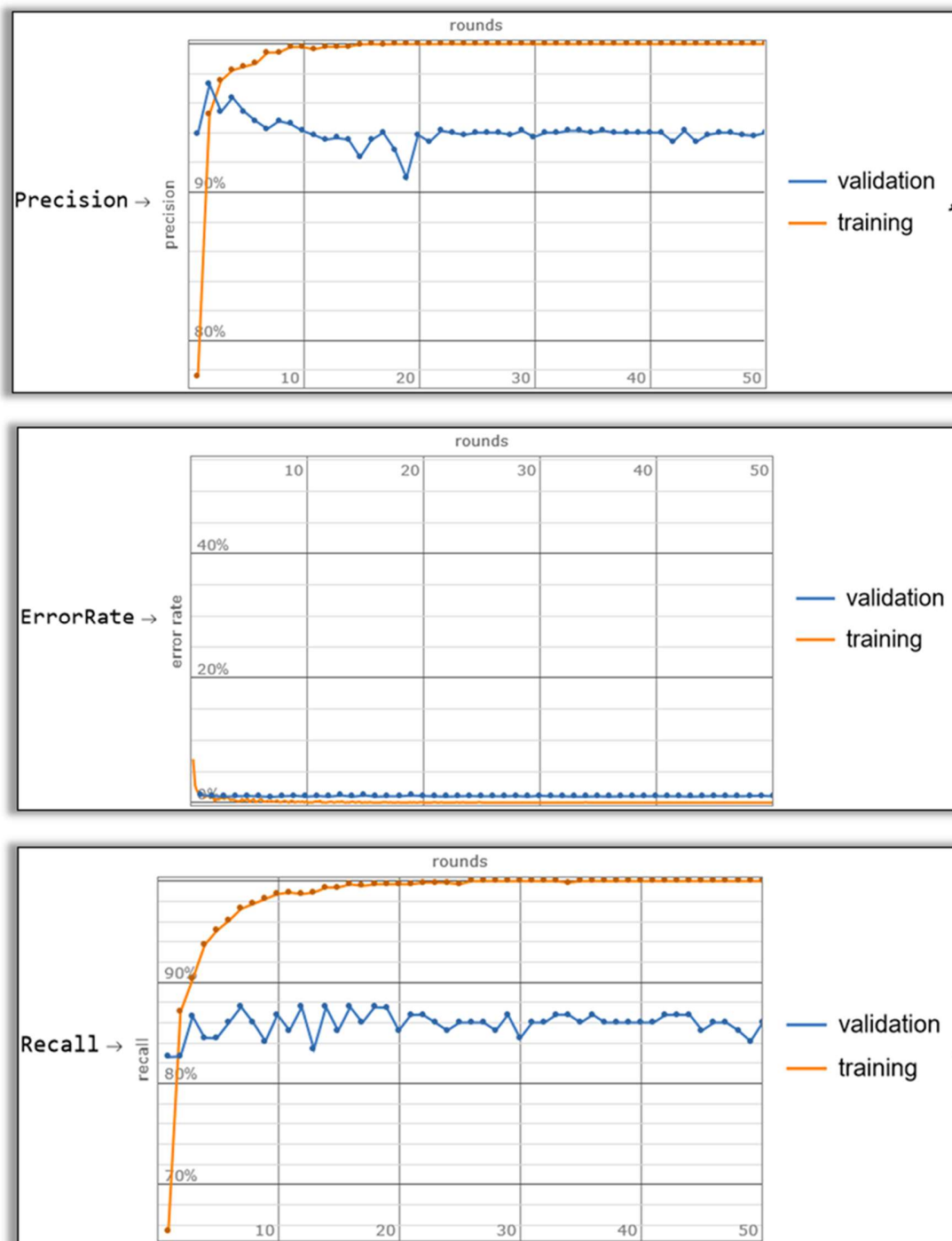


(b)

Figura 4.35 Analiza comparativă a metricilor de validare pentru un set de date extins și dezechilibrat în modelul *matDETECT_VisionTransformer* DCNN: (a) pe clase și agregate; (b) în funcție de deviația standard.



(a)



(b)

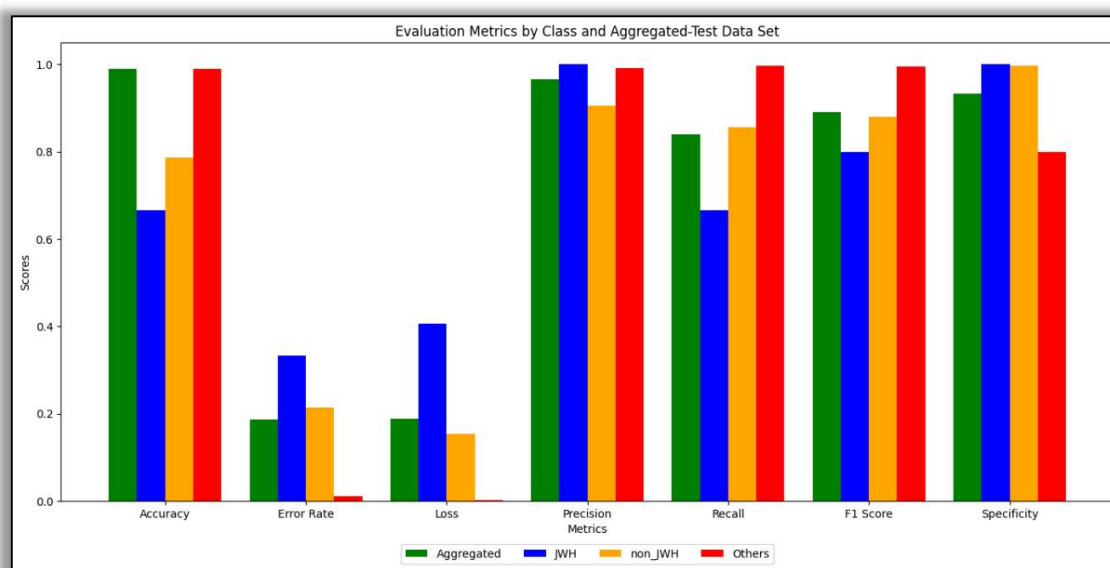
Figura 4.36 Analiza comparativă a metricilor de instruire și validare pe epoci, pentru un set de date extins și dezechilibrat în modelul *matDETECT_VisionTransformer* DCNN: (a) *Accuracy, Loss, F1 Score*; (b) *Precision, Error Rate, Recall*.

Subsetul de date de testare

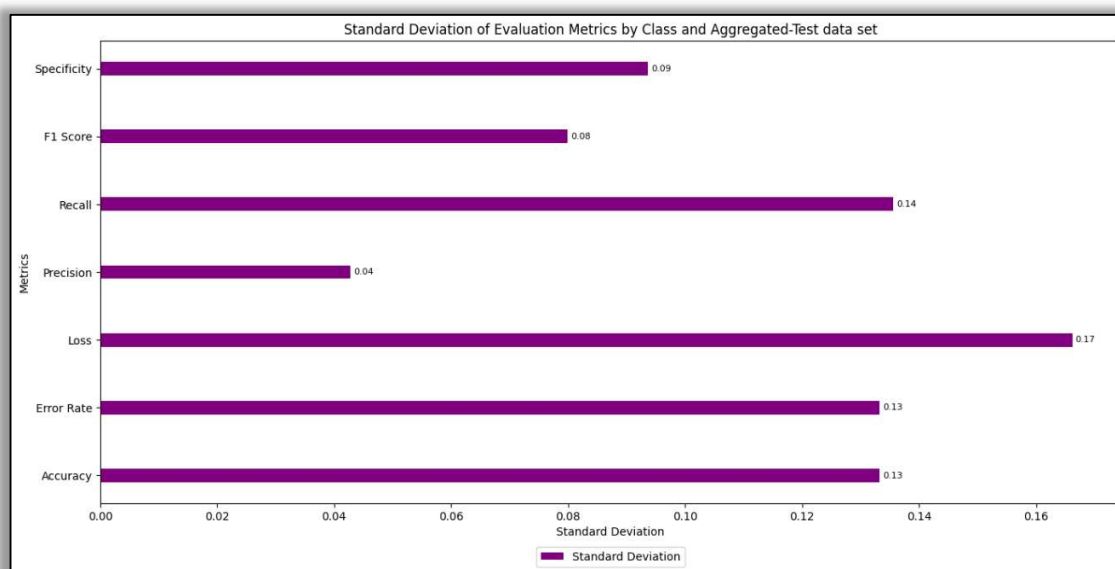
Analiza performanței modelului *matDETECT_VisionTransformer* DCNN pe subsetul de date de testare evidențiată în Tabelul 4.16 și prezentată grafic în Figura 4.38 relevă o variabilitate notabilă a capacității modelului de a clasifica corect probele, în funcție de clasa considerată. Pe baza metricilor furnizate, se poate observa că modelul demonstrează o performanță robustă în ceea ce privește clasificarea corectă a clasei 3 (Others) și cu unele dificultăți în gestionarea claselor 1 (JWH) și 2 (non_JWH).

Tabelul 4.16 Metrici agregate pe setul de date de testare pentru modelul *matDETECT_VisionTransformer* DCNN.

matDETECT_VisionTransformer DCNN				
Subset de date de testare				
Metrică (Metrics)	Clasa 1 (JWH)	Clasa 2 (non_JWH)	Clasa 3 (Others)	Agregată (Aggregated)
Acuratețe (Accuracy)	0,6667	0,7869	0,9896	0,9899 ± 0,1333
Rată de Eroare (Error Rate)	0,3333	0,2131	0,0104	0,1856 ± 0,1333
Pierdere (Loss)	0,4055	0,1542	0,0025	0,1874 ± 0,1662
Precizie (Precision)	1,0000	0,9057	0,9921	0,9659 ± 0,0427
Senzitivitate (Recall)	0,6667	0,8571	0,9975	0,8404 ± 0,1356
Scor F1 (F1 Score)	0,8000	0,8807	0,9948	0,8918 ± 0,0799
Specificitate (Specificity)	1,0000	0,9975	0,8000	0,9325 ± 0,0937



(a)



(b)

Figura 4.38 Analiza comparativă a metricilor de testare agregate în modelul *matDETECT_VisionTransformer* DCNN: (a) *Accuracy, Error Rate, Loss, Precision, Recall, F1 Score, Specificity*; (b) deviația standard a metricilor, evaluată pe clase și agregată.

4.4.4 Modelul *pyDETECT_InceptionV3* DCNN de clasificare derivat din arhitectura preantrenată a modelului *GoogLeNet Inception V3*

Modelul *Inception V3*, dezvoltat de Christian Szegedy și echipa sa de la Google, reprezintă o etapă avansată în evoluția arhitecturilor de Rețele Neuronale Convoluționale. Acesta a fost antrenat utilizând setul de date ImageNet, care cuprinde peste 14 milioane de imagini împărțite în 1000 de categorii diferite. *Inception V3* este conceput pentru a optimiza atât eficiența computațională cât și precizia clasificării imaginilor, adresând astfel unele dintre cele mai stringente provocări din domeniul vizualizării computerizate. Structura modelului *Inception V3* se distinge prin implementarea modulară a diferitelor tipuri de straturi convoluționale. Inovația principală o constituie modulele *Inception*, care permit procesarea paralelă a informațiilor utilizând *kernel-uri* de dimensiuni variate (de la 1x1 la 5x5) și straturi de *pooling*. Aceasta permite extracția eficientă a caracteristicilor la diferite scale spațiale, facilitând o mai bună adaptabilitate la varietatea de forme și texturi întâlnite în imagini. În plus, modelul utilizează factorizarea convoluțiilor, o tehnică prin care convoluțiile mai mari sunt descompuse în secvențe de convoluții mai mici, reducând astfel numărul total de parametri și îmbunătățind eficiența calculului. Funcția de activare utilizată în cadrul modelului *Inception V3* este *ReLU* (eng., *Rectified Linear Unit*), selectată pentru capacitatea de accelerare a convergenței algoritmului de antrenament prin ameliorarea problemei dispariției gradientului. Modelul implementează de asemenea metode de regularizare, cum ar fi *dropout* și normalizarea pe *batch-uri*, pentru a preveni supraajustarea și pentru a îmbunătăți generalizabilitatea modelului în scenarii nevăzute.

Motivarea alegerii modelului *Inception V3* pentru etapa experimentală a dezvoltării unor modele DCNN de identificare și recunoaștere a identității de clasă a canabinoidelor sintetice și a altor substanțe de abuz bazate pe sisteme preantrenate, rezidă în următoarele aspecte:

- Preantrenare profundă: *Inception V3*, antrenat pe setul de date *ImageNet*, are capacitatea de a recunoaște și de a diferenția între mii de clase diferite de obiecte. Această „cunoaștere”

extensivă și profundă face ca modelul să fie un punct de plecare excelent pentru multe aplicații specifice care nu dispun de cantități mari de date de instruire.

- *Fine-tuning* eficient: Arhitectura modelului permite ajustări la nivelurile superioare ale rețelei pentru a se potrivi cu particularitățile unui nou set de date specific domeniului de aplicare. Aceasta presupune că, în loc să antreneze întreaga rețea, se pot reantrena doar ultimele straturi ale modelului, economisind astfel timp și resurse computaționale. Acest proces este important în *transfer learning*, unde modelul inițializat cu cunoștințe generale este ajustat pentru a performa bine pe sarcini specifice.
- Generalizare robustă: Modelul servește ca o bază solidă pentru prototipare rapidă și iterații de dezvoltare, reducând semnificativ barierele tehnice și costurile asociate cu antrenarea rețelelor neuronale profunde de la zero. Datorită extracției complexe de caracteristici la diverse scale și factorizării convoluțiilor, *Inception V3* este capabil să generalizeze optim când este expus la noi date. Acest lucru este important în aplicații unde datele pot varia semnificativ față de setul de date inițial (*ImageNet*), cum ar fi detectarea anomaliilor sau clasificarea avansată a imaginilor spectrale.
- Reducerea supraajustării sau suprainstruirii: Capacitatea *Inception V3* de a implementa tehnici avansate de regularizare, cum ar fi *dropout* și normalizarea pe *batch-uri*, îl face ideal pentru scenarii în care riscul de supraajustare este ridicat, cum ar fi în seturi de date mici sau foarte neuniforme (dezechilibrate).

I. Arhitectura modelului *pyDETECT_InceptionV3* DCNN

1. Modulele *Inception* și operațiile matematice implicite

În arhitectura modelului DCNN dezvoltat și evidențiat în prezenta secțiune, inovația principală constă în utilizarea modulelor *Inception V3*, care permit o procesare paralelă și eficientă a informațiilor prin utilizarea combinată a *kernel-urilor* de dimensiuni variate și a straturilor de *pooling*. Acest design permite o extracție detaliată și adaptabilă a caracteristicilor din imaginile spectrale. De asemenea, modelul derivat adoptă o abordare de factorizare a convoluțiilor, o tehnică care reduce dimensiunea calculului necesar, menținând în același timp sau chiar îmbunătățind performanța de clasificare. Modulele *Inception* permit extracția caracteristicilor la diferite nivele de granularitate, folosind pentru acest scop convoluții de diverse dimensiuni și straturi de *pooling* aplicate în paralel [485].

Alături de utilizarea convoluțiilor și factorizarea acestora, modelul DCNN derivat integrează mai multe caracteristici avansate pentru optimizarea performanței și eficienței, incluzând utilizarea unui modul de clasificare specializat pe trei clase de clasificare, normalizarea *batch-ului* și strategii de regularizare, cum ar fi *dropout-ul*. Modulele auxiliare de clasificare ale modelului inițial utilizate în etapa de preantrenare, dar eliminate din modelul destinat inferenței, au îmbunătățit instruirea prin oferirea unui feedback adițional în timpul operației de *backpropagation*.

2. Procesul de transfer learning și structura noului model DCNN derivat

Învățarea prin transfer (eng., *Transfer learning*) reprezintă o tehnică esențială în domeniul învățării automate, care permite reutilizarea unui model preantrenat pe un set de date de mari dimensiuni pentru a rezolva o sarcină specifică, de obicei cu un set de date mai mic și specializat. În acest context, modelul *Inception V3*, preantrenat pe setul de date *ImageNet*, a fost utilizat ca punct de plecare în dezvoltarea unui nou model DCNN datorită arhitecturii sale complexe și capacității de a extrage caracteristici relevante din imagini digitale spectrale. Procesul propriu-zis de *transfer learning*, a inclus ablația unor straturi și module din arhitectura inițială, urmată de adăugarea iterativă și optimizarea unor noi straturi în mediul de programare *Python*, pentru a obține un model personalizat, denumit, în acest caz, *pyDETECT_InceptionV3* DCNN.

Modelul *Inception V3*, în forma sa preantrenată pe *ImageNet*, este compus dintr-un număr de 313 straturi, incluzând un strat de intrare, 311 straturi ascunse și un strat de ieșire, cu un total de 23.851.784 de parametri. Această complexitate reflectă nu doar capacitatea sa de a gestiona imagini

dintr-o varietate de categorii, dar și eficiența sa computațională, utilizând aproximativ 90,9873 MB pentru stocarea parametrilor și având un consum de 0,0477036 GFLOPS pentru efectuarea operațiilor de convoluție și alte procese asociate. Arhitectura modelului include straturi de convoluție (94 de straturi cu 21.751.136 de parametri), normalizare (94 de straturi cu 51.648 de parametri), activare (94 straturi, fără parametri suplimentari), eșantionare (4 straturi de tip *maxPooling2D*, 9 straturi de *AveragePooling2D* și 1 strat de de tip *GlobalAveragePooling2D*, fără parametri suplimentari), concatenare (15 straturi, fără parametri) și un strat complet conectat (2.049.000 parametri), toate contribuind la extragerea caracteristicilor la multiple nivele de granularitate.

Modulele auxiliare de clasificare (eng., *auxiliary classifiers*) sunt straturi suplimentare adăugate în Rețelele Neuronale Adânci, în special în arhitecturi complexe. Aceste straturi sunt introduse la niveluri intermediare ale rețelei pentru a îmbunătăți procesul de antrenament prin oferirea unui semnal de eroare suplimentar, care ajută la ameliorarea problemei dispariției gradientului și la stabilizarea procesului de învățare. Pe de altă parte, modulul de clasificare final, prezent în modelul destinat inferenței, este singurul responsabil pentru realizarea predicției finale asupra datelor de intrare. Acest modul constă în stratul complet conectat final, urmat de un strat *softmax* care produce distribuția probabilistică asupra claselor țintă. Spre deosebire de modulele auxiliare, care sunt proiectate pentru a sprijini antrenamentul, modulul de clasificare final este esențial pentru funcționarea efectivă a modelului în timpul inferenței, oferind predicțiile finale utilizate pentru luarea deciziilor. În concluzie, modulele auxiliare servesc un rol critic în optimizarea procesului de antrenament, dar nu sunt prezente în arhitectura finală, unde doar modulul de clasificare final rămâne activ și funcțional, asigurând capacitatea modelului de a realiza sarcinile de clasificare pentru care a fost proiectat.

În arhitectura *Inception V3*, straturile de concatenare (eng., *mixed* sau *concat*) au un rol important în combinarea caracteristicilor extrase de diverse ramuri ale modulelor *Inception*, fiind utilizate pentru a combina rezultatele multiplelor ramuri convoluționale. Fiecare modul *Inception* cuprinde mai multe căi paralele (ramuri) care aplică convoluții de diferite dimensiuni (de exemplu, 1x1, 3x3, 5x5) și *pooling*. Aceste ramuri procesează datele de intrare în paralel pentru a extrage caracteristici la diverse scale spațiale. La finalul fiecărui modul, stratul *mixed* combină (concatenează) aceste caracteristici într-un singur tensor. Termenul sugerează amestecarea caracteristicilor din diferite ramuri pentru a crea o reprezentare unificată, care va fi apoi transmisă straturilor ulterioare ale rețelei. Straturile de selectare extrag o anumită parte sau secțiune din tensorul de intrare, fiind utilizate pentru a selecta și a lucra doar cu o subsecțiune specifică a datelor de intrare, fie că este vorba de un element, un set de elemente, o coloană, o linie, sau orice altă secțiune specificată din tensorul respectiv.

În procesul de *transfer learning*, o operație importantă o reprezintă ablația unor straturi și module specifice din arhitectura originală, pentru a reduce complexitatea modelului și a-l adapta mai bine la noile sarcini. În cazul modelului *Inception V3*, ablația evidențiată în Tabelul 4.17 a fost aplicată asupra straturilor superioare, care sunt cele mai specializate pentru setul de date *ImageNet*. Aceasta a implicat reducerea numărului de straturi de convoluție, normalizare și activare, precum și eliminarea stratului complet conectat destinat clasificării pe 1000 de clase din *ImageNet*.

Procesul de *fine-tuning* a fost esențial în acest context, permițând noului model DCNN să învețe caracteristicile relevante din noul set de date, ajustând în același timp parametrii straturilor păstrate din *Inception V3* pentru a preveni supraajustarea și a optimiza performanța. Ajustarea a implicat antrenarea straturilor superioare cu o rată de învățare redusă, în timp ce straturile inferioare, preantrenate pe *ImageNet*, au fost menținute relativ neschimbate pentru a conserva cunoștințele generale extrase din datele originale.

Tabelul 4.17 Analiza pe categorii de straturi a modelului preantrenat *Inception V3*, a modelului intermediar după ablația straturilor și a modelului final *pyDETECT_InceptionV3* DCNN: rezultat după adăugarea noilor straturi și după instruire, optimizare și validare.

