



УДК 519.6

А. Л. Заворотный, В. С. Касьянюк, кандидаты физ.-мат. наук
Киевский национальный университет им. Тараса Шевченко
(Украина, 03127, Киев, пр. Глушкова, 6, корп. 2,
тел. (044)2590530, e-mail: zal_ua@inbox.ru)

Математическое моделирование «электронного носа» как задача парето-оптимизации

Разработан метод оценивания входа и выхода с сенсора, реагирующего на летучие соединения, по конечному числу калибровочных измерений, искаженных шумами. Метод может быть использован для создания новых измерительно-вычислительных систем, реализующих принцип «прибор + компьютер = новый прибор + новые возможности».

Розроблено метод оцінювання входу та виходу із сенсора, що реагує на летючі сполуки, за скінченною кількістю спотворених шумами калібровочних вимірювань. Метод може бути використаний для створення нових вимірювально-обчислювальних систем, які реалізують принцип «прилад + комп'ютер = новий прилад + нові можливості».

К л ю ч е в ы е с л о в а: распознавание, одорант, искаженные данные, измерительная система, парето-оптимизация.

Одной из сверхзадач в настоящее время является задача моделирования сознания человека. Данная задача — комплексная и состоит из многих подзадач, которые, в свою очередь, можно рассматривать как сложные независимые задачи. К ним относятся исследование логики принятия решений, моделирование человеческой памяти, распознавание образов и др. Распознавание образов также является комплексной задачей и состоит из распознавания визуальных образов («электронный глаз»), распознавания жидкостей («электронный язык»), распознавания запахов («электронный нос») и др. Рассмотрим один из подходов к моделированию электронного носа.

Метод регистрации данных о составе газовой среды основан на кварцевом микробалансе, т.е. на пропорциональности между массой Δm , адсорбированной на поверхности кварцевой пластины, и частотой колебаний Δf [1]:

$$\Delta f \approx -\frac{2f_0^2}{A\sqrt{\rho_q\mu_q}} \Delta m,$$

где f_0 — фундаментальная частота кварцевого резонатора; A — эффективная площадь поверхности кварца; μ_q — пьезоэлектрическая твердость; ρ_q — плотность кварца. Селективность сенсоров достигается посредством нанесения на поверхность кварца слоев, чувствительных к определенным химическим элементам.

Последующая обработка данных, полученных с сенсоров для распознавания одоранта, требует применения математической обработки, которая позволяет учесть шумы, присутствующие в результатах реальных измерений. Затем необходимо провести анализ и интерпретировать информацию о запахе за приемлемое время. Поскольку модель сенсора сложно описать, будем считать, что эта модель неизвестна.

В основе предлагаемого метода математической обработки лежит парето-оптимальный метод решения задачи калибровки неизвестной модели измерений [2], согласно которому неизвестная модель измерений может быть описана некоторым линейным оператором, действующим из одного гильбертова пространства в другое. Для построения оценок проведена серия калибровочных измерений на эталонных сигналах, используемых непосредственно для метода обработки, без оценивания модели. При таком подходе улучшается устойчивость полученных результатов относительно погрешностей в начальных данных.

В качестве критериев оптимальности выбраны условия минимизации дисперсии шума построенной оценки и минимизации математического ожидания среднеквадратичного отклонения построенных оценок выхода сенсоров от выхода некоторого желаемого (гипотетического) сенсора на эталонных сигналах. Метод является парето-оптимальным, поскольку для выбранных критериев решается задача одновременной их минимизации (т.е. задача оптимизации по Парето).

Итак, учитывая исходное предположение о том, что связь между входом и выходом сенсоров описывается неизвестным линейным оператором, и учитывая наличие шумов в результатах измерений, запишем следующую математическую модель, описывающую процесс измерения реакции сенсоров на одоранты:

$$\mathbf{y} = G\mathbf{u} + \mathbf{v}, \quad (1)$$

где $\mathbf{y} = (y_1 \dots y_n)^*$ — известный вектор реакций сенсоров на неизвестный запах \mathbf{u} ; $\mathbf{v} = (v_1 \dots v_n)^*$ — шумы, искажающие результаты измерений \mathbf{y} ; $\mathbf{u} = (u_1 \dots u_m)^*$ — набор концентраций элементарных одорантов; G — неизвестный линейный оператор, моделирующий измерение сенсорами неизвестного сигнала \mathbf{u} ; $*$ — символ сопряжения. Полагаем, что $M(\mathbf{v}) = 0$, где M — символ математического ожидания, а также считаем, что нам известен невырожденный ковариационный оператор шумов \mathfrak{R} [3].

Допустим, что было проведено q калибровочных (эталонных) измерений по схеме (1) на известных одорантах \mathbf{u}_j , $j = \overline{1, q}$. Тогда имеем q результатов измерений:

$$\mathbf{y}_j = G\mathbf{u}_j + \mathbf{v}_j, \quad j = \overline{1, q}. \quad (2)$$

При этом считаем, что ковариационный оператор шумов также равен \mathfrak{R} и выполняется условие $M(\mathbf{v}_j) = 0$.

Поскольку характеристики сенсоров считаются неизвестными, используем (2) для поиска оценки концентраций элементарных одорантов $\hat{\mathbf{u}}$ (или оценки сигнала $P\mathbf{u}$ от некоторого желаемого сенсора P как результат его реакции на эти одоранты) в виде $B\mathbf{y}$, где B — некоторый линейный оператор [3]. Такой поиск будем проводить с помощью одновременной минимизации дисперсии ошибки оценки и математического ожидания среднеквадратичного отклонения построенных оценок выхода сенсоров от выхода некоторого желаемого сенсора на выбранных эталонных сигналах. Следовательно, оператор B является решением задачи Парето одновременной минимизации

$$\begin{aligned} M \|\mathbf{B}\mathbf{v}\|^2 &\rightarrow \min; \\ M \sum_{j=1}^q \|\mathbf{B}\mathbf{y}_j - P\mathbf{u}_j\|^2 &\rightarrow \min. \end{aligned} \quad (3)$$

Данная задача поставлена и успешно решена в общем случае для линейных операторов G , P , B , действующих из одного сепарабельного гильбертова пространства в другое [4]. При этом на оператор G накладывается условие ограниченности.

