Нечеткая коньюктивная формула и принятие решений в аналитической химии

В.Н. Решетникова,[1] В.В. Кузнецов[2]

[1] – Балашовский институт (филиал) Саратовского государственного университета им. Н.Г. Чернышевского, Россия, 412309 Балашов ул. К. Маркса, 29, e-mail: vnresh@yandex.ru
[2]- Российский химико-технологический университет им. Д.И.Менделеева, Россия, 125047 Москва А-47, Миусская пл., 9, e-mail: kuzn@muctr.ru

Поступила: 20 декабря 2009 г./ Принята к публикации: 2 февраля 2010 г.

Описаны идеология и применение нечёткой конъюнктивной формулы для поддержки принятия решений в аналитической химии. Авторами разработаны алгоритмы выбора метода (методики) и выработки решения о соответствии образца стандарту.

V.N.Reshetnikova, V.V.Kuznetsov. Fuzzy conjunctive formula and decision making in analytical chemistry. *The ideology and using of the fuzzy conjunctive formula for the decision making support in analytical chemistries are described. The algorithms of choice of analytical method (procedure) and decision development for sample's correspondence to the standard are proposed.*

Ключевые слова: *аналитическая химия; нечёткая логика; принятие решений.*
The keywords: *analytical chemistry; fuzzy logic; decision development.*

Довольно часто решения, которые приходится принимать химикам-аналитикам и специалистам заводских лабораторий, инженерам, операторам технологических процессов в их повседневной деятельности, связаны с проблемой выбора. Это может быть выбор оборудования, режима работы, метода исследования и т.п. Другая, не менее важная задача – выработка решения о соответствии анализируемого образца нормативным требованиям.

Работая над этими проблемами, химики-аналитики должны обрабатывать большие объёмы однообразных данных, сравнивать неравнозначные параметры, информация о которых может быть как количественной, так и качественной, смысловой, нечёткой, расплывчатой, неконкретно численной или же численной, но определённой при различных, часто не упомянутых, условиях. Также, говоря о процессах, проходящих с участием человека, нельзя полностью исключить фактор субъективности.

Путь повышения объективности и эффективности процесса принятия решений - использование компьютерных советующих и экспертных систем, которые предоставляют пользователю рекомендацию, или небольшой их список, по поведению в конкретной ситуации на уровне опытного эксперта в данной предметной области [1].

Объектами исследования в аналитической химии являются химико-аналитические системы, для которых часто отсутствуют точные математические модели. Поэтому наиболее перспективными в данном случае можно считать нечёткие логические модели [2,3].

Примерами нечётких высказываний, относящихся к аналитической химии, могут служить такие утверждения как, например, «разбавленный», «умеренно концентрирован-ный» или «концентрированный» раствор, «высокая», «средняя» или «низкая» избирательность и/или чувствительность. Очевидно, что подобные высказывания являются предметом нечёткой логики, основы которой были разработаны Л. А. Заде [4].

В основе химических или физико-химических методов анализа лежат какие-либо аналитические реакции. Сравнение методов производят по совокупности параметров, которые эти реакции характеризуют. Наиболее общими из них являются чувствительность, избирательность, воспроизводимость результа-тов, время отклика, необходимость и трудоёмкость подготовки пробы. К сожалению, не все аналитические лаборатории имеют современное техническое оснащение, поэтому к перечню рассматриваемых параметров нужно добавить наличие соответствующих приборов.

При выборе методики определения в рамках одного метода добавляются ещё и специфические для этого метода параметры, а также параметры, характеризующие условия проведения аналитической реакции. Например, если реакция проходит в растворе, учитывают кислотность среды, наличие

органического растворителя. Если речь идёт о проведении серийных анализов, то необходимо включать в рассмотрение и «экономические» харак-теристики, такие, как «стоимость анализа» и «время одного определения». Информация, описывающая почти все перечисленные параметры, является расплывчатой, качественной, нечёткой.

Результатом работы компьютерной советующей системы должны быть конкретные рекомендации, для выработки которых необходим алгоритм. Очевидно, что в данном случае алгоритм выбора метода или методики получается нечётким, то есть описанным в терминах теории нечётких множеств.