Arhitectura inițială Inception V3 Trained on ImageNet Competition Data						
Index	Categorie Strat	Tip strat (Python)	Număr	Parametri (Conexiuni)	Mărime (Mb)	GFLOPS
0	Strat de Intrare	InputLayer	1	0	0	0
1	Straturi de Convoluție	Conv2D	94	21.751.136	82,974	0,0435023
2	Straturi de Normalizare	BatchNormalization	94	51.648	0,197021	0,000103296
3	Straturi de Activare	Activation	94	0	0	0
4	Straturi de Eșantionare Maximă	MaxPooling2D	4	0	0	0
5	Straturi de Eșantionare Medie	AveragePooling2D	9	0	0	0
6	Straturi de Concatenare	Concatenate	15	0	0	0
7	Strat de Eșantionare Medie Globală	GlobalAveragePooli ng2D	1	0	0	0
8	Straturi Complet Conectate	Dense	1	2.049.000	7,81631	0,004098
	Total		313	23.851.784	90,9873	0,0477036
Arhitectura intermediară Inception V3 după ablația straturilor						
Index	Categorie Strat	Tip strat (Python)	Număr	Parametri (Conexiuni)	Mărime (Mb)	GFLOPS
0	Strat de Intrare	InputLayer	1	0	0	0
1	Straturi de Convoluție	Conv2D	86	16.074.080	61,3177	0,0321482
2	Straturi de Normalizare	BatchNormalization	86	42.432	0,161865	8,4864E ⁻⁰⁵
3	Straturi de Activare	Activation	86	0	0	0
4	Straturi de Eșantionare Maximă	MaxPooling2D	4	0	0	0
5	Straturi de Eșantionare Medie	AveragePooling2D	9	0	0	0
6	Straturi de Concatenare	Concatenate	12	0	0	0
	Total		284	16.116.512	61,4796	0,032233
Arhitectura finală pyDETECT_InceptionV3 DCNN după adăugarea straturilor						
Index	Categorie Strat	Tip strat (Python)	Număr	Parametri (Conexiuni)	Mărime (Mb)	GFLOPS
0	Strat de Intrare	InputLayer	1	0	0	0
1	Straturi de Convoluție	Conv2D	86	16.074.080	61,3177	0,0321482
2	Straturi de Normalizare	BatchNormalization	86	42.432	0,161865	8,4864E ⁻⁰⁵
3	Straturi de Activare	Activation	86	0	0	0
4	Straturi de Eșantionare Maximă	MaxPooling2D	4	0	0	0
5	Straturi de Eșantionare Medie	AveragePooling2D	9	0	0	0
6	Straturi de Concatenare	Concatenate	12	0	0	0
7	Strat nou de Eșantionare Medie Globală	GlobalAveragePooli ng2D	1	0	0	0
8	Straturi noi Complet Conectate	Dense	2	200.707	0,765636	0,000401414
	Total		287	16.317.219	62,2453	0,0326344

3. Strategia de instruire, optimizare și evaluare a modelului DCNN

Metodologia de instruire, optimizare și evaluare a modelului *pyDETECT_InceptionV3* DCNN a fost aliniată în mod coerent cu procedurile aplicate modelelor DCNN, descrise în secțiunile anterioare. Această abordare a menținut o rigurozitate și o precizie consecventă în selectarea seturilor de date și în ajustarea parametrilor modelului, garantând o comparabilitate directă între performanțele diferitelor modele. În cazul modelului *pyDETECT_InceptionV3* DCNN, optimizatorul *ADAM* a fost utilizat cu succes, aplicând aceleași combinații de parametri și hiperparametri specificați anterior.

4. Evaluarea performanței

Analiza performanței modelului *pyDETECT_InceptionV3* DCNN pe subșutul de date de validare prezentată în Tabelele 4.19 și 4.20 și ilustrată în Figurile 4.41 și 4.42 oferă o imagine detaliată a capacității acestui model de a clasifica corect probele din diverse clase, în condiții de date limitate și echilibrate, precum și în contextul unui set de date extins și dezzechilibrat. Performanța modelului este evaluată prin mai multe metrici cheie, inclusiv acuratețe, rata de eroare, pierdere, precizie, senzitivitate, scorul F1 și specificitate, fiecare dintre acestea oferind perspective diferite asupra calității predicțiilor modelului.

Tabelul 4.19 Statistici de antrenament pentru modelul *pyDETECT_InceptionV3* DCNN pe seturi de date limitate și extinse.

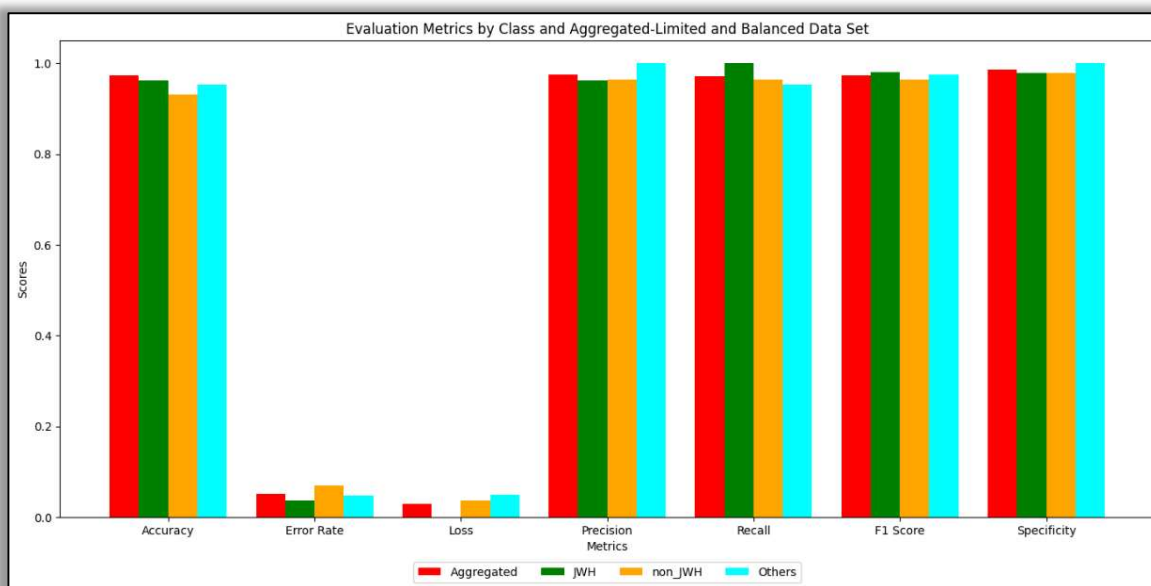
Statistici instruire <i>pyDETECT_InceptionV3</i> DCNN	Setul de date limitat	Setul de date extinse
Loturi pe rundă (epocă)	5	114
Dimensiunea lotului	64	44
Loturi pe secundă	5,7198	0,574997
Medie loturi pe secundă	5,09388	0,426734
Total loturi	2.250	11.200
Instanțe procesate	9.000	313.600
Instanțe instruire	300	6.255
Instanțe validare	75	2.085
Rata de învățare inițială	0,001	0,001
Rata de învățare finală	0,000397128	0,001
Medie instanțe pe secundă	322,354	18,7763
Total runde (epoci)	30	50
Timp total de antrenament (min)	10	60

Tabelul 4.20 Metrici agregate în subșutul de date de validare pentru modelul *pyDETECT_InceptionV3* DCNN.

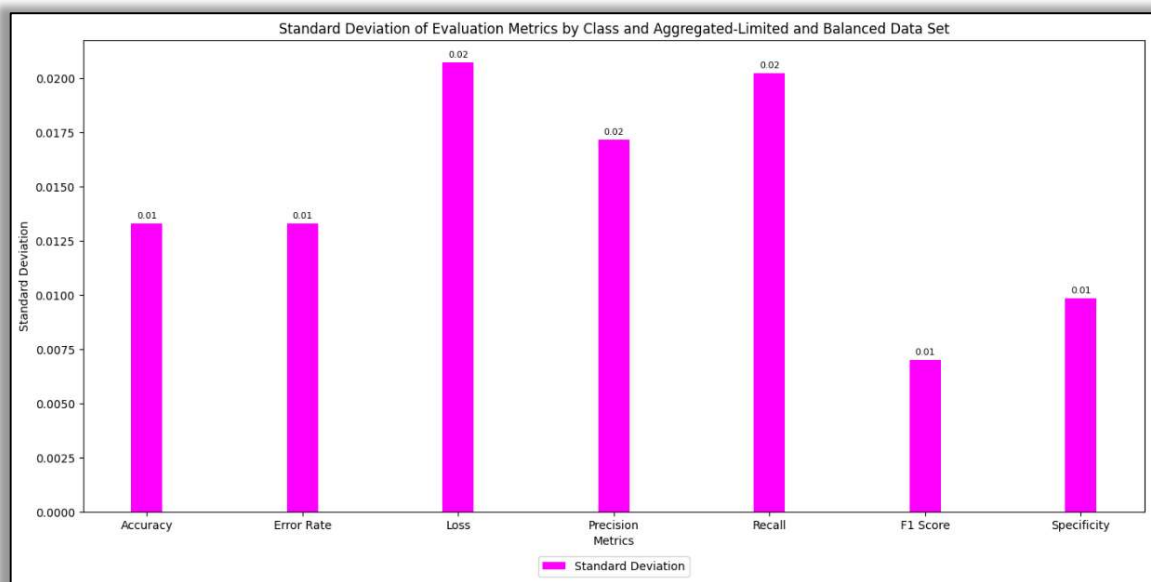
Modelul <i>pyDETECT_InceptionV3</i> DCNN				
Set de date limitat și echilibrat				
Subșutul de date de validare				
Metrică (Metrics)	Clasa 1 (JWH)	Clasa 2 (non_JWH)	Clasa 3 (Others)	Agregată (Aggregated)
Acuratețe (Accuracy)	0,9630	0,9310	0,9524	0,9733 ± 0,0133
Rată de Eroare (Error Rate)	0,0370	0,0690	0,0476	0,0512 ± 0,0133
Pierdere (Loss)	0,0000	0,0364	0,0488	0,0284 ± 0,0207
Precizie (Precision)	0,9630	0,9643	1,0000	0,9757 ± 0,0172
Senzitivitate (Recall)	1,0000	0,9643	0,9524	0,9722 ± 0,0202
Scor F1 (F1 Score)	0,9811	0,9643	0,9756	0,9737 ± 0,0070
Specificitate (Specificity)	0,9796	0,9787	1,0000	0,9861 ± 0,0098
Set de date extins și dezzechilibrat				
Subșutul de date de validare				
Metrică (Metrics)	Clasa 1 (JWH)	Clasa 2 (non_JWH)	Clasa 3 (Others)	Agregată (Aggregated)
Acuratețe (Accuracy)	0,6667	0,7619	0,9886	0,9890 ± 0,1350
Rată de Eroare (Error Rate)	0,3333	0,2381	0,0114	0,1943 ± 0,1350
Pierdere (Loss)	0,4055	0,1542	0,0035	0,1877 ± 0,1658
Precizie (Precision)	1,0000	0,8727	0,9921	0,9549 ± 0,0582
Senzitivitate (Recall)	0,6667	0,8571	0,9965	0,8401 ± 0,1352
Scor F1 (F1 Score)	0,8000	0,8649	0,9943	0,8864 ± 0,0808
Specificitate (Specificity)	1,0000	0,9965	0,8000	0,9322 ± 0,0935

Subsetul de date de validare

➤ Setul de date limitat și echilibrat



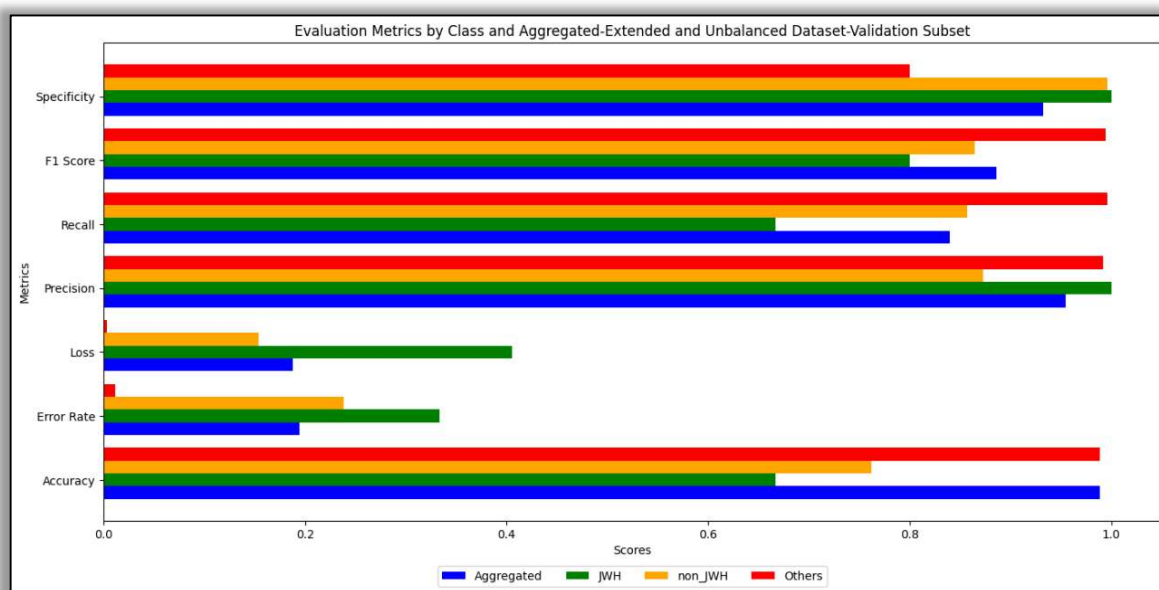
(a)



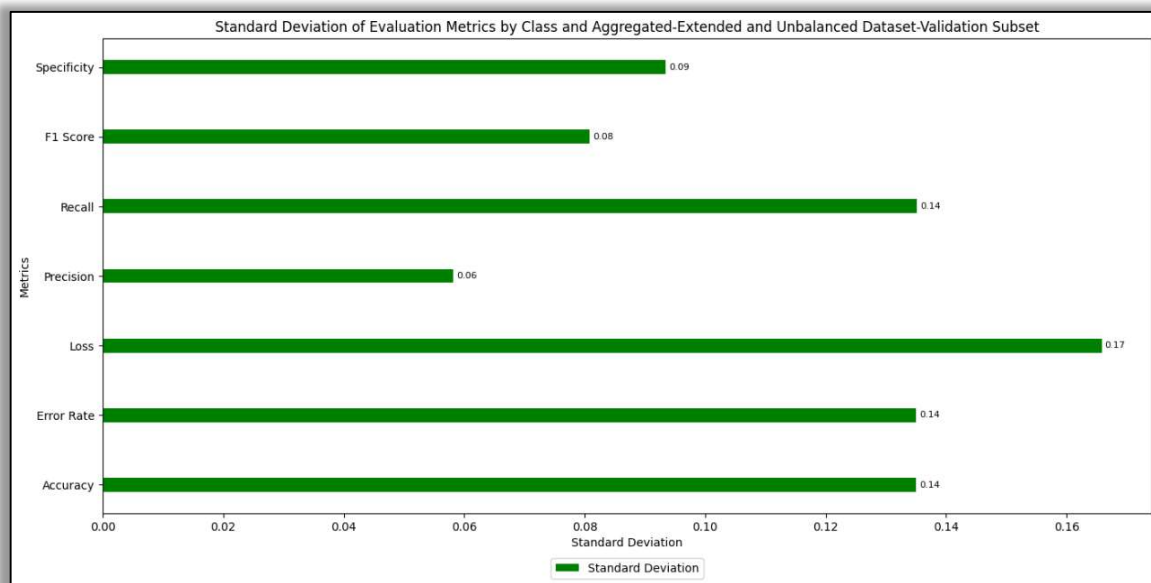
(b)

Figura 4.41 Analiza comparativă a metricilor de validare pentru un set de date limitat și echilibrat în modelul *pyDETECT_InceptionV3* DCNN: (a) pe clase și agregate; (b) în funcție de deviația standard.

➤ Setul de date extins și dezechilibrat



(a)



(b)

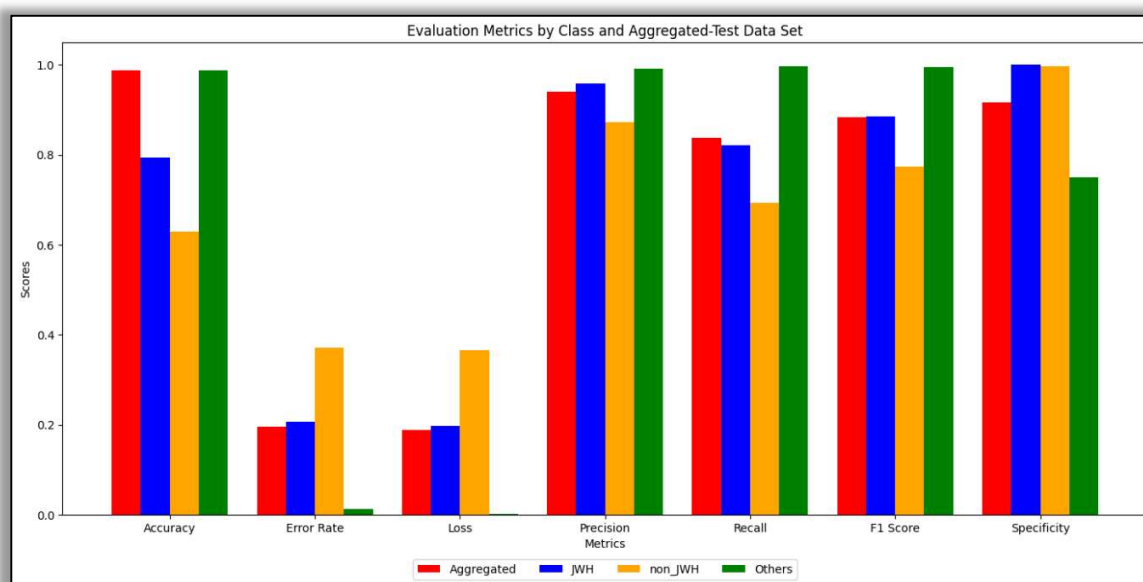
Figura 4.42 Analiza comparativă a metricilor de validare pentru un set de date extins și dezechilibrat în modelul *pyDETECT_InceptionV3* DCNN: (a) pe clase și agregate; (b) în funcție de deviația standard.

Subsetul de date de testare

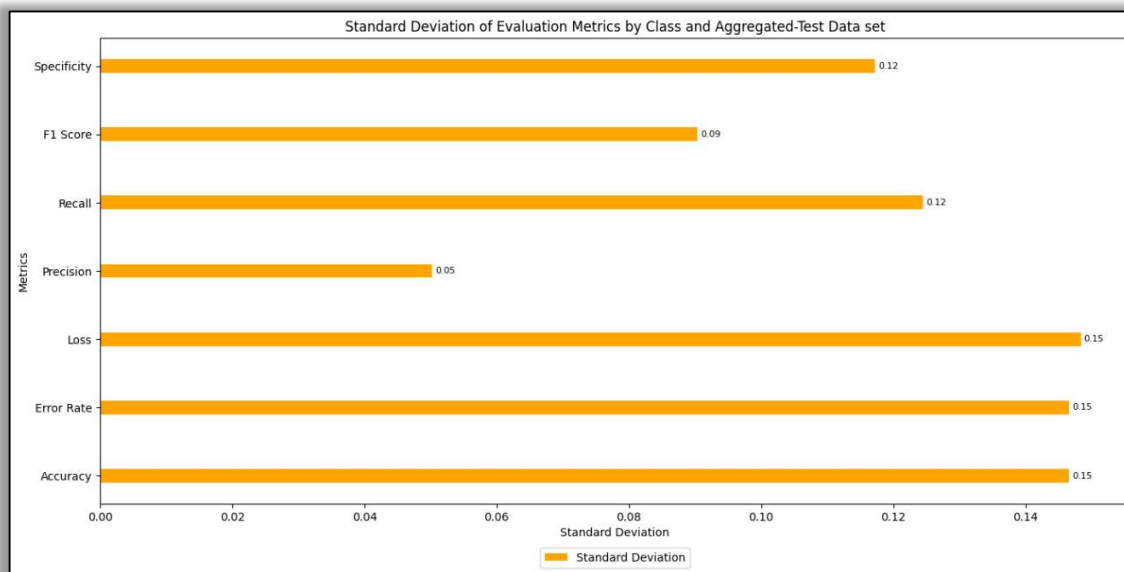
Analiza performanței modelului *pyDETECT_InceptionV3* DCNN pe setul de date de testare evidențiată în Tabelul 4.21 și Figurile 4.43 și 4.44 prezintă diverse aspecte ale eficacității sale în clasarea diferitelor tipuri de date. Modelul a fost testat pe trei clase distincte: Clasa 1 (JWH), Clasa 2 (non_JWH) și Clasa 3 (Others), iar metricile au fost calculate pentru fiecare clasă, precum și într-o manieră agregată pentru a oferi o perspectivă de ansamblu asupra performanței generale a modelului.

