

مقایسه کارآیی شبکه‌های عصبی هوشمند، حداقل مربعات جزئی و گرادیان کاهشی تعمیم یافته در پردازش سیگنالهای حسگرهای شیمیایی

افسانه صفوی، ابوالفضل رستم زاده، سعید معصوم

بخش شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه شیراز، شیراز، ۷۱۴۵۴

First Author Email: safavi@chem.susc.ac.ir

چکیده

به منظور مرتبط ساختن سیگنالهای یک آرایه حسگر نوری با نتایج شیمیایی آن، الگوهای داده با روشهای متفاوتی از قبیل شبکه‌های عصبی هوشمند، حداقل مربعات جزئی و گرادیان کاهشی تعمیم یافته مورد بررسی قرار گرفته است.

واژه‌های کلیدی: شبکه‌های عصبی هوشمند، حداقل مربعات جزئی، گرادیان کاهشی تعمیم یافته

مقدمه

شبیه سازی، مدل سازی، برازش منحنی، آمار و تجزیه‌های عددی اغلب از قسمتهای مهم و اجتناب ناپذیر محاسبات شیمیایی می باشد [۱].

شبکه‌های عصبی هوشمند در گسترش محدوده پاسخ حسگر نوری pH بسیار موفق نشان داده شده است [۲]. شبکه عصبی هوشمند قادر است محدوده پاسخ pH یک حسگر را از محدوده خطی محدود (۵-۷/۲۵) تا گستره وسیع (۲/۵۱-۹/۷۶) گسترش دهد. همچنین، شبکه عصبی هوشمند پیش خور چند لایه برای مدل سازی داده‌های ورودی-خروجی یک فیبر نوری حسگر pH مورد استفاده قرار می گیرد [۳]. مدل حاصله با ۷۰ محلول از pH ۱/۶ تا ۱۰/۱۷ مورد آزمایش قرار گرفته است.

در اینجا چندین روش در پردازش سیگنالهای آرایه الکترو نوری pH به کار برده شده است.

بخش عملی

توصیف داده‌ها. در مجموع ۴۴ الگو برای ۴۴ محلول با pH متفاوت مورد استفاده قرار گرفته است. برای هر pH یک سری ۱۵ سیگنالی (۳ رنگ ۵× الکترو نوری) استفاده شده است. داده‌ها به طور اتفاقی به دو قسمت کالیبراسیون و ارزیابی که به ترتیب شامل ۳۰ طیف و ۱۴ طیف برای تعریف و ارزیابی مدل می‌باشند تقسیم شده است.

روش کالیبراسیون. برای داده‌های توصیف شده بالا به منظور به دست آوردن بهترین نتایج، مدل های مختلفی برای پردازش داده‌ها مورد استفاده قرار گرفته است. مجموعه کالیبراسیون به عنوان ورودی برای Solver Excel Microsoft، شبکه‌های عصبی هوشمند و حداقل مربعات جزئی مورد استفاده قرار گرفته است. خطای پیش بینی برای هر روش طبق رابطه زیر محاسبه شده است:

$$MSE = \sum_{i=1}^n (t_i - o_i)^2 / n$$