

РАЗДЕЛЕНИЕ СПЕКТРОВ ВЕЩЕСТВ В АППАРАТАХ НЕИНВАЗИВНОГО ИЗМЕРЕНИЯ КОНЦЕНТРАЦИИ

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
г. Минск, Республика Беларусь

Почтальонов З.С.

Михневич С.Ю. – к.ф.-т.н., доцент

В данной работе поднята проблематика выделения одного спектра из нескольких перекрывающихся друг друга спектров поглощения веществ. Рассмотрен один из возможных алгоритмов разложения полученного общего спектра на спектры отдельно взятых веществ.

Все большее распространение находят аппараты, которые определяют концентрацию веществ без химического анализа, а только по отраженному сигналу. Одной из основных проблем, с которыми приходится столкнуться при разработке данного устройства является наложение спектров поглощения различных веществ друг на друга. В качестве примера на Рис. 1 представлены графики поглощения меланина, гемоглобина и билирубина.

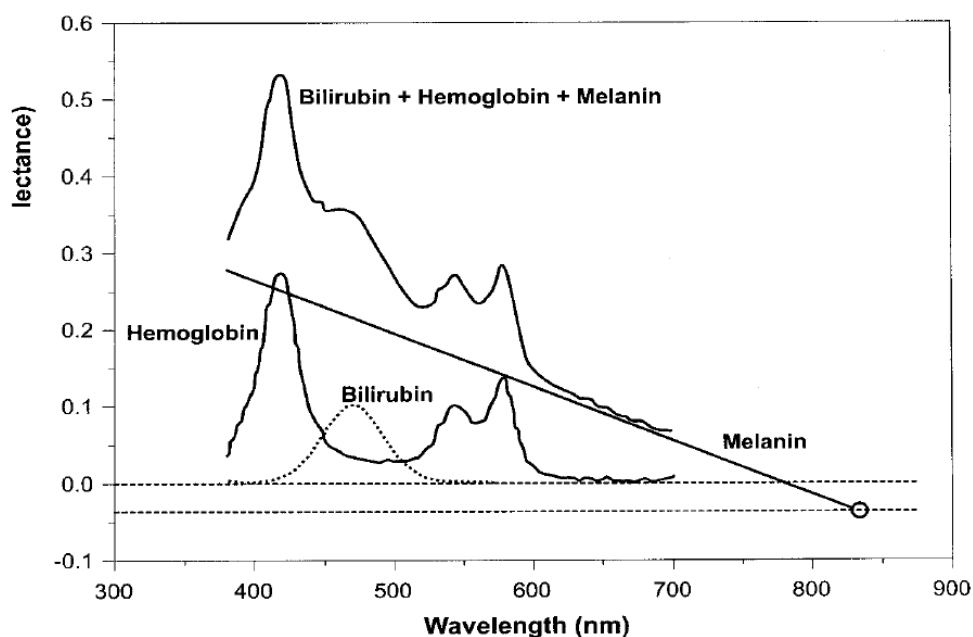


Рис. 1 Спектры поглощения меланина, гемоглобина, билирубина.

Для выделения спектров и определения концентрации веществ используются различные алгоритмы. Один из них это генетический алгоритм.

Генетический алгоритм (ГА) в качестве программы был впервые описан в 1989г. Гольдбергом на основе работ Холланда, который в 1975г. предложил схему генетического алгоритма. ГА представляет собой метод оптимизации, основанный на концепциях естественного отбора и генетики. В этом подходе переменные, характеризующие решение, представлены в виде «генов» в «хромосоме». ГА оперирует конечным множеством решений («популяцией») - генерирует новые решения как различные комбинации частей решений (популяций), используя такие операции, как «отбор», «рекомбинация» (скрещивание) и «мутация». Новые решения располагаются в «популяции» в соответствии с их положением на поверхности исследуемой функции.

Допустим нам нужно оптимизировать некоторую функцию $F(X_1, X_2, \dots, X_n)$. Пусть мы ищем ее глобальный минимум. Тогда, для реализации ГА нам нужно придумать, как мы будем хранить решения. По сути, нам нужно поместить все X_1 - X_n в некоторый вектор, который будет играть роль хромосомы. Пусть каждая особь состоит из массива X и значения функции F на переменных, извлеченных из этого массива.

Метод ГА состоит из следующих шагов, проиллюстрированных на рис. 2:

Генерация начальной «популяции» - заполнение популяции «особями», в которых элементы массива X («хромосомы») заполнены случайным образом. Выбор «родительской пары» - нескольких решений с наилучшими значениями F .

«Скрещивание» - берем случайную точку t на массиве X ($0..L-1$).

Теперь, все элементы массива с индексами $0-t$ новой особи («потомка») заполняем элементами с теми же индексами, но из массива X первой родительской особи. Остальные элементы заполняются из массива второй родительской особи. Для второго потомка делается наоборот - элементы $0-t$ берут от второго потомка,

а остальные - от первого.

Новые особи с некоторой вероятностью «мутируют», при этом меняются местами значения случайного параметра массива X этой особи. Вероятность «мутации» обычно полагают порядка 1%.

Полученные особи-потомки добавляются в популяцию после переоценки. Обычно новую особь добавляют взамен самой плохой старой особи, при условии что значение функции на новой особи выше значения функции на старой (плохой) особи. Степень обновления обычно настраивают так, чтобы как можно большее количество особей заменялось.

Если самое лучшее решение в популяции нас не удовлетворяет, то переходим на шаг 2.

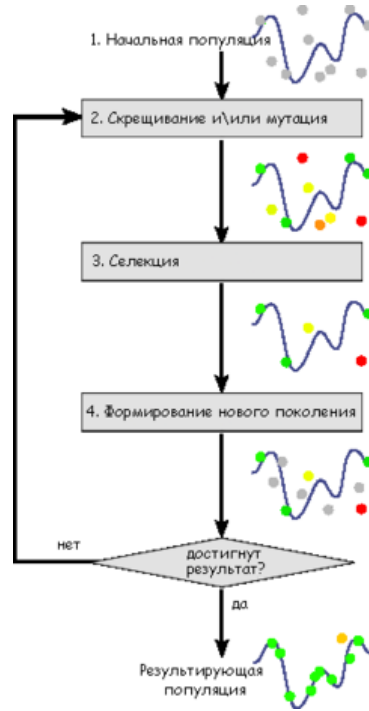


Рис. 2 Схема работы генетического алгоритма.

Такой метод реализован в программе GeneHunter, которую можно настроить для решения задачи разложения спектрального контура на составляющие.

Список использованных источников:

- 1 Goldberg D. Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning, Addison Wesley, 1989
- 2 Holland H. Adaptation in natural and artificial systems. University of Michigan Press, Ann Arbor, 1975