Tabelul 4. 21 Metrici agregate pe setul de date de testare pentru modelul *pyDETECT_InceptionV3* DCNN.

pyDETECT_InceptionV3				
Subset de date de testare				
Metrică (Metrics)	Clasa 1 (JWH)	Clasa 2 (non_JWH)	Clasa 3 (Others)	Agregată (Aggregated)
Acuratețe (Accuracy)	0,7931	0,6296	0,9882	0,9880 ± 0,1466
Rată de Eroare (Error Rate)	0,2069	0,3704	0,0118	0,1964 ± 0,1466
Pierdere (Loss)	0,1967	0,3655	0,0025	0,1882 ± 0,1483
Precizie (Precision)	0,9583	0,8718	0,9906	0,9402 ± 0,0502
Senzitivitate (Recall)	0,8214	0,6939	0,9975	0,8376 ± 0,1245
Scor F1 (F1 Score)	0,8846	0,7727	0,9940	0,8838 ± 0,0904
Specificitate (Specificity)	0,9995	0,9975	0,7500	0,9157 ± 0,1172



(a)



(b)

Figura 4.44 Analiza comparativă a metricilor de validare pentru un subset de date de testare în modelul *pyDETECT_InceptionV3* DCNN: (a) pe clase și agregate; (b) în funcție de deviația standard.

4.5 Discuții și concluzii

În acest capitol a fost prezentată o analiză detaliată a strategiilor și metodologiilor avansate utilizate pentru dezvoltarea și implementarea unor modele DCNN pentru detectarea și clasificarea cannabinoidelor sintetice, atât JWH cât și non-JWH, precum și a altor droguri de sinteză de interes criminalistic. Obiectivele principale realizate și diseminate au vizat crearea de modele eficiente, capabile să susțină eforturile de prevenire și combatere a traficului și consumului de droguri, precum și să contribuie semnificativ la investigațiile legale. Cercetarea științifică a fost orientată spre explorarea unor domenii emergente ale învățării automate și învățării profunde, utilizând seturi de date de dimensiuni variabile și diverse tehnici de optimizare, pentru a maximiza performanțele modelelor.

Prin abordarea metodologică riguroasă a învățării active prin transfer, acest studiu a demonstrat cum tehnicile de selecție activă a datelor, combinate cu strategii inovatoare de învățare prin transfer, pot îmbunătăți semnificativ eficiența procesului de instruire a modelelor DCNN. În plus, implementarea diverselor funcții de cost, algoritmi de optimizare și metode de normalizare și regularizare a permis optimizarea performanțelor modelelor, chiar și în condițiile unor seturi de date limitate și dezechilibrate. Cele patru arhitecturi propuse, bazate pe imagini spectrale ATR-FTIR, au demonstrat capacitatea de a clasifica în mod precis diferite substanțe de interes criminalistic, incluzând droguri de sinteză și medicamente utilizate abuziv.

Analiza comparativă a performanțelor celor trei modele DCNN dezvoltate: *matDETECT-FTIR*, *matDETECT_VisionTransformer*, respectiv *pyDETECT_InceptionV3*, evidențiază diferențe notabile în funcție de seturile de date utilizate (limitat și extins) și de clasele considerate (JWH, non_JWH, Others). Performanțele fiecărui model, reprezentate grafic în Figurile 4.45 - 4.55 variază semnificativ în funcție de aceste condiții experimentale, iar o examinare detaliată a metricii fiecărui model oferă perspective valoroase asupra avantajelor și limitărilor specifice fiecărui sistem.

Subsetul de date de validare, seturile de date: limitat și echilibrat, respectiv extins și dezechilibrat

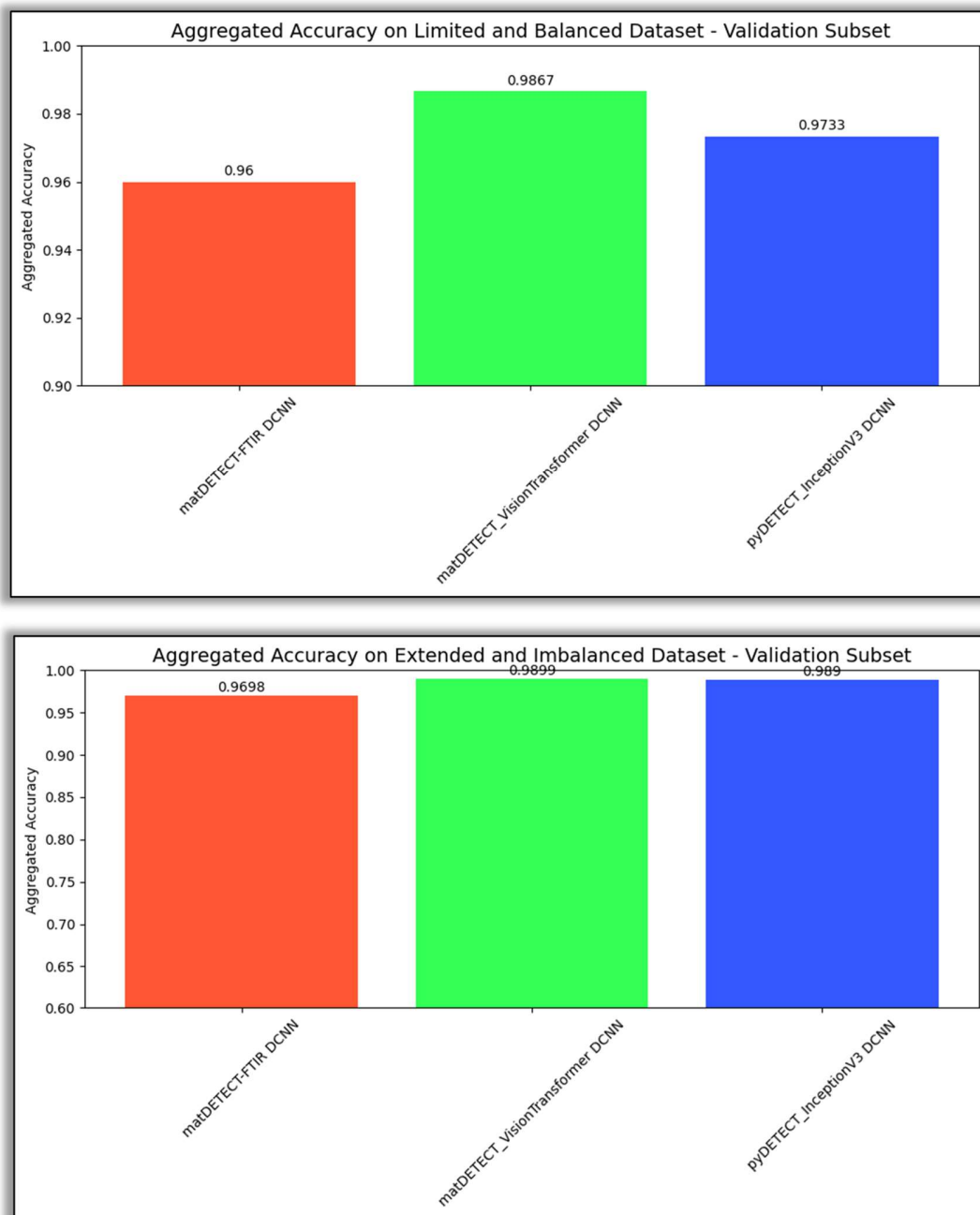


Figura 4.45 Analiza performanței agregate a modelelor DCNN dezvoltate, în funcție de Acuratețe (eng., Accuracy) pe subseturile de date de validare echilibrate (cadranul de sus), respectiv dezechilibrate (cadranul de jos).

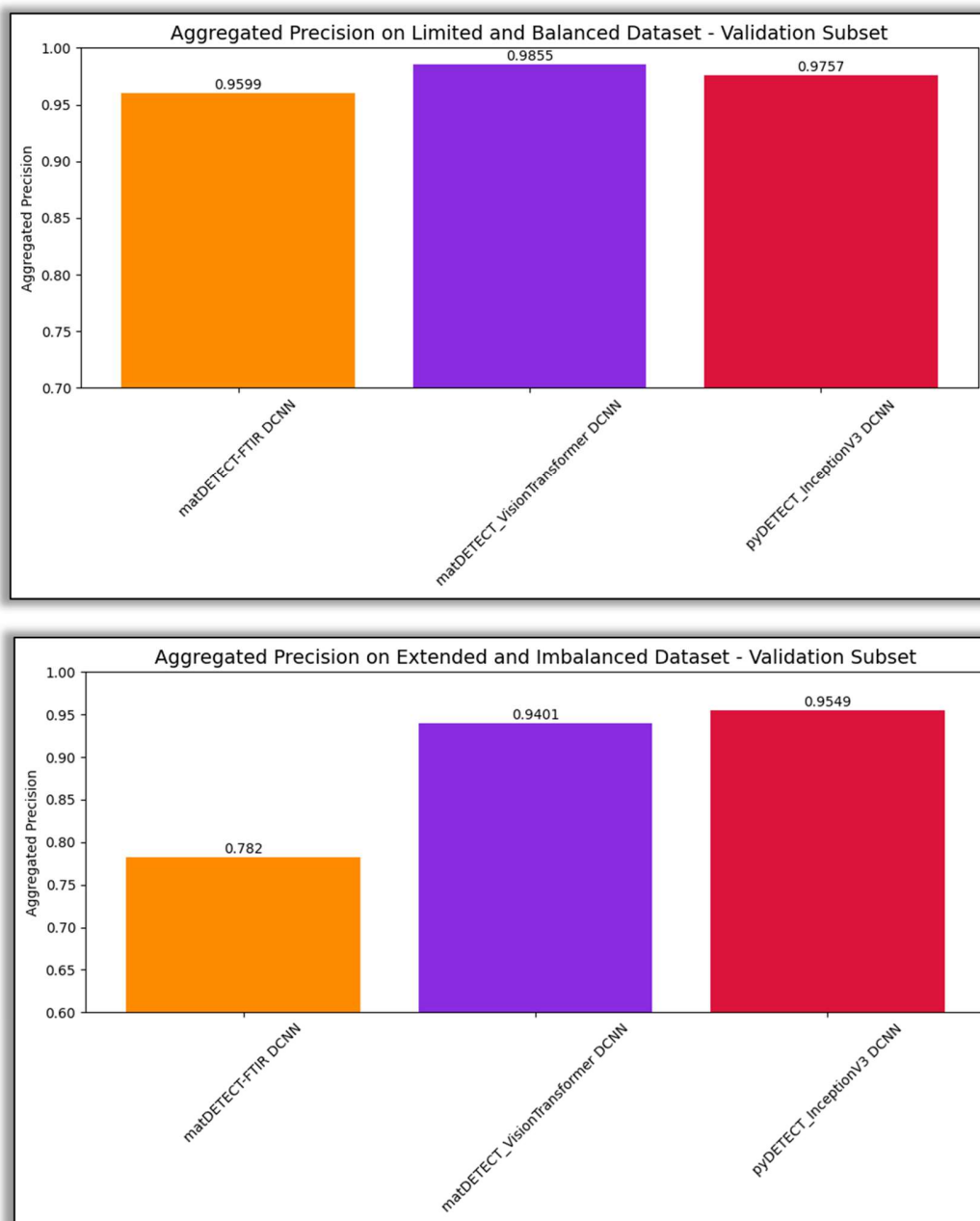


Figura 4.46 Analiza performanței agregate a modelelor DCNN dezvoltate, în funcție de Precizie (eng., *Precision*) pe subseturile de date de validare echilibrate (cadranul de sus), respectiv dezechilibrate (cadranul de jos).

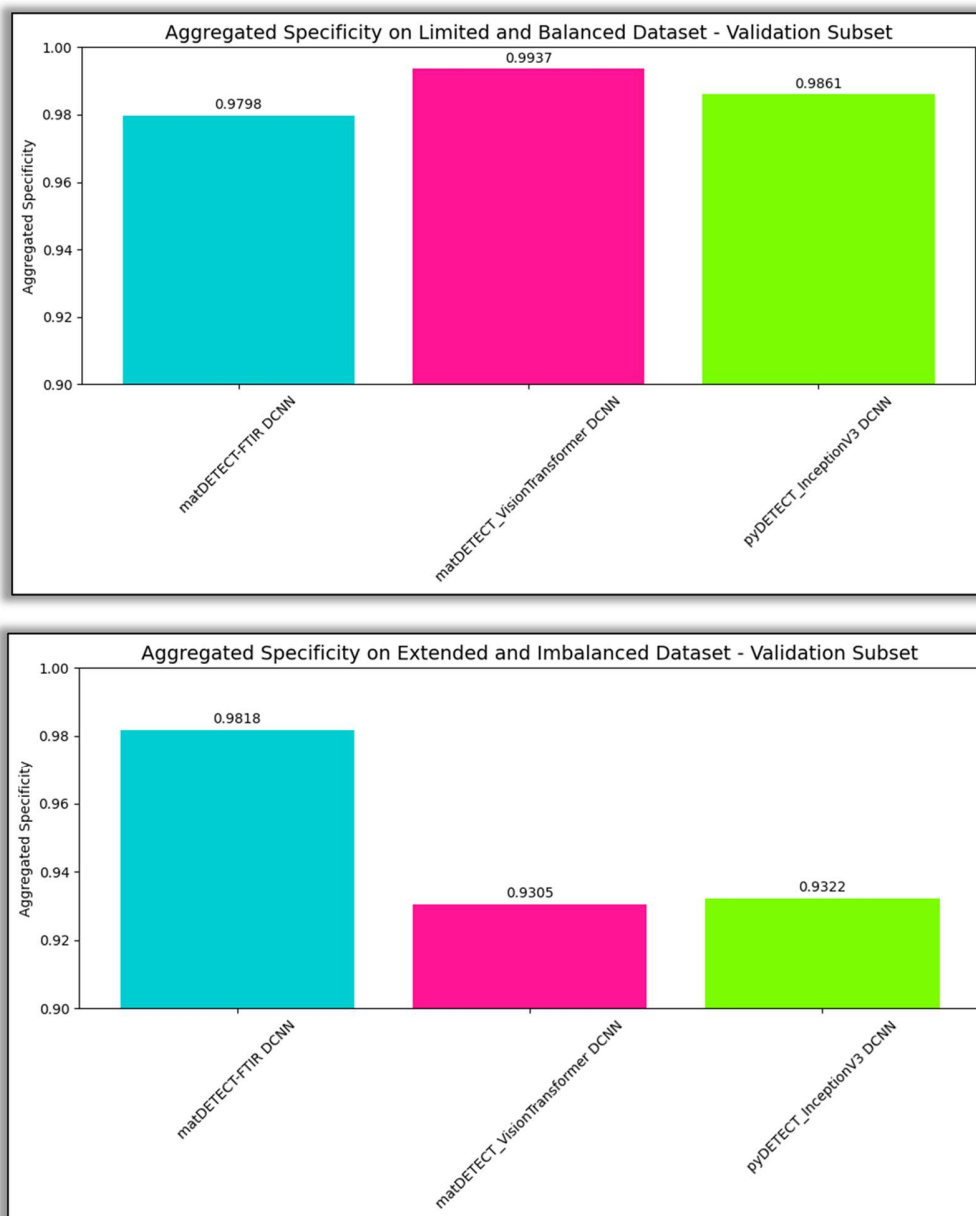


Figura 4.47 Analiza performanței agregate a modelelor DCNN dezvoltate, în funcție de Specificitate (eng., *Specificity*) pe subseturile de date de validare echilibrate (cadranul de sus), respectiv dezechilibrate (cadranul de jos).

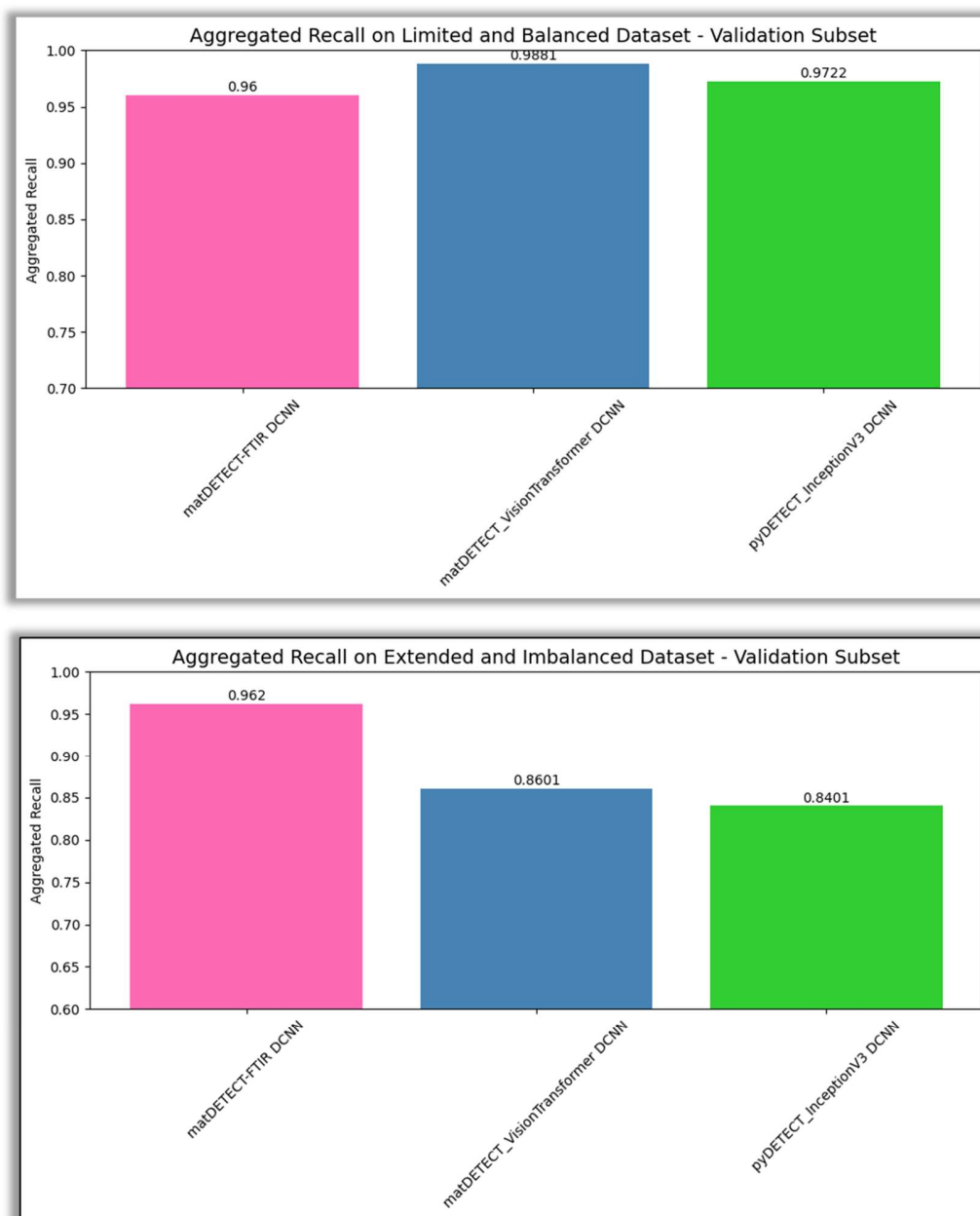


Figura 4.48 Analiza performanței agregate a modelelor DCNN dezvoltate, în funcție de Senzitivitate (eng., *Recall*) pe subseturile de date de validare echilibrate (cadranul de sus), respectiv dezechilibrate (cadranul de jos).

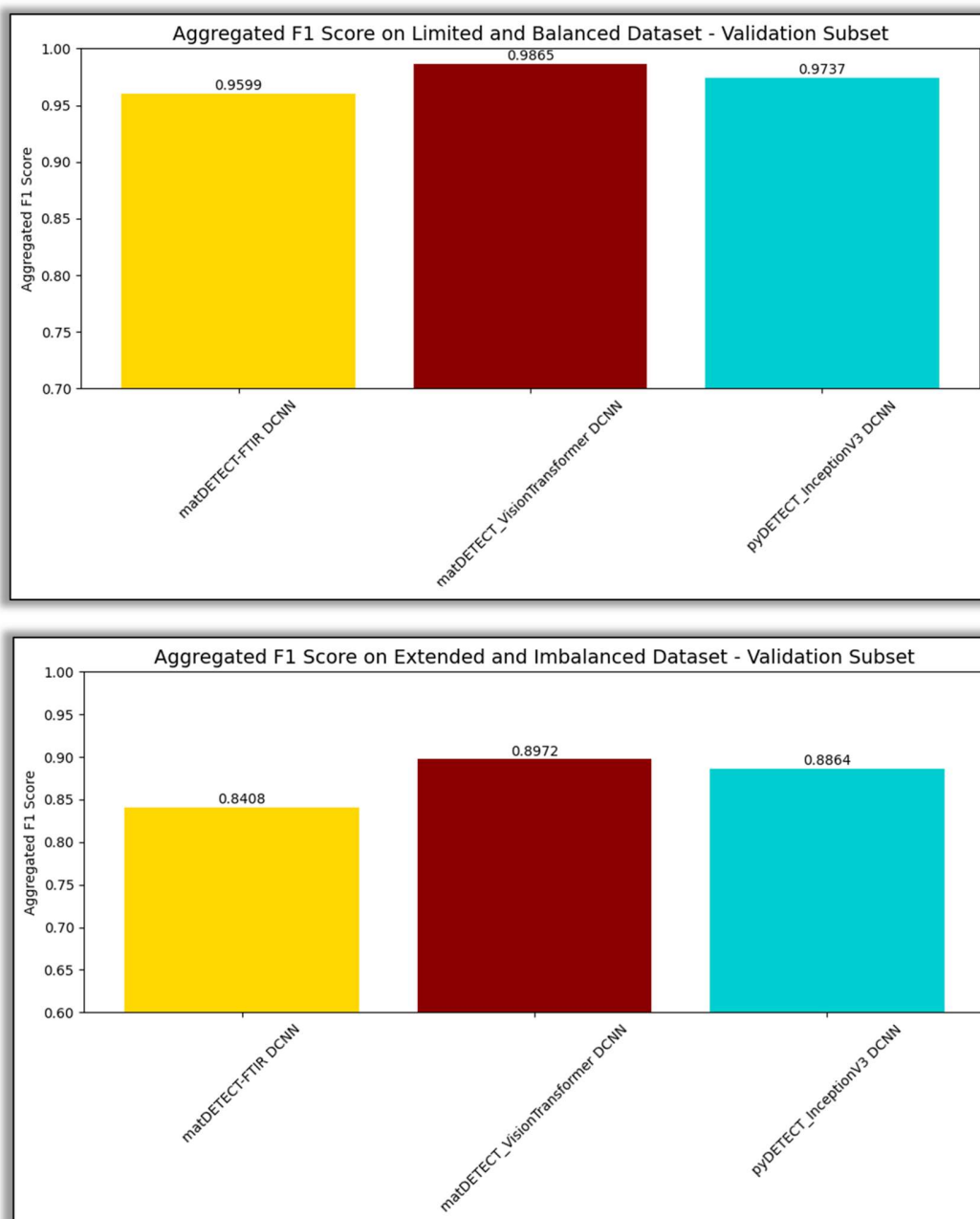


Figura 4.49 Analiza performanței agregate a modelelor DCNN dezvoltate, în funcție de Scorul F1 (eng., *F1 Score*) pe subseturile de date de validare echilibrate (cadranul de sus), respectiv dezechilibrate (cadranul de jos).