Минимизируем выпуклую свертку критериев задачи Парето (3):

$$M \left(\lambda \|\mathbf{B}\mathbf{v}\|^2 + (1-\lambda) \sum_{j=1}^q \|\mathbf{B}\mathbf{y}_j - P\mathbf{u}_j\|^2 \right) \rightarrow \min, \quad \lambda \in (0; 1). \quad (4)$$

Производную по Фреше от выпуклой свертки (4) приравняем к нулю и получим континуальное множество вида

$$\mathbf{B} = \sum_{j=1}^q P\mathbf{u}_j f_j^* \left(\sum_{j=1}^q f_j f_j^* + (\alpha + q) \mathfrak{R} \right)^{-1}, \quad \alpha \in (0; +\infty), \quad (5)$$

где $f_j = M\mathbf{y}_j$, $\alpha = \lambda / (1-\lambda)$ — параметр парето-оптимизации. Данное множество является множеством эффективных решений задачи Парето (3).

Разработанный метод использован для интерпретации результатов эксперимента по распознаванию одорантов спиртовой группы. При этом

была рассмотрена задача (2) для евклидовых пространств при условии, что известна ковариационная матрица R , $\det R \neq 0$ является аналогом ковариационного оператора \mathfrak{R} для евклидова пространства, а оператор P — тождественный. Таким образом, оценены неизвестные наборы концентраций элементарных одорантов.

Согласно (5) выражения для входа и выхода с сенсоров ($\hat{\mathbf{u}}$ и $\hat{\mathbf{y}}$) в этом случае принимают следующий вид:

$$\hat{\mathbf{u}} = \sum_{j=1}^q \mathbf{u}_j f_j^* \left(\sum_{j=1}^q f_j f_j^* + (\alpha + q) \mathfrak{R} \right)^{-1} \mathbf{y}, \quad \alpha \in (0; +\infty),$$

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathfrak{N} \hat{\mathbf{u}}, \quad (6)$$

где \mathfrak{N} — заданный экспертом оператор, моделирующий желаемую обработку сенсорами входных одорантов, или оператор, моделирующий оценку обработки сенсорами элементарных одорантов. Для вычисления оценки $f_j = M y_j$, используемой в формуле (6), в реальных условиях берется статистическое среднее. Параметр парето-оптимизации α может быть использован для регулирования соотношения между критериями парето-оптимизации, которые имеют противоположные тенденции к росту при изменении параметра α [2].

Следует заметить, что аналогично можно распознавать другие одоранты или смеси одорантов, или распределять одоранты по классам после соответствующих тестовых измерений.

Итак, применение предложенного подхода к результатам работы сенсоров позволяет создавать газоаналитические сенсорные системы, обладающие устойчивостью к погрешностям данных. Как следствие достигается повышенная надежность распознавания. Кроме того, поскольку предложенный метод не требует больших объемов вычислений, обработка результатов измерений может проводиться в реальном масштабе времени. Для реализации такой обработки можно использовать персональные компьютеры, что исключает необходимость расходовать средства на создание уникальных приборов с повышенным качеством распознавания. Предложенный метод в совокупности с оптимально выбранными чувствительными покрытиями и конструкцией сенсорной системы может значительно улучшить процесс распознавания летучих органических соединений.

Vapors sensor's input and output estimation methods with finite number of noised results of calibration measurements have been developed. The method can be used to create new measuring-calculating systems in accordance with the principle «device + PC = new device + new opportunities».

1. *Eichelbaum F., Borngraber R., Schroder J. et al.* Interface circuits for QCM sensors // Review of Scientific Instruments. — 1999. — **70**, № 5. — P. 2537—2545.
2. *Белов Ю. А., Заворотный А. Л., Касьянюк В. С.* Об одном подходе к задаче обработки измерений с использованием калибровочных сигналов на основе многокритериальной оптимизации // Проблемы управления и информатики. — 2001. — № 5. — С. 5—13.
3. *Пытьев Ю. П.* Математические методы интерпретации эксперимента. — М. : Высш. шк., 1989. — 351с.
4. *Заворотный А. Л.* Розв'язування задач моделювання ВОС надвисокої роздільної здатності на основі багатокритеріальної оптимізації // Вісник Київського університету. Фіз.-мат. науки. — 2004. — Вип. 3. — С. 198—205.

Поступила 24.06.11

ЗАВОРОТНЫЙ Андрей Леонидович, канд. физ.-мат. наук, науч. сотр. фак-та кибернетики Киевского национального университета им. Т. Шевченко, который окончил в 1999 г. Область научных исследований — некорректные задачи, методы восстановления функциональных зависимостей, теория возможности, численные методы, проектирование измерительно-вычислительных систем сверхвысокого разрешения.

КАСЬЯНЮК Вєда Станіславівна, канд. физ.-мат. наук, зав. сектором теоретической кибернетики фак-та кибернетики Киевского национального университета им. Т. Шевченко, который окончила в 1983 г. Область научных исследований — методы регуляризации некорректных задач, методы многокритериальной оптимизации, математические методы обработки и интерпретации измерений, измерительно-вычислительные системы сверхвысокого разрешения.