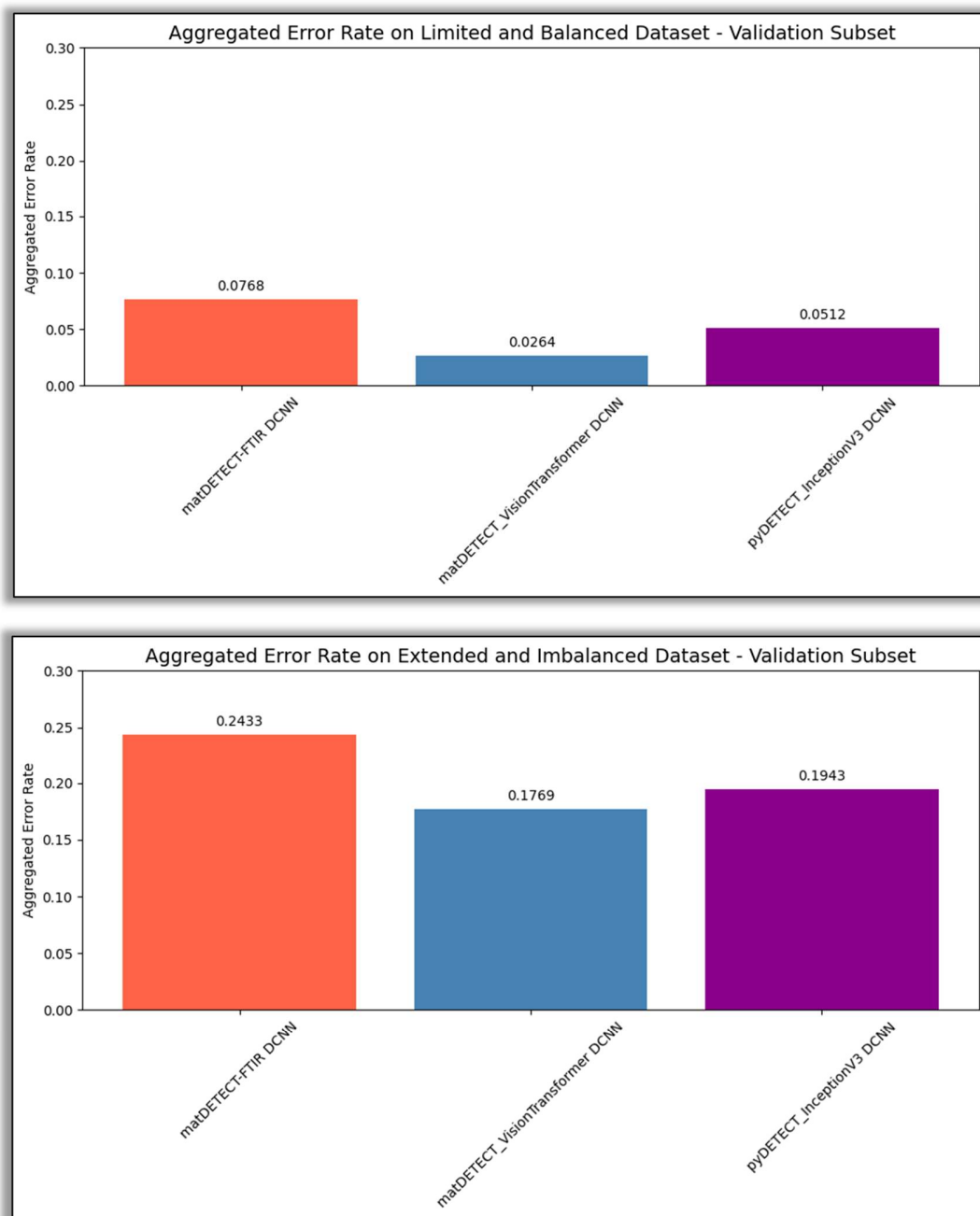


Figura 4.50 Analiza performanței agregate a modelelor DCNN dezvoltate, în funcție de Rata de Eroare (eng., Error Rate) pe subseturile de date de validare echilibrate (cadranul de sus), respectiv dezechilibrate (cadranul de jos).

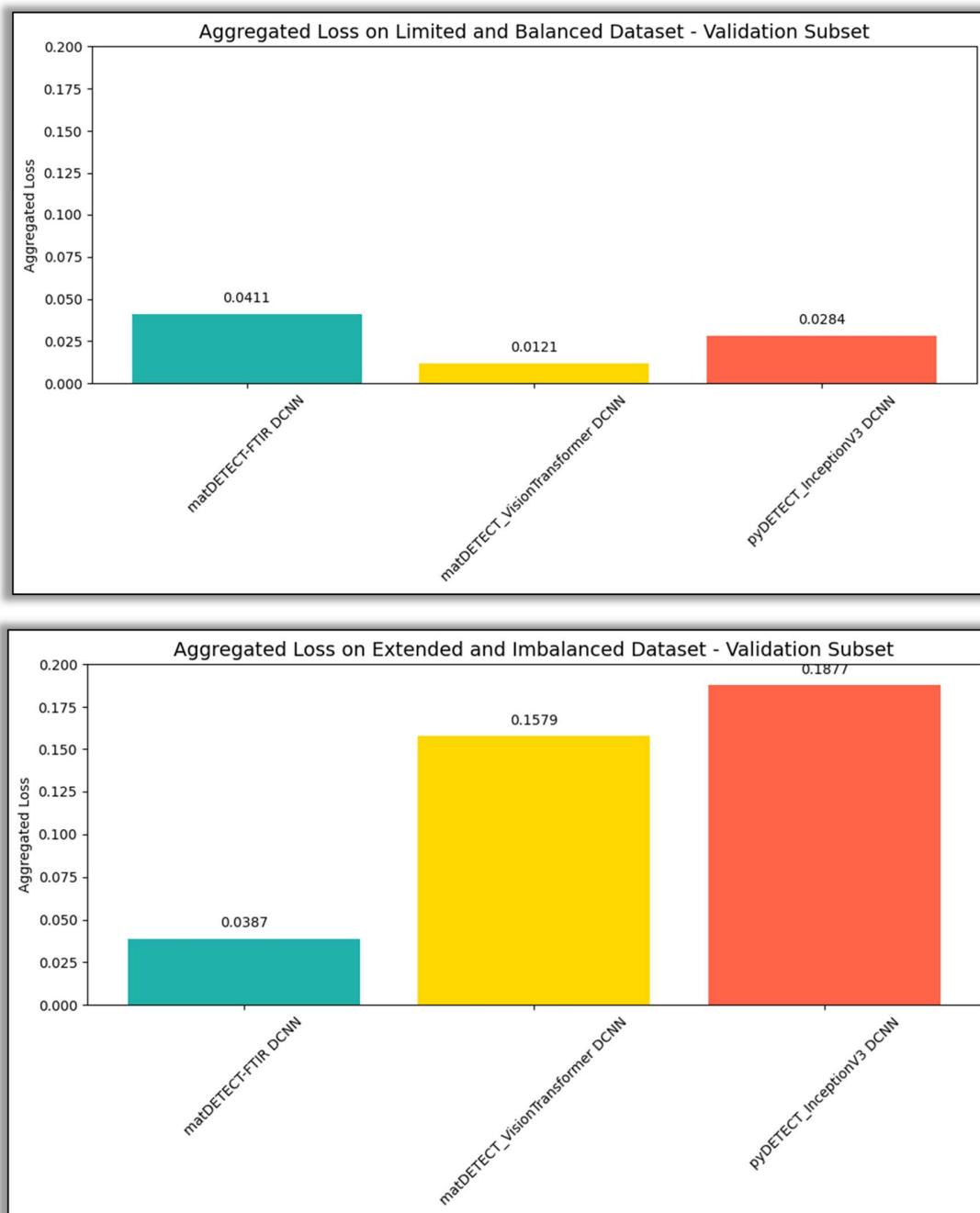


Figura 4.51 Analiza performanței agregate a modelelor DCNN dezvoltate, în funcție de Pierdere (eng., Loss) pe subseturile de date de validare echilibrate (cadranul de sus), respectiv dezechilibrate (cadranul de jos).

Subsetul de date de testare

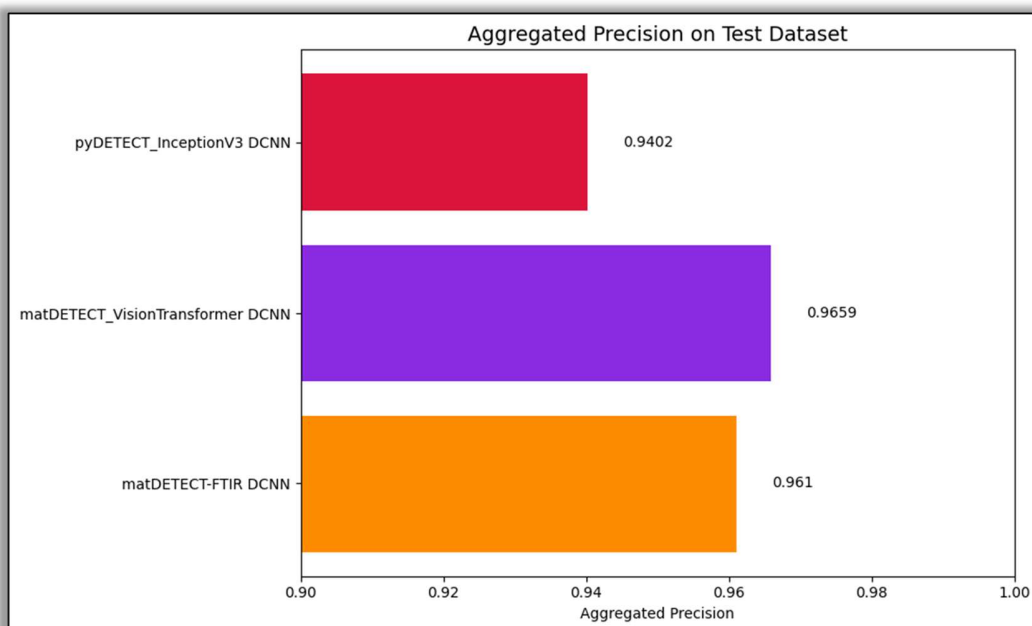
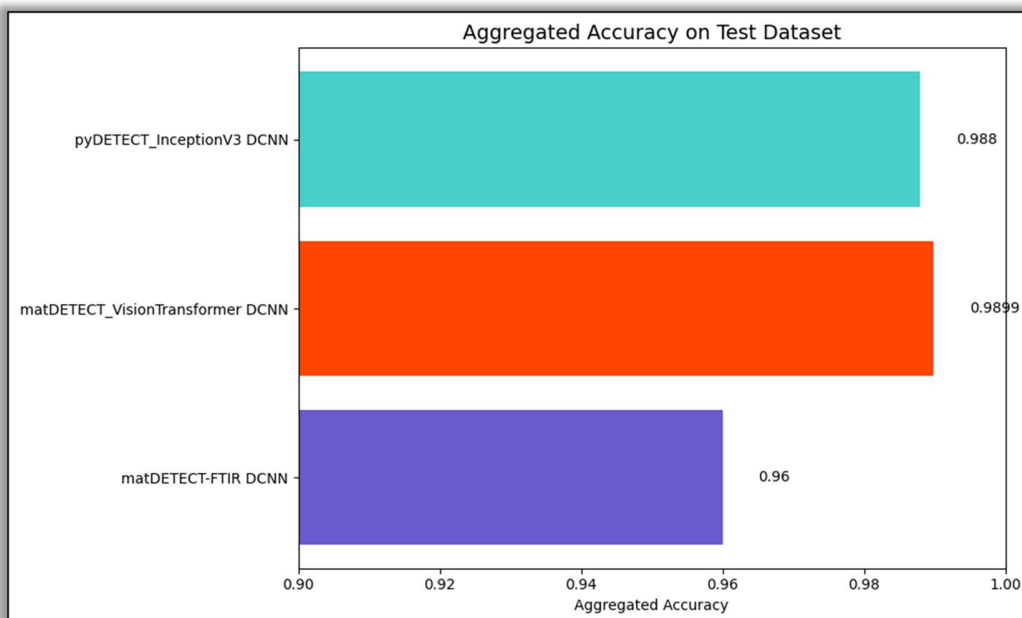


Figura 4.52 Analiza performanței agregate a modelelor DCNN dezvoltate, pe subseturile de testare, în funcție de Acuratețe (eng., *Accuracy*) în cadranul de sus, respectiv Precizie (eng. *Precision*) în cadranul de jos.

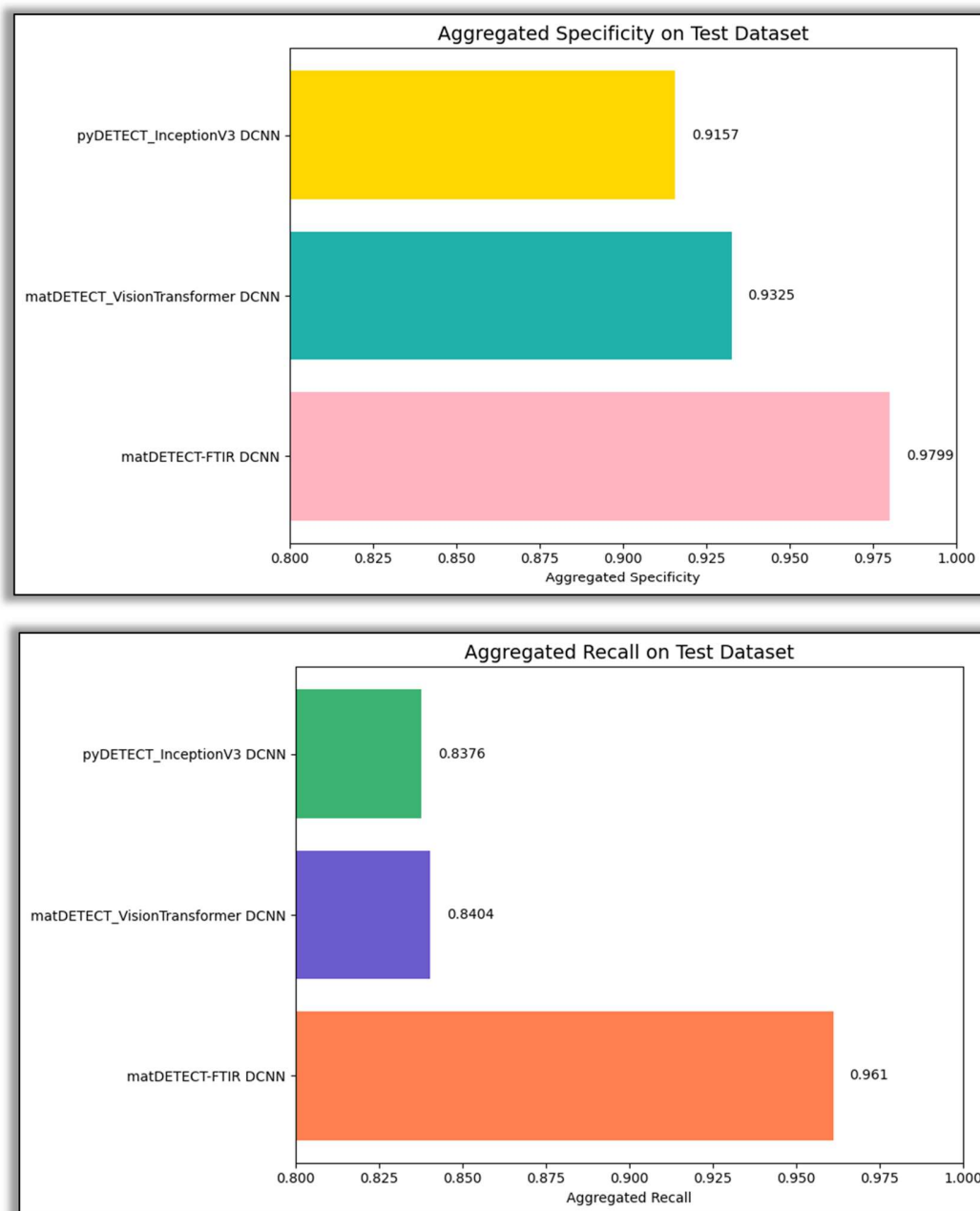


Figura 4.53 Analiza performanței agregate a modelelor DCNN dezvoltate, pe subseturile de testare, în funcție de Specificitate (eng., *Specificity*) în cadranul de sus, respectiv Senzitivitate (eng. *Recall*) în cadranul de jos.

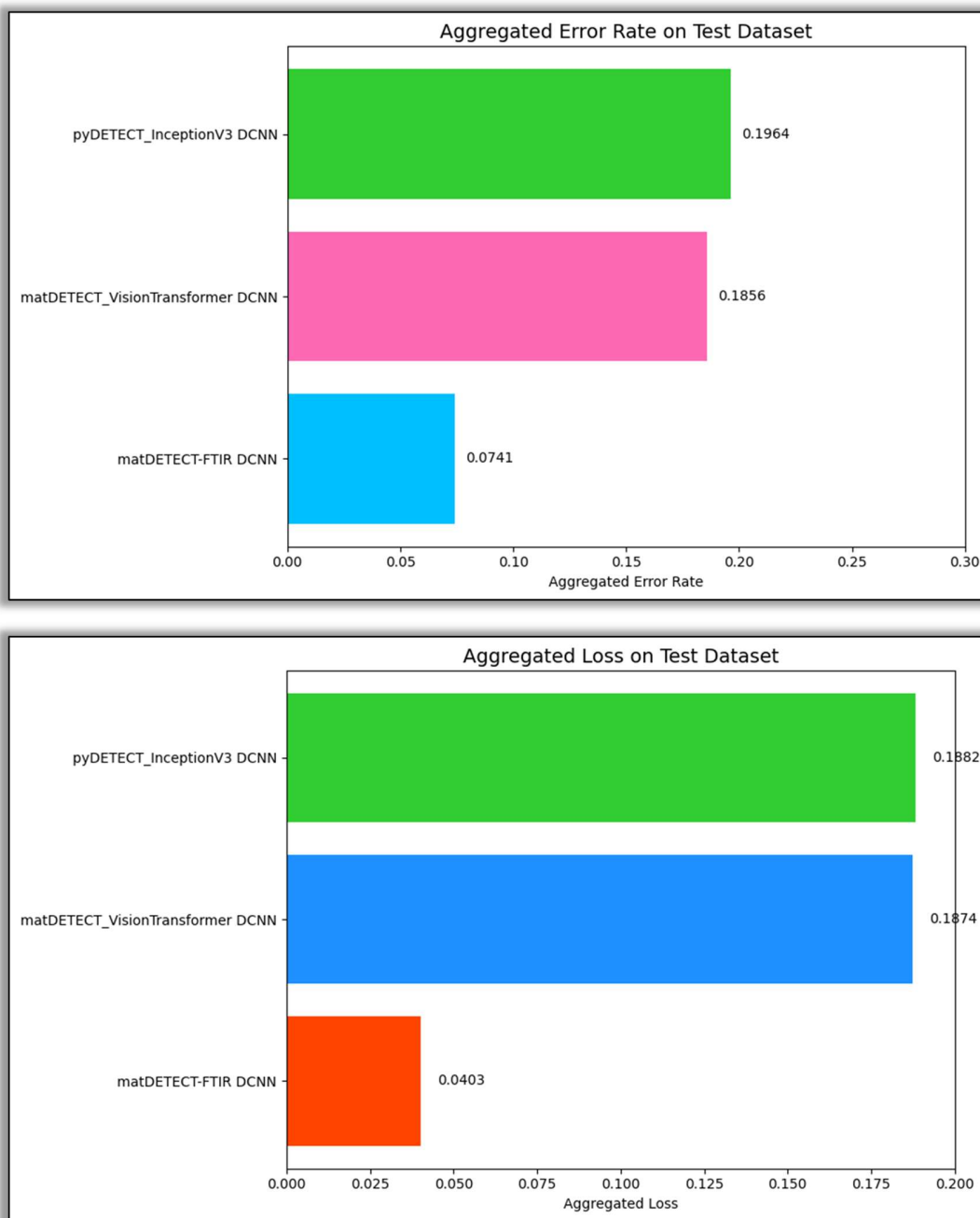


Figura 4.54 Analiza performanței agregate a modelelor DCNN dezvoltate, pe subseturile de testare, în funcție de Rata de Eroare (eng., *Error Rate*) în cadranul de sus, respectiv Pierdere (eng. *Loss*) în cadranul de jos.

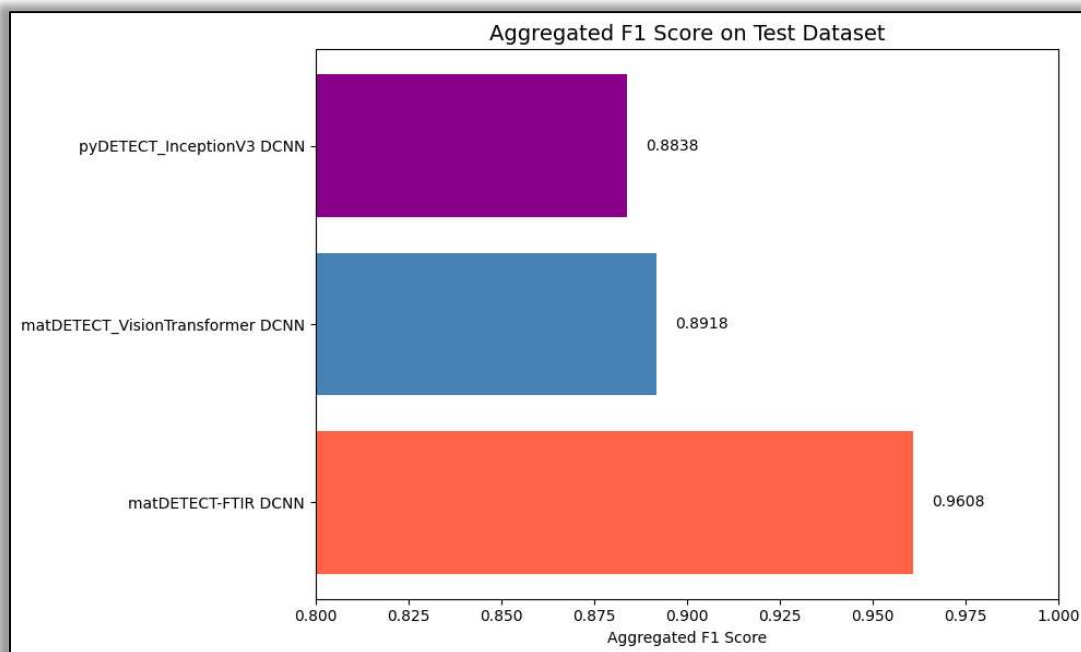


Figura 4.55 Analiza performanței agregate a modelelor DCNN dezvoltate, pe subseturile de testare, în funcție de Scorul F1 (eng., F1 Score).

Fiecare dintre cele patru sisteme AI dezvoltate, evidențiate și analizate prezintă puncte forte distincte și zone de îmbunătățire. O abordare sinergică, care să combine cele mai eficiente strategii de la fiecare model, va putea conduce la dezvoltarea unor sisteme de detecție și clasificare a cannabinoidelor sintetice și a altor substanțe de abuz mai robuste și mai performante. Investigațiile viitoare se vor concentra pe optimizarea continuă a acestor modele prin utilizarea tehnicilor avansate de învățare profundă și prin explorarea unor noi paradigme de învățare automată care să răspundă mai bine provocărilor întâlnite în lumea reală.

CAPITOLUL V. CONCLUZII GENERALE ȘI DIRECȚII VIITOARE DE CERCETARE ȘI DEZVOLTARE

Concluzii generale

Această teză de doctorat aduce contribuții originale semnificative în domeniul detectării și clasificării cannabinoidelor sintetice și a altor substanțe de abuz, prin dezvoltarea și implementarea unor modele DCNN inovatoare. Modelele propuse reprezintă o premieră în literatura de specialitate, fiind primele arhitecturi de acest tip concepute și aplicate în mod specific pentru detectarea și clasificarea cannabinoidelor sintetice JWH, cannabinoidelor sintetice non-JWH, și altor droguri de sinteză de interes criminalistic.

Învățarea profundă și învățarea activă prin transfer au reprezentat două direcții esențiale de cercetare în dezvoltarea și implementarea modelelor DCNN pentru detectarea și discriminarea cannabinoidelor sintetice JWH, cannabinoidelor sintetice non-JWH și a altor categorii de droguri de sinteză de interes criminalistic evidențiate în prezenta teză de doctorat. Învățarea profundă, prin abilitatea sa de a extrage automat caracteristici complexe și semnificative din date nestructurate, oferă un avantaj distinct în analiza datelor spectrale și imaginilor digitale, esențială în contextul detecției substanțelor de abuz. Învățarea activă prin transfer completează această abordare prin permiterea reutilizării

cunoștințelor dobândite dintr-un domeniu sursă pentru a îmbunătăți performanțele modelelor într-un domeniu țintă, reducând astfel necesitatea unor seturi de date mari și bine echilibrate. Această metodă devine deosebit de valoroasă în contexte în care datele sunt limitate sau dezechilibrate, cum este adesea cazul în investigațiile criminalistice.

Un aspect central al acestei teze de doctorat îl constituie utilizarea unor metode, tehnici și algoritmi inovativi pentru instruirea, optimizarea, validarea și testarea modelelor DCNN dezvoltate. Abordările hibride de învățare și optimizare aplicate au fost esențiale pentru tratarea dezechilibrelor de clasă în seturi de date variate și limitate, o provocare majoră în domeniul învățării automate. Strategiile inovatoare de învățare activă prin transfer, combinate cu preprocesarea avansată a datelor spectrale și augmentarea imaginilor, au facilitat obținerea unor performanțe remarcabile, demonstrând eficiența acestor tehnici în îmbunătățirea capacității de generalizare și precizie a modelelor.

Cele patru modele de inteligență artificială dezvoltate în cadrul acestei cercetări: unitatea de Autoencoder Convoluțional (CAE) *py_AutoConv_DETECT*, modelul *matDETECT_FTIR* DCNN bazat pe unitatea CAE, modelul *matDETECT_VisionTransformer* DCNN derivat din arhitectura preantrenată a modelului *Vision Transformer (ViT-B/32)* și modelul *pyDETECT_InceptionV3* DCNN derivat din arhitectura preantrenată a modelului *GoogLeNet Inception V3* au demonstrat performanțe excepționale în identificarea și clasificarea substanțelor de abuz. Unitatea CAE a avut un rol central în dezvoltarea modelului original DCNN, contribuind semnificativ la performanțele sale remarcabile în detectarea și clasificarea canabinoidelor sintetice și a altor substanțe de abuz. Prin preantrenarea nesupravegheată, CAE a fost capabilă să învețe o reprezentare latentă eficientă a datelor, facilitând o compresie adecvată a caracteristicilor relevante și o reducere a dimensionalității datelor. Această etapă a fost esențială pentru îmbunătățirea ulterioară a capacității modelului DCNN de a diferenția între clasele de substanțe de abuz, chiar și în prezența unor seturi de date limitate sau dezechilibrate. Performanța acestui model DCNN, dezvoltat *ex novo* și bazat pe unitatea CAE, reflectă utilitatea acestui tip de autoencoder în creșterea acurateței și robusteții sistemelor de clasificare în domeniul criminalistic.

Modelele DCNN derivate din arhitecturile preantrenate *Vision Transformer (ViT-B/32)* și *Inception V3* au demonstrat o performanță excepțională în abordarea provocărilor complexe legate de detectarea și clasificarea canabinoidelor sintetice. Prin integrarea acestor arhitecturi avansate, cercetarea a reușit să depășească problemele asociate cu seturile de date limitate și dezechilibrate. *Vision Transformer*, cu capacitatea sa de a gestiona date de mare complexitate prin auto-atenție, și *Inception V3*, cu structura sa multi-scop, au permis dezvoltarea unor modele adaptabile și robuste, capabile să recunoască cu precizie substanțele de abuz în condiții variate de date. Aceste modele nu numai că au îmbunătățit semnificativ performanțele în clasificarea substanțelor criminalistice, dar au demonstrat și o versatilitate ridicată, sugerând potențialul lor de aplicare în alte domenii ale viziunii computerizate și în alte sarcini complexe de analiză a imaginilor.

Originalitatea contribuțiilor este incontestabilă, atât prin natura inovatoare a arhitecturilor propuse, cât și prin aplicabilitatea lor directă în domeniul criminalistic. Faptul că aceste modele reprezintă primele implementări de acest gen în detectarea și clasificarea canabinoidelor sintetice evidențiază avansul științific realizat prin această cercetare. Implementarea lor strategică și eficientă demonstrează nu doar robustețea și adaptabilitatea acestor modele, ci și potențialul lor de a revoluționa metodele de analiză criminalistică în detectia substanțelor de abuz.

Mai mult, relevanța acestor modele transcende domeniul criminalistic, având aplicații potențiale în alte domenii ale viziunii computerizate, cum ar fi clasificarea imaginilor și detectarea obiectelor. Flexibilitatea și portabilitatea lor sugerează că aceste modele pot fi adaptate cu ușurință pentru diverse alte sarcini complexe. Implementarea pentru inferență și dezvoltări viitoare, precum și exportul în formatele standardizate *.h5*, *.onnx*, *.py* și *.nb* pentru a asigura portabilitatea și reutilizarea lor în contexte diferite, au fost realizate cu atenție deosebită, asigurând o documentație riguroasă și o arhivare accesibilă a tuturor resurselor generate. Modelele, codurile sursă și scripturile au fost depuse în arhiva online Supporting Information a proiectului științific, permițând accesul la aceste resurse pentru dezvoltatori interesați. Această abordare promovează transparența și reproducibilitatea rezultatelor, oferind o bază solidă pentru viitoare cercetări și inovații în domeniu.

În concluzie, contribuțiile originale aduse de această teză de doctorat constituie un pas semnificativ înainte în domeniul Inteligenței Artificiale aplicate în criminalistică, oferind soluții inovatoare și eficiente pentru detectarea și clasificarea canabinoidelor sintetice și a altor substanțe de abuz. Aceste realizări, reflectate în performanțele excepționale ale modelelor dezvoltate, subliniază potențialul imens al tehnicilor de învățare profundă și prin transfer în rezolvarea provocărilor complexe asociate analizei criminalistice.

Direcții viitoare de cercetare și dezvoltare

Eforturile de cercetare viitoare vor continua să se concentreze pe augmentarea și extinderea arhitecturilor dezvoltate în această lucrare, cu accent pe optimizarea acestora pentru alte tipuri de substanțe de abuz, dincolo de canabinoidele sintetice. Această direcție de cercetare implică testarea modelelor prezentate pe noi seturi de date variate, care să includă o gamă mai largă de substanțe, precum opioidele sintetice, stimulantele și alte clase de droguri emergente. Procesul de optimizare va cuprinde ajustarea hiperparametrelor și *fine-tuning-ul* arhitecturilor pentru a maximiza acuratețea și robustețea modelelor în clasificarea acestor noi categorii. Se va investi în dezvoltarea unor tehnici avansate de augmentare a datelor pentru a suplimenta seturile de date limitate, abordând astfel problema dezechilibrului de clasă și îmbunătățind capacitatea modelelor de a generaliza.

Implementarea acestor modele DCNN în software-uri specializate pentru portabilitate și utilizare *in situ* reprezintă o altă direcție majoră de dezvoltare. Procedura necesară pentru această implementare va include transpunerea modelelor antrenate în formate optimizate pentru dispozitive mobile și sisteme *embedded*. Aceasta va presupune utilizarea de *framework-uri* precum *TensorFlow Lite*, *ONNX Runtime*, și *Core ML* pentru a permite rularea eficientă a modelelor pe dispozitive cu resurse limitate, cum ar fi smartphone-urile sau *kit-urile* de dezvoltare dedicate (de exemplu, *Raspberry Pi*, *Nvidia Jetson*). Integrarea acestor modele într-un software ușor de utilizat, cu interfețe intuitive pentru operatori și investigatori criminaliști, va facilita aplicarea lor directă în teren, îmbunătățind considerabil eficiența și viteza investigațiilor.

O direcție esențială în cercetarea viitoare va fi perfecționarea și extinderea modelelor dezvoltate de DNN bazate pe modelare 3D-QSAR/QSPR și descriptori moleculari, cum sunt: *qsar_COMPUTE_300* DNN, *alva_nd_DETECT_150* DNN și *alva_nd_DETECT_375* DNN. Aceste modele au fost dezvoltate de echipa noastră de cercetare pentru a aborda provocările complexe ale identificării și clasificării canabinoidelor sintetice pe baza caracteristicilor lor moleculare și au fost prezentate în articole publicate în literatura de specialitate, precum „*Sensitivity analysis of Artificial Neural Networks identifying JWH synthetic cannabinoids built with alternative training strategies and methods. Inventions, 7, 2022*” sau „*Computerized Detection of JWH Synthetic Cannabinoids Class Membership Based on Machine Learning Algorithms and Molecular Descriptors. 2022 IEEE International Conference on Automation, Quality and Testing, Robotics (AQTR), May 19-21, 2022, IEEE, Cluj - Napoca, Romania*” [490, 491].

qsar_COMPUTE_300 DNN reprezintă un model QSAR de regresie bazat pe o ANN, conceput pentru a calcula un set extins de descriptori moleculari. Acesta include Indici Topologici, descriptori 3D MoRSE, Indici Constituționali, Grupe Funcționale, Proprietăți Moleculare, precum și parametri care cuantifică proprietăți „drug-like” și toxicologice. Modelul este specializat în predicția acestor descriptori moleculari, oferind o analiză detaliată și precisă a compușilor chimici, esențială pentru clasificarea și identificarea substanțelor de abuz, cum ar fi canabinoidele sintetice. Această capacitate de a calcula și interpreta o gamă largă de descriptorii moleculari îl face un instrument puternic în domeniul QSAR, contribuind semnificativ la avansarea metodologiilor de analiză moleculară în contexte criminalistice și farmaceutice.

alva_nd_DETECT_150 DNN și *alva_nd_DETECT_375* DNN sunt modele de clasificare complexe, concepute pentru a distinge între diverse canabinoide sintetice și alte substanțe de abuz, pe baza unor matrici bidimensionale de date formate din descriptori moleculari și canabinoide sintetice. *alva_nd_DETECT_150* DNN utilizează o matrice ce conține 150 de canabinoide sintetice și alți compuși de abuz, descriși prin 150 de descriptori moleculari din categoriile de Indici Topologici, 3D MoRSE,

„Drug-Like” și Toxicologici. Pe de altă parte, *alva_nd_DETECT_375* DNN este un model mai avansat, instruit pe o matrice de date ce cuprinde 375 de canabinoide sintetice și alte substanțe de abuz, descrise prin 142 de descriptori moleculari ce includ Indici Constituționali, Grupe Funcționale și Proprietăți Moleculare.

Aceste modele au demonstrat deja un potențial semnificativ în predicția și clasificarea substanțelor pe baza caracteristicilor lor moleculare, însă optimizarea lor pe noi seturi de date și ajustarea arhitecturilor pentru a răspunde provocărilor emergente sunt esențiale pentru a îmbunătăți și extinde aplicabilitatea acestor metode. Cercetările viitoare se vor axa pe testarea acestor modele pe seturi de date mai variate și extinse, care să includă noi canabinoide sintetice și alte substanțe de abuz, explorând astfel capacitatea lor de a generaliza și a oferi predicții precise într-o gamă mai largă de contexte criminalistice. Prin perfecționarea continuă a acestor modele și integrarea lor în fluxurile de lucru ale analizei criminalistice, se poate anticipa o îmbunătățire semnificativă a capacității de detectare și clasificare a substanțelor de abuz, contribuind astfel la avansarea metodelor de combatere a traficului și consumului de droguri.

Pe lângă dezvoltarea și optimizarea acestor sisteme de AI, cercetarea viitoare va explora crearea altor tipuri de DNNs pentru detectarea și clasificarea unor substanțe de abuz emergente. Se preconizează extinderea studiilor pentru a include noi categorii de droguri, cum ar fi opioidele sintetice, care au devenit o problemă majoră la nivel global, sau noile psihedelice de sinteză, ale căror efecte și compoziții chimice sunt încă insuficient studiate. Se vor explora noi arhitecturi, cum ar fi Rețelele Neuronale cu Memorie pe Termen Lung (eng., *Long Short-Term Memory, LSTM*) și Rețelele Neuronale Generative (eng., *Generative Adversarial Network, GAN*), pentru a modela și prezice interacțiunile complexe între diferitele substanțe de abuz și structurile lor moleculare. Aceste rețele ar putea oferi o mai mare acuratețe în detectarea substanțelor emergente și ar putea contribui la dezvoltarea de noi tehnici de prevenire și combatere a abuzului de droguri.

În final, dar nu în ultimul rând, o altă direcție viitoare de cercetare și dezvoltare o reprezintă investigarea și experimentarea în domeniului amprentelor moleculare (eng., *molecular fingerprints*) care sunt reprezentări digitale ale caracteristicilor structurale ale moleculelor, utilizate frecvent în chimie computațională și bioinformatică. Se poate anticipa că amprentele moleculare pot fi utilizate cu succes pentru instruirea unei DCNN. Deși aceste sisteme sunt cel mai adesea asociate cu prelucrarea imaginilor, conceptul de convoluție și învățare a caracteristicilor poate fi adaptat și aplicat la datele structurale complexe, cum sunt amprentele moleculare [490].

Lista lucrărilor publicate și comunicate

A. LUCRĂRI PUBLICATE ISI

Indexate sau/și cotate de Clarivate Analytics – Web of Science Core Collection™ (Wos) și Scopus

1. **Burlacu, C.M.;** Burlacu, A.C.; Praisler, M.; Paraschiv C. Harnessing Deep Convolutional Neural Networks Detecting Synthetic Cannabinoids: A Hybrid Learning Strategy for Handling Class Imbalances in Limited Datasets. *Inventions* **2023**, *8*, 129. DOI: 10.3390/inventions8050129. WOS:001089546600001. ISI Impact Factor: **2.1** (2023). <https://www.mdpi.com/2411-5134/8/5/129>.

Lucrare citată în:

1. Annaki I.; Rahmoune M.; Bourhaleb M. Overview of Data Augmentation Techniques in Time Series Analysis. *International Journal of Advanced Computer Science and Applications* **2024**, *15-1*, 1201-1211. ISI Impact Factor: **0.7** (2023). https://thesai.org/Downloads/Volume15No1/Paper_118-Overview_of_Data_Augmentation_Techniques.pdf.

2. **Burlacu, C.M.;** Burlacu, A.C.; Praisler, M. Sensitivity analysis of Artificial Neural Networks identifying JWH synthetic cannabinoids built with alternative training strategies and methods. *Inventions* **7** **2022**, *Art. no. 82*. DOI: 10.3390/inventions7030082. WOS:000858596600001. ISI Impact Factor: **3.4** (2022) <https://www.mdpi.com/2411-5134/7/3/82>.

Lucrare citată în:

1. Muljono W.S.A. et al. Breaking Boundaries in Diagnosis: Non-Invasive Anemia Detection Empowered by AI. *IEEE Access* **2024**, *12*, 9292-9307. DOI: 10.1109/ACCESS.2024.3353788. ISI Impact Factor: **3.4** (2023). <https://researchr.org/publication/MuljonoWANPZ24>.
2. Karimi, N.; Salavati, E.; Assa, H.; Adibi, H. Sensitivity Analysis of Optimal Commodity Decision Making with Neural Networks: A Case for COVID-19. *Mathematics* **2023**, *11*, 1202. WOS: 000947070800001. ISI Impact Factor: **2.3** (2023). <https://doi.org/10.3390/math11051202>.
3. Darie, I-F.; Anton, S.R.; Praisler, M. Machine Learning Systems Detecting Illicit Drugs Based on Their ATR-FTIR Spectra. *Inventions* **8** **2023**, *56*. WOS:000978413800001. ISI Impact Factor: **2.1** (2023). <https://doi.org/10.3390/inventions8020056>.

3. **Burlacu, C.M.;** Praisler, M.; Burlacu, A.C. Computerized Detection of JWH Synthetic Cannabinoids Class Membership Based on Machine Learning Algorithms and Molecular Descriptors. *2022 IEEE International Conference on Automation, Quality and Testing, Robotics (AQTR)*, May 19-21, 2022, IEEE, Cluj - Napoca, Romania. DOI: 10.1109/AQTR55203.2022.9801971. WOS:000890261900007. Electronic ISBN:978-1-6654-7933-2. USB ISBN:978-1-6654-7932-5. ISBN:978-1-6654-7934-9. <http://www.aqtr.ro/>; <https://ieeexplore.ieee.org/abstract/document/9801971/authors#authors>.

Lucrare citată în:

1. Gambacorta, N.; Ciriaco, F.; Amoroso, N.; Altomare, C.D.; Bajorath, J.; Nicolotti, O. CIRCE: Web-Based Platform for the Prediction of Cannabinoid Receptor Ligands Using Explainable Machine Learning. *J Chem Inf Model* **2023**, 63-18, 5916–5926. ISI Impact Factor: **5.6** (2023). <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.3c00914>.
2. Fraile, P.A. Neural Designer in scientific research. *Neural Designer* 2023. <https://www.neuraldesigner.com/blog/neural-designer-in-scientific-research/#Articulo2>

4. **Burlacu, C.M.**; Gosav, S.; Burlacu, B.A.; Praisler M. Convolutional Neural Network detecting synthetic cannabinoids. *2021 International Conference on E-Health and Bioengineering (EHB 2021), 9th Edition*, 2021, IEEE, pp. 1-4. DOI: 10.1109/EHB52898.2021.9657725. WOS: 000802227900185. ISBN: 978-1-6654-4000-4. ISSN: 2575-5137. eISSN: 2575-5145. <http://www.ehbconference.ro/>; <https://ieeexplore.ieee.org/abstract/document/9657725>.

In curs de indexare sau/și cotate în Clarivate Analytics – Web of Science Core Collection™ (Wos) și Scopus

5. Paraschiv, C.; Gosav, S.; **Burlacu, C.M.**; Praisler, M. Exploring the Inhibitory Efficacy of Resokaempferol and Tectochrysin on PI3K α Protein by Combining DFT and Molecular Docking Against Wild-Type and H1047R Mutant Forms. *Inventions* **2024**, 9, 96. DOI:10.3390/inventions9050096. Impact Factor: **2.1** (2024). <https://www.mdpi.com/2411-5134/9/5/96>.
6. **Burlacu, C.M.**; Gosav, S.; Burlacu, B.A.; Praisler, M.; Artificial Neural Networks screening for JWH synthetic cannabinoids: a comparative analysis regarding their specificity and accuracy. *2022 International Conference on E-Health and Bioengineering (EHB 2022), 10th Edition*, **2022**, IEEE, pp. 1-4. DOI: 10.1109/EHB55594.2022.9991354. Electronic ISBN:978-1-6654-8557-9. ISBN:978-1-6654-8558-6. Electronic ISSN: 2575-5145. ISSN: 2575-5137. <http://www.ehbconference.ro/>; <https://ieeexplore.ieee.org/abstract/document/9991354>.

B. LUCRĂRI PUBLICATE ÎN REVISTE BDI

1. **Burlacu, C.M.**; Burlacu, A.C.; Praisler, M. Physico-chemical analysis, systematic benchmarking and toxicological aspects of the JWH aminoalkylindole class-derived synthetic JWH cannabinoids. *Annals of "Dunarea de Jos" University of Galati, Mathematics, Physics, Theoretical Mechanics, Fascicle II*, Year XIII (XLIV) 2021, No. 1, p. 34-45. DOI: 10.35219/ann-ugal-math-phys-mec.2021.1.06. <https://gup.ugal.ro/ugaljournals/index.php/math/article/view/4924>.
2. Ion, A.; Praisler, M.; **Burlacu, C.M.**; Stanica, N.C. Automatic identification of NBOMe illicit psychoactive substances based on combined molecular descriptors. *MATEC Web Conf* **2021**, 342, 05008. <https://doi.org/10.1051/mateconf/202134205008>.

C. LUCRĂRI COMUNICATE LA CONFERINȚE INTERNAȚIONALE

1. **Burlacu, C.M.**; Praisler, M.; Burlacu, A.C. Computerized Detection of JWH Synthetic Cannabinoids Class Membership Based on Machine Learning Algorithms and Molecular Descriptors. *2022 IEEE International Conference on Automation, Quality and Testing*,

Robotics (AQTR), May 19-21, 2022, IEEE, Cluj - Napoca, Romania. DOI: 10.1109/AQTR55203.2022.9801971. WOS:000890261900007. Electronic ISBN:978-1-6654-7933-2. USB ISBN:978-1-6654-7932-5. ISBN:978-1-6654-7934-9. <http://www.aqtr.ro/>; <https://ieeexplore.ieee.org/abstract/document/9801971/authors#authors>.

2. **Burlacu, C.M.**; Gosav, S.; Burlacu, B.A.; Praisler, M. Artificial Neural Networks screening for JWH synthetic cannabinoids: a comparative analysis regarding their specificity and accuracy. *2022 International Conference on E-Health and Bioengineering (EHB 2022), 10th Edition*, 2022, IEEE, pp. 1-4. DOI: 10.1109/EHB55594.2022.9991354. Electronic ISBN:978-1-6654-8557-9. ISBN:978-1-6654-8558-6. Electronic ISSN: 2575-5145. ISSN: 2575-5137. <http://www.ehbconference.ro/> <https://ieeexplore.ieee.org/abstract/document/9991354>
3. **Burlacu, C. M.**; Gosav, S.; Burlacu, B. A; Praisler M. Convolutional Neural Network detecting synthetic cannabinoids. *2021 International Conference on E-Health and Bioengineering (EHB 2021), 9th Edition*, 2021, IEEE, pp. 1-4. DOI: 10.1109/EHB52898.2021.9657725. WOS: 000802227900185. ISBN: 978-1-6654-4000-4. ISSN: 2575-5137. eISSN: 2575-5145. <http://www.ehbconference.ro/>; <https://ieeexplore.ieee.org/abstract/document/9657725>.
4. Ion, A.; Praisler, M.; **Burlacu, C.M.**; Stanica, N.C. Automatic identification of NBOMe illicit psychoactive substances based on combined molecular descriptors. *International Multidisciplinary Symposium "UNIVERSITARIA SIMPRO"*, Petroșani, Romania, 27 – 28 May 2021. <https://www.upet.ro/simpro/2021/>.

D. LUCRĂRI COMUNICATE LA CONFERINȚE NAȚIONALE

1. **Burlacu, C.M.**; Burlacu, C.A.; Gosav, S.; Praisler, M. Computer-aided detection of synthetic cannabinoids. *Book of abstracts SCDS-UDJG 2023*, 9th Edition, 8 - 9 June 2023, Galati, Romania. <http://www.cssd-udjg.ugal.ro/>.
2. **Burlacu, C.M.**; Burlacu, B.A.; Praisler, M. ANN detecting synthetic cannabinoids based on Quantitative Structure Activity Relationship (QSAR). *Book of abstracts SCDS-UDJG 2023*, 9th Edition, 8 - 9 June 2023, Galati, Romania. <http://www.cssd-udjg.ugal.ro/>.
3. **Burlacu, C.M.**; Gosav, S.; Burlacu, B.A.; Praisler, M. Artificial Neural Networks screening for JWH synthetic cannabinoids: a comparative specificity and accuracy analysis. *Book of abstracts SCDS-UDJG 2022*, 9th Edition, 9 - 10 June 2022, Galati, Romania. <http://www.cssd-udjg.ugal.ro/>.
4. **Burlacu, C.M.**; Burlacu, A.C.; Praisler, M. Output sensitivity analysis of an ANN identifying JWH synthetic cannabinoids based on alternative training strategies and methods. *Book of abstracts SCDS-UDJG 2022*, 9th Edition, 9 - 10 June 2022, Galati, Romania. <http://www.cssd-udjg.ugal.ro/>.
5. **Burlacu, C.M.**; Gosav, S.; Burlacu, B.A.; Praisler, M. Artificial intelligence methods applicable for the recognition of JWH cannabinoids. *Book of abstracts SCDS-UDJG 2021*, 9th Edition, 10 - 11 June 2021, Galati, Romania. <http://www.cssd-udjg.ugal.ro/>.
6. **Burlacu, C.M.**; Praisler, M.; Burlacu, A.C. Physico-chemical analysis, systematic benchmarking and toxicological aspects of the JWH aminoalkylindole class-derived synthetic JWH cannabinoids. *Book of abstracts SCDS-UDJG 2021*, 9th Edition, 10 - 11 June 2021, Galati, Romania. <http://www.cssd-udjg.ugal.ro/>.

E. PREMII

Mențiune: Burlacu, C.M.; Burlacu, A.C.; Praisler, M. Output sensitivity analysis of an ANN identifying JWH synthetic cannabinoids based on alternative training strategies and methods. *Book of abstracts SCDS-UDJG 2022*, 9th Edition, 9 - 10 June 2022, Galati, Romania. <http://www.cssd-udjg.ugal.ro/>.

Bibliografie selectivă

- [1] European Monitoring Centre for Drugs and Drug Addiction (EMCDDA). *European Drug Report 2023: Trends and Developments*; Publications Office of the European Union: Luxembourg, Luxembourg, 2023.
- [2] European Monitoring Centre for Drugs and Drug Addiction (EMCDDA). *Raportul european privind drogurile 2022 – Tendințe și evoluții*; Publications Office of the European Union: Luxembourg, Luxembourg, 2022, pp. 4–54.
- [3] World Health Organization (WHO). *The public health dimension of the world drug problem: how WHO works to prevent drug misuse, reduce harm and improve safe access to medicine*; WHO Document Production Services: Geneva, Switzerland, 2019; pp. 1–10.
- [4] United Nations Office on Drugs and Crime (UNODC). *World Drug Report 2022*; United Nations publication: Vienna, Austria, 2022.
- [5] ESPAD Group. *ESPAD Report 2019: Results from the European School Survey Project on Alcohol and Other Drugs*; EMCDDA Joint Publications, Publications Office of the European Union; Luxembourg, Luxembourg, 2020.
- [6] Castaneto, M.S.; Gorelick, D.A.; Desrosiers, N. A.; Hartman, R.L.; Pirard, S.; Huestis, M. A. „Synthetic cannabinoids: epidemiology, pharmacodynamics, and clinical implications”. *Drug Alcohol Depend* **2014**, *144*, 10–52.
- [7] Hermanns-Clausen, M.; Kithinji, J.; Spehl, M.; Angerer, V.; Franz, F.; Eyer, F.; Auwärter, V. Adverse effects after the use of JWH-210 - a case series from the EU Spice II plus project. *Drug Test Anal* **2016**, *8*(10), 1032–1037.
- [8] Tait, R.J.; Caldicott, D.; Mountain, D.; Hill, S.L.; Lenton, S. A systematic review of adverse events arising from the use of synthetic cannabinoids and their associated treatment. *Clin Toxicol* **2016**, *54*(1), 1–15.
- [9] Dines, A. M.; Wood, D. M.; Galicia, M.; Yates, C. M.; Heyerdahl, F.; Hovda, K. E.; Giraudon, I.; Sedefov, R.; Euro-DEN Research Group; Dargan, P.I. Presentations to the Emergency Department Following Cannabis use-a Multi-Centre Case Series from Ten European Countries. *J Med Technol* **2015**, *11*(4), 412–426.
- [10] Von Der Haar, J.; Talebi, S.; Ghobadi, F.; Singh, S.; Chirurgi, R.; Rajeswari, P.; Kalantari, H.; Hassen, G. W. Synthetic Cannabinoids and Their Effects on the Cardiovascular System. *J Emerg Med* **2016**, *50*(2), 254–269.
- [11] Ibrahim, S.; Al-Saffar, F.; Wannenburg, T. A Unique Case of Cardiac Arrest following K2 Abuse. *Case Rep Cardiol* **2014**, 120607.
- [12] White C. M. The Pharmacologic and Clinical Effects of Illicit Synthetic Cannabinoids. *J Clin Pharmacol* **2017**, *57*(3), 295–307.
- [13] Akram, H.; Mokrysz, C.; Curran, H.V. What are the psychological effects of using synthetic cannabinoids? A systematic review. *J Clin Psychopharm* **2019**, *33*(3), 268–291.
- [14] Castellanos, D.; Gralnik, L. M. „Synthetic cannabinoids 2015: An update for pediatricians in clinical practice”. *World J Clin Pediatr* **2016**, *5*(1), 13–27.
- [15] Hubbard, J.A.; Hoffman, M.A.; Ellis, S.E.; Sobolesky, P.M.; Smith, B.E.; Suhandynata, R.T.; Sones, E.G.; Sanford, S.K.; Umlauf, A.; Huestis, M.A.; Grelotti, D.J.; Grant, I.;

- Marcotte, T.D.; Fitzgerald, R.L. Biomarkers of Recent Cannabis Use in Blood, Oral Fluid and Breath. *J Anal Toxicol* **2021**, *45*(8), 816–833.
- [16] Lo, Y.C.; Rensi, S.E.; Torng, W.; Altman, R.B. Machine learning in chemoinformatics and drug discovery. *Drug Discov Today* **2018**, *23*(8), 1524–1558.
- [17] Sharma, S.; Sharma, D. Intelligently Applying Artificial Intelligence in Chemoinformatics. *Curr Top Med Chem* **2018**, *18*(20), 1799–1842.
- [18] Zhang, L.; Tan, J.; Han, D.; Zhu, H. From machine learning to deep learning: progress in machine intelligence for rational drug discovery. *Drug Discov Today* **2017**, *22*(11), 1674–1693.
- [19] Chen, H.; Kogej, T.; Engkvist, O. Cheminformatics in Drug Discovery, an Industrial Perspective. *Mol Inform* **2018**, *37*(9-10), e1800041.
- [20] Li, Y.; Xu, Y.; Yu, Y. CRNNTL: Convolutional Recurrent Neural Network and Transfer Learning for QSAR Modeling in Organic Drug and Material Discovery. *Molecules* **2021**, *26*(23), 7257.
- [21] Lee, W.; Park, S. J.; Hwang, J. Y.; Hur, K. H.; Lee, Y. S.; Kim, J.; Zhao, X.; Park, A.; Min, K.H.; Jang, C.G.; Park, H. J. QSAR Model for Predicting the Cannabinoid Receptor 1 Binding Affinity and Dependence Potential of Synthetic Cannabinoids. *Molecules* **2020**, *25*(24), 6057.
- [22] Alves, V.L.; Gonçalves, J.L.; Aguiar, J.; Caldeira, M.J.; Teixeira, H.M.; Câmara, J.S. Highly sensitive screening and analytical characterization of synthetic cannabinoids in nine different herbal mixtures. *Anal Bioanal Chem* **2021**, *413*(8), 2248–2292.
- [23] Yang, Y.; Liu, D.; Hua, Z.; Xu, P.; Wang, Y.; Di, B.; Liao, J.; Su, M. Machine Learning-Assisted Rapid Screening of Four Types of New Psychoactive Substances in Drug Seizures. *J Chem Inf Model* **2023**, *63*(3), 809–836.
- [24] da Cunha, K. F.; Oliveira, K. D.; Huestis, M. A.; Costa, J. L. Screening of 104 New Psychoactive Substances (NPS) and Other Drugs of Abuse in Oral Fluid by LC-MS-MS. *J Anal Toxicol* **2020**, *44*(7), 681–718.
- [25] Yun, J.; Yoon, K. S.; Lee, T. H.; Lee, H.; Gu, S. M.; Song, Y. J.; Cha, H. J.; Han, K. M.; Seo, H.; Shin, J.; Park, H.K.; Kim, H. S.; Kim, Y. H. Synthetic cannabinoid, JWH-030, induces QT prolongation through hERG channel inhibition. *Toxicol Res (Camb)* **2016**, *5*(6), 1656–1682.
- [26] Tampus, R.; Yoon, S.S.; de la Peña, J.B.; Botanas, C.J.; Kim, H.J.; Seo, J.W.; Jeong, E.J.; Jang, C.G.; Cheong, J. H. Assessment of the Abuse Liability of Synthetic Cannabinoid Agonists JWH-030, JWH-175, and JWH-176. *Biomol Ther (Seoul)* **2015**, *23*(6), 590–596.
- [37] Mechoulam, R.; Parker, L.A. The endocannabinoid system and the brain. *Annu Rev Psychol* **2013**, *64*:21-47.
- [38] Potts, A.J.; Cano, C.; Thomas, S.H.L.; Hill, S.L. Synthetic cannabinoid receptor agonists: classification and nomenclature. *Clin Toxicol (Phila)* **2020**, *58*(2):82-98.
- [39] Leo, L.M.; Abood, M.E. CB₁ Cannabinoid Receptor Signaling and Biased Signaling. *Molecules* **2021**, *26*(17):5413.
- [57] Howlett, A.C.; Thomas, B.F.; Huffman, J.W. The Spicy Story of Cannabimimetic Indoles. *Molecules* **2021**, *26*(20):6190.
- [58] Gonçalves, E.C.D.; Baldasso, G.M.; Bicca, M.A.; Paes, R.S.; Capasso, R.; Dutra, R.C. Terpenoids, Cannabimimetic Ligands, beyond the Cannabis Plant. *Molecules* **2020**, *25*(7):1567.
- [59] Cavalli, J.; Dutra, R.C. A closer look at cannabimimetic terpenes, polyphenols, and flavonoids: a promising road forward. *Neural Regen Res* **2021**, *16*(7):1433-1435.
- [60] Qian, Z.; Hua, Z.; Liu, C.; Jia, W. Four types of cannabimimetic indazole and indole derivatives, ADB-BINACA, AB-FUBICA, ADB-FUBICA, and AB-BICA, identified as new psychoactive substances. *Forensic Toxicol* **2016**, *34*:133-143.

- [128] Larkin, P.J. *Infrared and Raman Spectroscopy: Principles and Spectral Interpretation*, Second Edition; Elsevier: Amsterdam, Netherlands, 2018.
- [129] Sun, D.W. *Infrared Spectroscopy for Food Quality Analysis and Control*; Academic Press: San Diego, USA, 2019.
- [130] El-Azazy, M. Ed. *Infrared Spectroscopy - Principles, Advances, and Applications. IntechOpen* 2019. doi: 10.5772/intechopen.73071.
- [134] Pirutin, S. K.; Jia, S.; Yusipovich, A.I.; Shank, M. A.; Parshina, E. Y.; Rubin, A.B. Vibrational Spectroscopy as a Tool for Bioanalytical and Biomonitoring Studies. *International journal of molecular sciences* 2023, 24(8), 6947.
- [135] Andrews, D.L.; Lipson, R.H. *Molecular Photophysics and Spectroscopy*, 2nd ed.; IOP Publishing Ltd.: Bristol, UK, 2021.
- [136] Steiner, G. *Handbook of Spectroscopy*. Wiley: Hoboken, NJ, USA, 2014. Measurement Techniques.
- [147] Pereira, L.S.; Lisboa, F.L.; Neto, J.C.; Valladão, F.N.; Sena, M.M. Screening method for rapid classification of psychoactive substances in illicit tablets using mid infrared spectroscopy and PLS-DA. *Forensic Sci. Int.* 2018, 288, 227–235.
- [148] Carey, F. A.; Giuliano, R. M. *Organic Chemistry*, 10th ed.; McGraw-Hill Education, 2016.
- [149] Quijano-Ortega, N.; Fuenmayor, C.A.; Zuluaga-Dominguez, C.; Diaz-Moreno, C.; Ortiz-Grisales, S.; García-Mahecha, M.; Grassi, S. FTIR-ATR Spectroscopy Combined with Multivariate Regression Modeling as a Preliminary Approach for Carotenoids Determination in *Cucurbita* spp. *Appl. Sci.* 2020, 10, 3722.
- [150] Haas, J.; Mizaikoff, B. Advances in Mid-Infrared Spectroscopy for Chemical Analysis. *Annual Review of Analytical Chemistry* 2016, 9.
- [151] De Bruyne, S.; Speeckaert, M.M.; Delanghe, J.R. Applications of mid-infrared spectroscopy in the clinical laboratory setting. *Crit. Rev. Clin. Lab. Sci* 2018, 55(1), 1–20.
- [152] Robinson, J.W.; Frame, E.M.S.; Frame II, G.M. *Instrumental Analytical Chemistry. An Introduction*, 1st Ed.; CRC Press: Boca Raton, U.S.A., 2021.
- [171] Hasan, M.S. Theory of IR Spectroscopy. 10.13140/RG.2.2.16495.92325, 2022.
- [172] Du, Y.; Hua, Z.; Liu, C.; Lv, R.; Jia, W.; Su, M. ATR-FTIR combined with machine learning for the fast non-targeted screening of new psychoactive substances. *Forensic Sci Int.* 2023, 349:111761.
- [173] González, M. Application of Chemometric Tools on Cannabis Samples Analyzed by the FTIR-ATR Method, *BJFS* 2020, 9(4):477-498.
- [174] Rodrigues, C.H.P.; de O. Mascarenhas, R.; Bruni, A.T. In Silico Infrared Spectroscopy as a Benchmark for Identifying Seized Samples Suspected of Being N-Ethylpentylone. *Psychoactives* 2023, 2(1), 1-22.
- [175] United Nations Office on Drugs and Crime (Ed.) United Nations Office on Drugs and Crime GLOBAL OVERVIEW—DRUG DEMAND, DRUG SUPPLY. In *World Drug Report 2022*; United Nations Publication: Vienna, Austria, 2022, 2.
- [176] Couto, R.A.S.; Gonçalves, L.M.; Carvalho, F.; Rodrigues, J.A.; Rodrigues, C.M.P.; Quinaz, M.B. The Analytical Challenge in the Determination of Cathinones, Key-Players in the Worldwide Phenomenon of Novel Psychoactive Substances. *Crit. Rev. Anal. Chem.* 2018, 48(5):372-390.
- [177] United Nations Office on Drugs and Crime Drug Market Trends: Cocaine, Amphetamine-Type Stimulants, New Psychoactive Substances. In *World Drug Report 2022*; United Nations Office on Drugs and Crime (Ed.) United Nations publication: Vienna, Austria, 2022, 4.
- [178] Custódio, M.F.; Magalhães, L.O.; Arantes, L.C.; Braga, J.W.B. Identification of Synthetic Drugs on Seized Blotter Papers Using ATR-FTIR and PLS-DA: Routine Application in a Forensic Laboratory. *J. Braz. Chem. Soc.* 2021, 31(11).

- [179] Beć, K.B.; Grabska, J.; Huck, C.W. NIR Spectroscopy of Natural Medicines Supported by Novel Instrumentation and Methods for Data Analysis and Interpretation. *J. Pharm. Biomed. Anal.* **2021**, *193*, 113686.
- [180] Kranenburg, R.F.; Weesepeel, Y.; Alewijn, M.; Sap, S.; Arisz, P.W.F.; van Esch, A.; Keizers, P.H.J.; van Asten, A.C. „The Importance of Wavelength Selection in On-Scene Identification of Drugs of Abuse with Portable Near-Infrared Spectroscopy”. *Forensic Chem.* **2022**, *30*, 100437.
- [181] Seibert, E.; Kunert, O.; Pferschy-Wenzig, E.-M.; Schmid, M.G. Characterization of Three Novel 4-Methylaminorex Derivatives Applied as Designer Drugs. *Molecules* **2022**, *27*(18):5770.
- [182] Bruni, A.T.; de Carvalho, P.O.M.; Rodrigues, C.H.P.; Leite, V.B.P. *In silico* Methods in Forensic Science: Quantum Chemistry and Multivariate Analysis Applied to Infrared Spectra of New Amphetamine- and Cathinone-Derived Psychoactive Substances. *Forensic Chem.* **2018**, *9*, 21-34.
- [183] Popovic, A.; Morelato, M.; Roux, C.; Beavis, A. Review of the Most Common Chemometric Techniques in Illicit Drug Profiling. *Forensic Sci. Int.* **2019**, *302*, 109911.
- [184] Harper, L.; Powell, J.; Pijl, E.M. An Overview of Forensic Drug Testing Methods and Their Suitability for Harm Reduction Point-of-Care Services. *Harm Reduct. J.* **2017**, *14*(1).
- [185] Goncalves, R.; Titier, K.; Latour, V.; Peyré, A.; Castaing, N.; Daveluy, A.; Molimard, M. Suitability of Infrared Spectroscopy for Drug Checking in Harm Reduction Centres. *Int. J. Drug Policy* **2021**, *88*:103037.
- [186] López, M.I.; Callao, M.P.; Ruisánchez, I. A Tutorial on the Validation of Qualitative Methods: From the Univariate to the Multivariate Approach. *Anal. Chim. Acta* **2015**, *891*, 62-72.
- [187] Fiorentin, T.R.; Logan, B.K.; Martin, D.M.; Browne, T.; Rieders, E.F. Assessment of a Portable Quadrupole-Based Gas Chromatography Mass Spectrometry for Seized Drug Analysis. *Forensic Sci. Int.* **2020**, *313*:110342.
- [188] Pereira, L.S.A.; Lisboa, F.L.C.; Coelho Neto, J.; Valladão, F.N.; Sena, M.M. Screening Method for Rapid Classification of Psychoactive Substances in Illicit Tablets Using Mid Infrared Spectroscopy and PLS-DA. *Forensic Sci. Int.* **2018**, *288*:227-235.
- [189] De Castro, J.S.; Rodrigues, C.H.P.; Bruni, A.T. *In silico* Infrared Characterization of Synthetic Cannabinoids by Quantum Chemistry and Chemometrics. *J. Chem. Inf. Model.* **2020**, *60*(4):2100-2114.
- [190] How, Z. T.; Gamal El-Din, M. A critical review on the detection, occurrence, fate, toxicity, and removal of cannabinoids in the water system and the environment. *Environ. Pollut* **2021**, *268*, Part A, 115642.
- [195] Borisov, R., Kanateva, A., & Zhilyaev, D. Recent Advances in Combinations of TLC With MALDI and Other Desorption/Ionization Mass-Spectrometry Techniques. *Front Chem* **2021**, *9*:771801.
- [196] Zhang, M.; Yu, Q.; Guo, J.; Wu, B.; Kong, X. Review of Thin-Layer Chromatography Tandem with Surface-Enhanced Raman Spectroscopy for Detection of Analytes in Mixture Samples. *Biosensors* **2022**, *12*(11), 937.
- [197] Xu, H.; Zhang, D.; Mo, F. High-throughput automated platform for thin layer chromatography analysis. *STAR Protoc* **2022**, *3*(4):101893.
- [198] Heep, J.; Tuchecker, P.H.K.; Gebhardt, C.R.; Dürr, M. Combination of Thin-Layer Chromatography and Mass Spectrometry Using Cluster-Induced Desorption/Ionization. *ACS omega* **2019**, *4*(27), 22426–22430.
- [199] Alonzo, M.; Alder, R.; Clancy, L.; Fu, S. Portable Testing Techniques for the Analysis of Drug Materials. *WIREs Forensic Sci.* **2022**, *4*(3).
- [200] Popovic, A.; Morelato, M.; Roux, C.; Beavis, A. Review of the Most Common Chemometric Techniques in Illicit Drug Profiling. *Forensic Sci. Int.* **2019**, *302*, 109911.

- [201] Rodrigues, C.H.P.; Leite, V.B.P.; Bruni, A.T. Can NMR Spectroscopy Discriminate between NPS Amphetamines and Cathinones? An Evaluation by in silico Studies and Chemometrics. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **2021**, *210*, 104265.
- [202] Bunaciu, A.A.; Aboul-Enein, H.Y. Adulterated Drug Analysis Using FTIR Spectroscopy. *Appl. Spectrosc. Rev.* **2021**, *56*(5):1-15.
- [203] Azimi, S.; Docoslis, A. Recent Advances in the Use of Surface-Enhanced Raman Scattering for Illicit Drug Detection. *Sensors (Basel, Switzerland)* **2022**, *22*(10), 3877.
- [204] Garrido, E.; Pla, L.; Lozano-Torres, B.; El Sayed, S.; Martínez-Máñez, R.; Sancenón, F. Chromogenic and Fluorogenic Probes for the Detection of Illicit Drugs. *ChemistryOpen* **2018**, *7*(5), 401–428.
- [205] Kaspar, F.; Giessmann, R.T.; Krausch, N.; Neubauer, P.; Wagner, A.; Gimpel, M. A UV/Vis Spectroscopy-Based Assay for Monitoring of Transformations Between Nucleosides and Nucleobases. *Methods Protoc* **2019**, *2*(3):60.
- [206] Lange, T.; Thomas, A.; Walpurgis, K.; Thevis, M. Fully automated dried blood spot sample preparation enables the detection of lower molecular mass peptide and non-peptide doping agents by means of LC-HRMS. *Anal Bioanal Chem* **2020**, *412*(15), 3765–3777.
- [236] Chiang, C. H.; Lee, H.H.; Chen, B.H.; Lin, Y.C.; Chao, Y.Y.; Huang, Y.L. Using ambient mass spectrometry and LC-MS/MS for the rapid detection and identification of multiple illicit street drugs. *J Food Drug Anal* **2019**, *27*(2), 439–450.
- [237] Vodanović, M.; Subašić, M.; Milošević, D.; Savić Pavičin, I. Artificial Intelligence in Medicine and Dentistry. *Acta Stomatol Croat* **2023**, *57*(1):70-84.
- [238] Wang, T.; Wei, Q.; Xiong, W.; Wang, Q.; Fang, J.; Wang, X.; Liu, G.; Jin, C.; Wang, J. „Current Status and Prospects of Artificial Intelligence Technology Application in Oil and Gas Field Development”. *ACS omega* **2024**, *9*(3), 3173–3183.
- [242] Ravikumar, A.; Sriaman, H.; Sai Saketh, P. M.; Lokesh, S.; Karanam, A. Effect of neural network structure in accelerating performance and accuracy of a convolutional neural network with GPU/TPU for image analytics. *PeerJ Comput Sci* **2022**, *8*:e909.
- [243] Emmert-Streib, F.; Yli-Harja, O.; Dehmer, M. Artificial Intelligence: A Clarification of Misconceptions, Myths and Desired Status. *Front Artif Intell* **2020**, *3*:524339.
- [244] Jeste, D.V.; Graham, S.A.; Nguyen, T.T.; Depp, C.A.; Lee, E.E.; Kim, H.C. Beyond artificial intelligence: exploring artificial wisdom. *Int Psychogeriatr* **2020**, *32*(8):993-1001.
- [250] de Campos Souza, P.V. *Fuzzy neural networks and neuro-fuzzy networks: A review the main techniques and applications used in the literature*; Applied Soft Computing: Vol. 92, 2020.
- [251] De Jong, K. Evolutionary computation: a unified approach. In Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conference Companion, July 2017.
- [252] Hertz, J.A. *Introduction To The Theory Of Neural Computation*; CRC Press: Boca Raton, U.S.A.
- [253] Ruspini, E.H.; Bonissone, P.P; Pedrycz, W. (eds). *Handbook of Fuzzy Computation*; Routledge: NY, U.S.A, 2019.
- [254] Kedzierski, M.; Falcou-Préfol, M.; Kerros, M. E.; Henry, M.; Pedrotti, M. L.; Bruzard, S. A Machine Learning Algorithm for High Throughput Identification of FTIR Spectra: Application on Microplastics Collected in the Mediterranean Sea. *Chemosphere* **2019**, *234*:242-251.
- [255] Zhu, X.; Goldberg, A.B. *Introduction to Semi-Supervised Learning*; Springer Nature: Switzerland, 2022.
- [256] Jiang, T.; Gradus, J.L.; Rosellini, A.J. *Supervised Machine Learning: A Brief Primer*, Behavior Therapy: Volume 51, Issue 5, 2020.
- [257] Berry, M.W.; Mohamed, A.; Yap, B.W *Supervised and Unsupervised Learning for Data Science*; Springer: 2019.

- [270] Dulac-Arnold, G.; Levine, N.; Mankowitz, D.J. et al. Challenges of real-world reinforcement learning: definitions, benchmarks and analysis. *Mach Learn* **2021**, *110*, 2419–2468.
- [271] Gupta, R.; Srivastava, D.; Sahu, M.; Tiwari, S.; Ambasta, R. K.; Kumar, P. Artificial intelligence to deep learning: machine intelligence approach for drug discovery. *Mol. Diversity*. **2021**, *25*, 1315–1360.
- [272] Radhakrishnan, A.; Damodaran, K.; Soylemezoglu, A.C.; Uhler, C.; Shivashankar, G.V. Machine Learning for Nuclear Mechano-Morphometric Biomarkers in Cancer Diagnosis. *Sci Rep*. **2017**, *7*(1):17946.
- [273] Koutsoukas, A.; Monaghan, K.; Li, X.; Huan, J. Deep-learning: Investigating deep neural networks hyper-parameters and comparison of performance to shallow methods for modeling bioactivity data. *J. Cheminformatics* **2017**, *9*(1):42.
- [274] Radford, A.; Metz, L.; Chintala, S. Unsupervised Representation Learning with Deep Convolutional Generative Adversarial Networks. *arXiv:1511.06434* **2015** [cs.LG].
- [275] van Engelen, J.E.; Hoos, H.H. A survey on semi-supervised learning. *Mach. Learn.* **2020**, *109*, 373–440.
- [276] Kananenka, A. A.; Yao, K.; Corcelli, S. A.; Skinner, J. L. Machine Learning for Vibrational Spectroscopic Maps. *J. Chem. Theory Comput.* **2019**, *15* (12), 6850–6858.
- [277] Alzubaidi, L.; Zhang, J.; Humaidi, A.J.; Al-Dujaili, A.; Duan, Y.; Al-Shamma, O.; Farhan, L. Review of deep learning: Concepts, CNN architectures, challenges, applications, future directions. *J. Big Data* **2021**, *8*, 1–74.
- [278] Goodfellow, I.; Bengio, Y.; Courville, A. Deep Learning; MIT: Cambridge, MA, USA, 2016.
- [279] Ogundokun, R.O.; Misra, S.; Akinrotimi, A.O.; Ogul, H. MobileNet-SVM: A Lightweight Deep Transfer Learning Model to Diagnose BCH Scans for IoMT-Based Imaging Sensors. *Sensors* **2023**, *23*, 656.
- [280] Sun, R.Y. Optimization for deep learning: An overview. *J. Oper. Res. Soc. China* **2020**, *8*, 249–294.
- [281] Choi, D.; Shallue, C.J.; Nado, Z.; Lee, J.; Maddison, C.J.; Dahl, G.E. On empirical comparisons of optimizers for deep learning. *arXiv:1910.05446* **2019** [cs.LG].
- [282] Zhou, J.; Gandomi, A.H.; Chen, F.; Holzinger, A. Evaluating the quality of machine learning explanations: A survey on methods and metrics. *Electronics* **2021**, *10*, 593.
- [283] Oliveira, T.A.d.; Silva, M.P.d.; Maia, E.H.B.; Silva, A.M.d.; Taranto, A.G. „Virtual Screening Algorithms in Drug Discovery: A Review Focused on Machine and Deep Learning Methods”. *Drugs Drug Candidates* **2023**, *2*(2), 311-334.
- [284] He, K.; Zhang, X.; Ren, S.; Sun, J. Deep residual learning for image recognition. In Proceedings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition, Honolulu, HI, U.S.A., 27–30 June 2016, 770–778.
- [285] Zhai, Y.; Caruso, A.; Gao, S.; Paesani, F. Active Learning of Many-Body Configuration Space: Application to the Cs⁺-Water MB-Nrg Potential Energy Function as a Case Study. *J. Chem. Phys.* **2020**, *152* (14).
- [286] Abou Baker, N.; Zengeler, N.; Handmann, U. A Transfer Learning Evaluation of Deep Neural Networks for Image Classification. *Mach. Learn. Knowl. Extr.* **2022**, *4*, 22-41.
- [287] Cai, C.; Wang, S.; Xu, Y.; Zhang, W.; Tang, K.; Ouyang, Q.; Lai, L.; Pei, J. Transfer Learning for Drug Discovery. *J. Med. Chem* **2020**, *63*, 16, 8683–8694.
- [291] Kaiser, S.; Engell, S. Integrating Superstructure Optimization under Uncertainty and Optimal Experimental Design in early Stage Process Development. *Comput. Aided Chem. Eng* **2020**, *48*, 799-804.
- [292] Schulz, M.A.; Yeo, B.T.T.; Vogelstein, J.T.; Mourao-Miranada, J.; Kather, J.N.; Kording, K.; Richards, B.; Bzdok, D. Different scaling of linear models and deep learning in UKBiobank brain images versus machine-learning datasets. *Nat. Commun* **2020**, *11*(1), 4238.

- [293] Hua, C.; Cao, X.; Liao, B.; Li, S. Advances on intelligent algorithms for scientific computing: an overview. *Front. neurorobot* **2023**, *17*, 1190977.
- [294] Pate, A.; Riley, R.D.; Collins, G.S.; van Smeden, M.; Van Calster, B.; Ensor, J.; Martin, G.P. Minimum sample size for developing a multivariable prediction model using multinomial logistic regression. *Stat Methods Med Res* **2023**, *32*(3), 555–571.
- [295] Cano, J.; O’neill, W.D.; Penn, R.D.; Blair, N.P.; Kashani, A.H.; Ameri, H.; Kaloostian, C.L.; Shahidi, M. Classification of advanced and early stages of diabetic retinopathy from non-diabetic subjects by an ordinary least squares modeling method applied to OCTA images. *Biomed. Opt. Express* **2020**, *11*(8), 4666–4678.
- [296] Ament, S.E.; Gomes, C.P. Sparse Bayesian Learning via Stepwise Regression. Proceedings of the 38th International Conference on Machine Learning, PMLR 139:264-274, 2021.
- [297] Adnan, R.M.; Liang, Z.; Heddami, S.; Zounemat-Kermani, M.; Kisi, O.; Li, B. „Least square support vector machine and multivariate adaptive regression splines for streamflow prediction in mountainous basin using hydro-meteorological data as inputs”. *J. Hydrol* **2020**, *586*, 124371.
- [298] Dai, Y.; Wang, Y.; Leng, M.; Yang, X.; Zhou, Q. LOWESS smoothing and Random Forest based GRU model: A short-term photovoltaic power generation forecasting method. *Energy* **2022**, *256*, 124661.
- [299] Klosin, S.; Vives-i-Bastida, J. Bagged Polynomial Regression and Neural Networks. *arXiv:2205.08609v1* **2022** [cs.LG].
- [300] Caro, M.C.; Huang, H.Y.; Cerezo, M. et al. Generalization in quantum machine learning from few training data. *Nat Commun* **2022**, *13*, 4919.
- [301] Jo, T. Instance Based Learning. In *Machine Learning Foundations 2021*. Springer, Cham.
- [302] Ko, B.; Gu, G.; Kim, H.G. Learning With Memory-Based Virtual Classes for Deep Metric Learning. Proceedings of the IEEE/CVF International Conference on Computer Vision (ICCV), 2021.
- [303] Kang, S. *k*-Nearest Neighbor Learning with Graph Neural Networks. *Mathematics* **2021**, *9*, 830.
- [304] Wan, A.; Dunlap, L.; Ho, D.; Yin, J.; Lee, S.; Jin, H.; Petryk, S.; Bargal, S.A.; Gonzalez, E.J. NBDT: Neural-Backed Decision Trees. *arXiv:2004.00221v3* **2020** [cs.LG].
- [305] Kurani, A.; Doshi, P.; Vakharia, A. et al. A Comprehensive Comparative Study of Artificial Neural Network (ANN) and Support Vector Machines (SVM) on Stock Forecasting. *Ann. Data. Sci* **2023**, *10*, 183–208.
- [306] Khacef, L.; Rodriguez, L.; Miramond, B. Improving Self-Organizing Maps with Unsupervised Feature Extraction. In: Yang, H.; Pasupa, K.; Leung, A.C.S.; Kwok, J.T.; Chan, J.H.; King, I. (eds) *Neural Information Processing. ICONIP 2020. Lecture Notes in Computer Science()*, vol 12533. Springer, Cham.
- [307] Xu, Y.; Wang, Y.; Yan, T. et al. Quality-related locally weighted soft sensing for non-stationary processes by a supervised Bayesian network with latent variables. *Front Inform Technol Electron Eng* **2021**, *22*, 1234–1246.
- [308] Widagda, I.G.A. et al. Invariant moment and learning vector quantization (LVQ NN) for images classification. *J. Phys Conf. Ser.* **2021**, *1722*, 012003.
- [309] Roozbeh, M.; Arashi, M.; Hamzah, N.A. Generalized Cross-Validation for Simultaneous Optimization of Tuning Parameters in Ridge Regression. *Iran J Sci Technol Trans Sci* **2020**, *44*, 473–485.
- [310] Hazarika, B.B.; Gupta, D.; Borah, P. An intuitionistic fuzzy kernel ridge regression classifier for binary classification. *Appl. Soft Comput* **2021**, *112*, 107816.
- [311] Bedoui, A.; Lazar, N. Bayesian empirical likelihood for ridge and lasso regressions. *Comput. Stat. Data Anal* **2020**, *145*, 106917.

- [312] Tay, J. K.; Narasimhan, B.; Hastie, T. Elastic Net Regularization Paths for All Generalized Linear Models. *J Stat Softw* **2023**, *106*:1.
- [313] Márquez-Vera, M.A.; Ramos-Velasco, L.E.; López-Ortega, O.; Zúñiga-Peña, N.S.; Ramos-Fernández, J.C.; Ortega-Mendoza, R.M. Inverse fuzzy fault model for fault detection and isolation with least angle regression for variable selection. *Comput. Ind. Eng* **2021**, *159*, 107499.
- [314] Bijral, R.K.; Manhas, J.; Sharma, V. Characterization of Molecular Dynamic Trajectory Using K-means Clustering. In: Rathore, V.S.; Sharma, S.C.; Tavares, J.M.R.; Moreira, C.; Surendiran, B. (eds) *Rising Threats in Expert Applications and Solutions. Lecture Notes in Networks and Systems 2022*, vol 434. Springer, Singapore.
- [315] Sarker, I.H. Machine Learning: Algorithms, Real-World Applications and Research Directions. *SN COMPUT. SCI* **2021**, *2*, 160.
- [316] Zhang, H.; Jiang, T.; Shan, G. Identification of Hot Spots in Protein Structures Using Gaussian Network Model and Gaussian Naive Bayes. *Biomed Res Int* **2016**, *2016*:4354901.
- [317] Selvan, S., Thangaraj, S. J. J., Samson Isaac, J., Benil, T., Muthulakshmi, K., Almoallim, H. S.; Ali Alharbi, S.; Kumar, R.R.; Timothy, S.P. An Image Processing Approach for Detection of Prenatal Heart Disease. *Biomed Res Int* **2022**, *2022*:2003184.
- [318] Kelly, A.; Johnson, M.A. Investigating the Statistical Assumptions of Naïve Bayes Classifiers, 2021 55th Annual Conference on Information Sciences and Systems (CISS), Baltimore, MD, USA, 2021.
- [319] Puri, M.; Pathak, Y.; Sutariya, V.K.; Tipparaju, S.; Moreno, Wilfrido (Eds.). *Artificial neural network for drug design, delivery and disposition*, Elsevier Inc., 2015.
- [320] Vora, L. K.; Gholap, A. D.; Jetha, K.; Thakur, R.R.S.; Solanki, H. K.; Chavda, V.P. Artificial intelligence in pharmaceutical technology and drug delivery design. *Pharmaceutics* **2023**, *15*(7), 1916.
- [321] Alqarni, A.A.; Alsharif, N.; Khan, N.A.; Georgieva, L.; Pardede, E.; Alzahrani, M.Y. MNN-XSS: Modular neural network based approach for XSS attack detection. 2022.
- [325] Shi, W.; Singha, M.; Srivastava, G.; Pu, L.; Ramanujam, J.; Brylinski, M. Pocket2Drug: An Encoder-Decoder Deep Neural Network for the Target-Based Drug Design. *Front. pharmacol.* **2022**, *13*, 837715.
- [326] Arai H.; Chayama Y.; Iyatomi H.; Oishi K. Significant dimension reduction of 3D brain MRI using 3D convolutional autoencoders. In *Proceedings of the 40th Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society (EMBC)*, Honolulu, HI, USA, 17–21 July 2018, 5162–5165.
- [327] Maray, N.; Ngu, A. H.; Ni, J.; Debnath, M.; Wang, L. Transfer Learning on Small Datasets for Improved Fall Detection. *Sensors* **2023**, *23*, 2-24.
- [328] Karamizadeh, S.; Abdullah, S.M.; Manaf, A.A.; Zamani, M.; Hooman, A. An overview of principal component analysis. *J. Signal Process. Syst* **2020**, *4*(3B), 173-175.
- [329] Beattie, J.R.; Esmonde-White, F.W. Exploration of principal component analysis: deriving principal component analysis visually using spectra. *J. Appl. Spectrosc* **2021**, *75*(4), 361-375.
- [330] Sarstedt, M.; Ringle, C.M.; Hair, J.F. Partial least squares structural equation modeling. In *Handbook of market research*. Cham: Springer International Publishing. 2021.
- [331] Brodeur, Z.P.; Herman, J.D.; Steinschneider, S. Bootstrap aggregation and cross-validation methods to reduce overfitting in reservoir control policy search. *Water Resour. Res* **2020**, *56*(8), e2020WR027184.
- [332] Velthoen, J.; Dombry, C.; Cai, J.J.; Engelke, S. Gradient boosting for extreme quantile regression. *Extremes* **2023**, *26*(4), 639-667.
- [333] Wang, W.; Sun, D. The improved AdaBoost algorithms for imbalanced data classification. *Inf. Sci* **2021**, *563*, 358-374.

- [334] Blanco-González, A.; Cabezón, A.; Seco-González, A.; Conde-Torres, D.; Antelo-Riveiro, P.; Piñeiro, Á.; Garcia-Fandino, R. The Role of AI in Drug Discovery: Challenges, Opportunities, and Strategies. *Pharmaceuticals* **2023**, *16*, 2-8.
- [335] Mendenhall, J.; Meiler, J. Improving quantitative structure-activity relationship models using Artificial Neural Networks trained with dropout. *J. Comput. Aided Mol. Des.* **2016**, *30*(2), 177–189.
- [336] Todeschini R., **Consonni V.** *Molecular Descriptors for Chemoinformatics*, (Mannhold R., Kubinyi H., Folkers G., Weinheim, Wiley-VCH editors), 2009.
- [337] Muratov, E.N.; Bajorath, J.; Sheridan, R.P.; Tetko, I.V.; Filimonov, D.; Poroikov, V.; Tropsha, A. QSAR without borders. *Chem Soc Rev* **2020**, *49*(11), 3525-3564.
- [338] Toropov, A.A.; Toropova, A.P. QSPR/QSAR: State-of-art, weirdness, the future. *Molecules* **2020**, *25*(6), 1292.
- [339] Keyvanpour, M.R.; Shirzad, M.B. An analysis of QSAR research based on machine learning concepts. *Curr. Drug Discov. Technol* **2021**, *18*(1), 17-30.
- [342] Jakhar, R.; Dangi, M.; Khichi, A.; Chhillar, A.K. Relevance of molecular docking studies in drug designing. *Curr. Bioinform* **2020**, *15*(4), 270-278.
- [343] Stanzione, F.; Giangreco, I.; Cole, J.C. Use of molecular docking computational tools in drug discovery. *Progr. Med Chem* **2021**, *60*, 273-343.
- [344] Jia, L.; Gao, H.; Machine learning for in silico ADMET prediction. *Methods Mol Biol* **2022**, 2390:447-460.
- [345] Daoud, N.E.H.; Borah, P.; Deb, P. K.; Venugopala, K.N.; Hourani, W.; Alzweiri, M.; Tiwari, V. ADMET profiling in drug discovery and development: perspectives of in silico, in vitro and integrated approaches. *Curr. Drug Metab* **2021**, *22*(7), 503-522.
- [348] Movassagh, A.A. et al. „Artificial neural networks training algorithm integrating invasive weed optimization with differential evolutionary model”. *Ambient Intell. Humaniz. Comput* **2023**, 1-9.
- [349] Kaveh, M.; Mesgari, M.S. Application of Meta-Heuristic Algorithms for Training Neural Networks and Deep Learning Architectures: A Comprehensive Review. *Neural Process. Lett* **2022**, *31*:1-104.
- [350] Miikkulainen, R.; Liang, J.; Meyerson, E.; Rawal, A.; Fink, D.; Francon, O.; Hodjat, B. Evolving deep neural networks. In *Artificial intelligence in the age of neural networks and brain computing* **2024**. Academic Press.
- [351] Du, Y.; Hua, Z.; Liu, C.; Lv, R.; Jia, W.; Su, M. ATR-FTIR combined with machine learning for the fast non-targeted screening of new psychoactive substances. *Forensic Sci. Int* **2023**, *349*, 111761.
- [352] Haghghat, E.; Juanes, R. SciANN: A Keras/TensorFlow wrapper for scientific computations and physics-informed deep learning using artificial neural networks. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng* **2021**, *373*, 113552.
- [353] Wallach, I.; Dzamba, M.; Heifets, A. AtomNet: A Deep Convolutional Neural Network for Bioactivity Prediction in Structure-based Drug Discovery. *arXiv:1510.02855* **2015** [cs.LG].
- [354] Simonyan, K.; Zisserman, A. Very Deep Convolutional Networks for Large-Scale Image Recognition. *arXiv 1409.1556* **2014** [cs.LG].
- [355] Brownlee, J.A. Gentle Introduction to the Rectified Linear Unit (ReLU). *Deep Learning Performance* **2016**, *30*, 270–500.
- [361] Hari, U.; Bevi, A.R. Self-supervised learning based low light image enhancement using convolutional neural networks, *2022 OPJU International Technology Conference on Emerging Technologies for Sustainable Development (OTCON)*, Raigarh, Chhattisgarh, India, 2023.
- [362] Feng, J.; Ouyang, C. Self-Supervised Learning Based Target-Aware Session Recommendation Algorithm, *2023 IEEE 5th International Conference on Advanced Information and Communication Technologies (AICT)*, Lviv, Ukraine, 2023, 1-4.

- [365] Śmieja, F.J.; Mühlenbein, H. (1990). The geometry of multi-layer perceptron solutions. *Parallel Computing*, 14(3), 261-275.
- [366] Castro, W.; Oblitas, J.; Santa-Cruz, R.; Avila-George, H. Multilayer perceptron architecture optimization using parallel computing techniques. *PloS one* **2017**, 12(12), e0189369.
- [367] Jasinschi, R.S.; Dimitrova, N.; McGee, T.; Agnihotri, L.; Zimmerman, J.; Li, D.; Louie, J. A probabilistic layered framework for integrating multimedia content and context information. In 2002 IEEE International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing, Orlando, FL, USA, 2002, pp. II-2057-II-2060.
- [370] Wiley, V.; Lucas, T. Computer vision and image processing: a paper review. *Int. J. Artif. Intell. Res* **2018**, 2(1), 29-36.
- [371] Li, C.; Tang, Z.; Zhang, W.; Ye, Z.; Liu, F. GEPIA2021: integrating multiple deconvolution-based analysis into GEPIA. *Nucleic Acids Res. Spec. Publ* **2021**, 49(W1), W242-W246.
- [372] Makarkin, M.; Bratashov, D. State-of-the-art approaches for image deconvolution problems, including modern deep learning architectures. *Micromachines* **2021**, 12(12), 1558.
- [373] Li, D.; Hu, J.; Wang, C.; Li, X.; She, Q.; Zhu, L.; Chen, Q. Involution: Inverting the inference of convolution for visual recognition. In *Proceedings of the IEEE/CVF conference on computer vision and pattern recognition 2021*, 12321-12330.
- [379] Xu, M.; Yoon, S.; Fuentes, A.; Park, D.S. A comprehensive survey of image augmentation techniques for deep learning. *Pattern Recognit* **2023**, 137, 109347.
- [380] Chu, P.; Bian, X.; Liu, S.; Ling, H. Feature space augmentation for long-tailed data. In *Computer Vision—ECCV 2020: 16th European Conference, Glasgow, UK, August 23–28, 2020, Proceedings, Part XXIX*, 16. Springer International Publishing, 694-710.
- [381] Hou, Y.; Zheng, L.; Gould, S. Learning to structure an image with few colors and Beyond. arXiv:2208.08438 **2022** [cs.CV].
- [384] Särkkä, S.; Svensson, L. *Bayesian filtering and smoothing*; Cambridge university press, 2023.
- [385] Hou, Q.; Zhang, L.; Cheng, M.M.; Feng, J. Strip pooling: Rethinking spatial pooling for scene parsing. arXiv:2003.13328 **2020** [cs.CV].
- [388] Zhou, W.; Qian, Z.; Ni, X.; Tang, Y.; Guo, H.; Zhuang, S. Dense Convolutional Neural Network for Identification of Raman Spectra. *Sensors* **2023**, 23, 7433.
- [389] Chen, L.; Li, S.; Bai, Q.; Yang, J.; Jiang, S.; Miao, Y. Review of Image Classification Algorithms Based on Convolutional Neural Networks. *Remote Sens.* **2021**, 13, 4712.
- [390] Pu, Y.; Gan, Z.; Henao, R.; Yuan, X.; Li, C.; Stevens, A.; Carin, L. Variational autoencoder for deep learning of images, labels and captions. *Adv. Neural Inf. Process. Syst.* **2016**, 29, pp. 2352–2360.
- [391] Liu, W.; Li, C.; Xu, N.; Jiang, T.; Rahaman, M.M.; Sun, H.; Wu, X.; Hu, W.; Chen, H.; Sun, C.; Yao, Y.; Grzegorzec, M. CVM-Cervix: A Hybrid Cervical Pap-Smear Image Classification Framework Using CNN, Visual Transformer and Multilayer Perceptron. arXiv:2206.00971 **2022** [cs.CV].
- [392] Pintelas, E.; Livieris, I.E.; Pintelas, P.E. A Convolutional Autoencoder Topology for Classification in High-Dimensional Noisy Image Datasets. *Sensors* **2021**, 21, 7731.
- [393] Vaswani, A.; Shazeer, N.; Parmar, N.; Uszkoreit, J.; Jones, L.; Gomez, A.N.; Kaiser, L.; Polosukhin, I. Attention is All you Need. arXiv:1706.03762 **2017** [cs.CV].
- [398] Guo X.; Liu X.; Zhu E.; Yin J. Deep clustering with convolutional autoencoders. In *Proceedings of the International Conference on Neural Information Processing 2017*, Guangzhou, China, 373–382.
- [399] Devlin, J.; Chang, M.W.; Lee, K.; Toutanova, K. BERT: Pre-training of Deep Bidirectional Transformers for Language Understanding. In *Proceedings of the Conference of the North American Chapter of the Association for Computational*

- Linguistics: Human Language Technologies, Volume 1 (Long and Short Papers), Minneapolis, Minnesota, U.S.A., 2019, 4171–4186.
- [400] Chen, H.; Wang, Y.; Guo, T.; Xu, C.; Deng, Y.; Liu, Z.; Ma, S.; Xu, C.; Xu, C.; Gao, W. Pre-trained image processing transformer. arXiv:2012.00364 **2020** [cs.CV].
- [401] Alshammari, H.; Gasmi, K.; Ben Ltaifa, I.; Krichen, M.; Ben Ammar, L.; Mahmood, M. A. Olive Disease Classification Based on Vision Transformer and CNN Models. *Comput. Intell. Neurosci.* **2022**, 3998193.
- [402] Elreedy, D.; Atiya, A. A. Comprehensive Analysis of Synthetic Minority Oversampling Technique (SMOTE) for Handling Class Imbalance. *Inf. Sci.* **2019**, *505*, 32-64.
- [403] Tunstall, L.; Von Werra, L.; Wolf, T. *Natural language processing with transformers*. "O'Reilly Media, Inc., 2022.
- [404] Williams, W.; Ringer, S.; Ash, T.; MacLeod, D.; Dougherty, J.; Hughes, J. Hierarchical quantized autoencoders. *Advances in Neural Information Processing Systems* **2020**, *33*, 4524-4535.
- [405] Agarap, A.F.M. Deep Learning using Rectified Linear Units (ReLU). arXiv:1803.08375 **2018** [cs.NE].
- [406] Ruby, A.U.; Theerthagiri, P.; Jacob, I.J.; Vamsidhar, Y. Binary cross entropy with deep learning technique for image classification. *IJATCSE* **2020**, *9*(4), 1–5.
- [407] Dubey, S. R.; Singh, S.K.; Chaudhuri, B.B. Activation functions in deep learning: A comprehensive survey and benchmark. arXiv:2109.14545 **2021** [cs.LG].
- [408] Hodson, T.O. Root mean square error (RMSE) or mean absolute error (MAE): When to use them or not. *Geosci. Model Dev. Discuss* **2022**, *7*(3):1247-1250.
- [409] Barron, A. R. Predicted squared error: a criterion for automatic model selection. In *Self-organizing methods in modeling*. CRC Press, 2020.
- [410] Cui, X.; Zhang, W.; Tüske, Z.; Picheny, M. Evolutionary stochastic gradient descent for optimization of deep neural networks. arXiv:1810.06773 **2018** [cs.LG].
- [413] Huk, M. Stochastic optimization of contextual neural networks with RMSprop. In *Intelligent Information and Database Systems: 12th Asian Conference, ACIIDS 2020, Phuket, Thailand, March 23–26, 2020, Proceedings, Part II(12)*. Springer International Publishing, 343-352.
- [414] Guo, Z.; Xu, Y.; Yin, W.; Jin, R.; Yang, T. A novel convergence analysis for algorithms of the adam family. arXiv:2104.14840 **2021** [math.OC].
- [415] Zheng, Q.; Tian, X.; Jiang, N.; Yang, M. Layer-wise learning based stochastic gradient descent method for the optimization of deep convolutional neural network. *J INTELL FUZZY SYST* **2019**, *37*(4), 5641-5654.
- [416] James, G.; Witten, D.; Hastie, T.; Tibshirani, R.; Taylor, J. Resampling methods. In *An Introduction to Statistical Learning: with Applications in Python*. Cham: Springer International Publishing, 2023, 201-228.
- [417] Yu, C.H. Resampling methods: concepts, applications, and justification. *Pract. Assess. Res. Eval* **2019**, *8*(1), 19.
- [418] Jung, Y. Multiple predicting K-fold cross-validation for model selection. *J NONPARAMETR STAT* **2018**. *30*(1), 197-215.
- [419] Magnusson, M.; Vehtari, A.; Jonasson, J.; Andersen, M. Leave-one-out cross-validation for Bayesian model comparison in large data. In *International conference on artificial intelligence and statistics 2020*. PMLR.
- [420] Sun, Z.; Hu, W.; Zhang, Q.; Qu, Y. Bootstrapping entity alignment with knowledge graph embedding. In *IJCAI*, Vol. 18, 2018.
- [421] Tsamardinos, I.; Greasidou, E.; Borboudakis, G. Bootstrapping the out-of-sample predictions for efficient and accurate cross-validation. *Mach. Learn* **2018**, *107*, 1895-1922.

- [422] Brownlee, J. *How to Calculate Precision, Recall, and F-Measure for Imbalanced Classification*, 2020, Disponibil online: <https://machinelearningmastery.com/>.
- [423] Landis, J.R.; Koch, G.G. The measurement of observer agreement for categorical data. *Biometrics* **1977**, *33*,159–174.
- [424] Hugo dos Santos, V.J.M.; Do Canto Bruzza, E.; de Lima, J.; Lourega, R.V.; Rodrigues, R.F. Discriminant Analysis and Cluster Analysis of Biodiesel Fuel Blends Based on Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FTIR). *ENERG FUEL* **2016**, *30*, 4905–4915.
- [425] Han, B.; Hu, M.; Wang, X.; Ren, F. A Triple-Structure Network Model Based upon MobileNet V1 and Multi-Loss Function for Facial Expression. *Symmetry* **2022**, *14*(10), 2055.
- [426] Cheridito, P.; Jentzen, A.; Riekert, A.; Rossmannek, F. A proof of convergence for gradient descent in the training of artificial neural networks for constant target functions. arXiv:2102.09924 **2021** [math.NA].
- [432] Wolfram Research, I. *Mathematica*, Version 13.3; Wolfram Research, Inc.: Champaign, IL, U.S.A., 2023.
- [433] Kim, P. *MATLAB Deep Learning: With Machine Learning, Neural Networks and Artificial Intelligence*; Springer: Seoul, 2017.
- [453] Ali, L.; Alnajjar, F.; Jassmi, H.A.; Gocho, M.; Khan, W.; Serhani, M.A. Performance Evaluation of Deep CNN-Based Crack Detection and Localization Techniques for Concrete Structures. *Sensors* **2021**, *21*, 1688.
- [454] Alshammari, H.; Gasmi, K.; Ben Ltaifa, I.; Krichen, M.; Ben Ammar, L.; Mahmood, M. A. Olive Disease Classification Based on Vision Transformer and CNN Models. *Comput. Intell. Neurosci* **2022**, 2022:3998193.
- [455] Liu, W.; Li, C.; Xu, N.; Jiang, T.; Rahaman, M.M.; Sun, H.; Wu, X.; Hu, W.; Chen, H.; Sun, C.; Yao, Y.; Grzegorzec, M. CVM-Cervix: A Hybrid Cervical Pap-Smear Image Classification Framework Using CNN, Visual Transformer and Multilayer Perceptron. arXiv:2206.00971 2022.
- [456] Gheflati, B.; Rivaz, H. Vision Transformers for Classification of Breast Ultrasound Images. In Proceedings of the Conference of the IEEE Engineering in Medicine & Biology Society (EMBC), Glasgow, Scotland, United Kingdom, 2022, 480-483.
- [457] Burlacu, C.M.; Burlacu, A.C.; Praisler, M.; Paraschiv, C. Harnessing Deep Convolutional Neural Networks Detecting Synthetic Cannabinoids: A Hybrid Learning Strategy for Handling Class Imbalances in Limited Datasets. *Inventions* **8** **2023**, 129.
- [458] Burlacu, C.M.; Gosav, S.; Burlacu, B.A.; Praisler, M. Convolutional Neural Network detecting synthetic cannabinoids. 2021 International Conference on E-Health and Bioengineering (EHB 2021), 9th Edition, 2021, IEEE, pp. 1-4.
- [465] Intel. Disponibil online: <https://www.intel.com/content/www/us/en/docs/onemkl/developer-guide-windows/2023-0/overview-intel-distribution-for-linpack-benchmark.html>
- [468] KnowItAll Analytical Edition Software. Disponibil online: <https://sciencesolutions.wiley.com/knowitall-analytical-edition-software/>
- [469] FDM SDK Spectroscopic Search Engine. Disponibil online: <https://www.fdm-spectra.com/fdm-sdk-spectroscopic-search-engine>.
- [470] Spectragryph. Disponibil online: <https://www.ffmpeg2.de/spectragryph>.
- [471] Glorot, X.; Bengio, Y. Understanding the difficulty of training deep feedforward neural networks. *J Mach Learn Res* **2010**, *9*, 249-256.
- [472] He, K.; Zhang, X.; Ren, S.; Sun, J. Delving Deep into Rectifiers: Surpassing Human-Level Performance on ImageNet Classification. IEEE International Conference on Computer Vision (ICCV 2015), 1502.
- [473] Chai, T.; Draxler, R.R. Root mean square error (RMSE) or mean absolute error (MAE). *Geosci. Model Dev. Discuss* **2024**, *7*(1), 1525-1534.

- [474] Shoham, R.; Permuter, H. Amended Cross-Entropy Cost: An Approach for Encouraging Diversity in Classification Ensemble (Brief Announcement). In: Dolev, S., Hendler, D., Lodha, S., Yung, M. (eds) Cyber Security Cryptography and Machine Learning. CSCML 2019. Lecture Notes in Computer Science(), vol 11527. Springer, Cham.
- [476] Banerjee, C.; Mukherjee, T.; Pasilio Jr, E. The multi-phase ReLU activation function. In Proceedings of the 2020 ACM Southeast Conference, 2020, 239-242.
- [480] Sedgwick, P. A comparison of parametric and non-parametric statistical tests. *BMJ*, 2015, 350.
- [481] Bellet, A.; Habrard, A.; Sebban, M. Metric learning. Morgan & Claypool Publishers, 2015.
- [483] Chefer, H.; Gur, S.; Wolf, L. Transformer interpretability beyond attention visualization. In Proceedings of the IEEE/CVF conference on computer vision and pattern recognition, 2021, 782-791.
- [484] Berger, M. Visually analyzing contextualized embeddings. In 2020 IEEE Visualization Conference (VIS), 2020, 276-280.
- [485] Szegedy, C. et al. “Going deeper with convolutions. The IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)”, 2015 1-9. 10.1109/CVPR.2015.7298594.
- [490] Burlacu, C.M.; Burlacu, A.C.; Praisler, M. Sensitivity analysis of Artificial Neural Networks identifying JWH synthetic cannabinoids built with alternative training strategies and methods. *Inventions* **2022**, 7, 82.
- [491] Burlacu, C.M.; Praisler, M.; Burlacu, A.C. Computerized Detection of JWH Synthetic Cannabinoids Class Membership Based on Machine Learning Algorithms and Molecular Descriptors. *2022 IEEE International Conference on Automation, Quality and Testing, Robotics (AQTR)*, May 19-21, 2022, IEEE, Cluj - Napoca, Romania.
- [492] Rogers, D.; Hahn, M. Extended-Connectivity Fingerprints. *J. Chem. Inf. Model* **2010**, 50(5), 742-754.