ФОРМАЛИЗАЦИЯ ЗАДАЧИ ВЫБОРА

Для оформления количественной характеристики процедуры выбора метода на основе смыслового описания этой проблемы необходимо использовать лингвистическую идентификацию и математический аппарат теории нечётких множеств, способный привести к построению соответствующего нечёткого алгоритма. Разработка любого алгоритма предполагает формализацию задачи, для чего удобно использовать логику, описанную в работе [5].

Прежде, чем сравнивать методы или методики, необходимо решить вопрос об их принципиальной применимости. В самом общем виде утверждение о принципиальной применимости метода или методики для определения конкретного элемента можно записать следующим образом: ЕСЛИ рассматриваемый метод (методика) удовлетворяет всем требованиям, предъяв-ляемым к аналитическим методам (аналити-ческим реакциям), ТО данный метод (методи-ка) пригоден для определения данного элемента.

Представленная лингвистическая формула имеет смысловой характер, её можно формализовать только с использованием принципов математической логики через введение пропозициональных, то есть высказывательных переменных. Подобный подход применительно к химико-аналитическим задачам описан в работах [6,7].

Посылка – исходное высказывание – в этом утверждении является многозвенным высказыванием. Каждая из высказывательных переменных отвечает за применимость метода по определённому признаку. Очевидно, что метод (методика) должны удовлетворять требованиям по всем критериям одновременно, поэтому переменные необходимо объединить с помощью логической операции конъюнкции. Используя символику, принятую в математической логике, приведённое выше высказывание можно формализовать следующим образом:

$$a_1 \,\&\, a_2 \,\&\ldots\&\, a_n \rightarrow b, \qquad \textbf{(1)}$$

где $a_1, a_2, \ldots, a_n, b$ – высказывательные переменные; &, $\rightarrow$ - символы логических операций конъюнкции (логического И) и импликации (логического следования).

Конкретизируем некоторые понятия нечёткой логики применительно к задаче выбора метода (методики). Пусть X - общий перечень всех возможных параметров, характеризующих какой-либо метод, составляющий произвольное непустое множество. Тогда нечётким подмножеством A множества X, характеризующим здесь один из параметров, будет множество пар $\mu(x)$ и X: $A = <\mu(x)/X>$, когда $x \in X$ и $\mu(x) \in [0;1]$, где $\mu(x)$ – функция принадлежности нечёткого множества A, X – базовое множество или базовая шкала. Для каждого конкретного значения $x \in X$ величина $\mu(x)$ принимает определённое значение из замкнутого интервала [0;1], которое и называется степенью принадлеж-ности элемента x нечёткому множеству A.

Таким образом, функция принадлежности определяет степень соответствия элемента понятию, определенному нечётким множест-вом[4]. Выше было показано, что каждый параметр можно интерпретировать нечёткой высказывательной переменной a_i. Каждая такая переменная, в свою очередь, должна быть определена на базовом множестве значений, составляющих нечёткое множество, причём эти значения являются нечёткими переменными с функцией принадлежности μ_i.

Например, пусть X = {«низкая», «невысокая», «средняя», «выше, чем средняя», «высокая»} - множество, характеризующее избирательность реагента или реакции. Тогда нечёткое подмножество A_i – «высокая изби-рательность» с указанием конкретных значений функций принадлежности может быть определено следующим образом:

Ai = {<0,1/«низкая»>, <0,2/«невысокая»>, <0,5/«средняя»>, <0,7/«выше, чем средняя»>, <1/«высокая»>}.

Данный подход обеспечивает формализацию нечётких численных и смысловых параметров.

ФОРМАЛИЗАЦИЯ ЗАДАЧИ О СООТВЕТСТВИИ АНАЛИЗИРУЕМОГО ОБРАЗЦА СТАНДАРТУ

В самом общем виде утверждение о соответствии анализируемого образца стандарту имеет вид: ЕСЛИ полученные с помощью химического анализа образца концентрации нормируемых ком-

© В.Н. Решетникова, В.В. Кузнецов

понентов не превышают (или не менее) соответствующих величин, ТО данный образец по качеству соответствует стандарту.

Каждая высказывательная переменная отвечает за соответствие стандарту концентрации одного из контролируемых веществ. Посылка в рассматриваемом утверждении является объединением этих переменных. Таким образом, приведённое выше высказывание также можно описать с помощью конъюнктивной формулы (1).

СТЕПЕНЬ ИСТИННОСТИ НЕЧЁТКОГО ЛОГИЧЕСКОГО ВЫСКАЗЫВАНИЯ И ЕЁ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ

Математическая логика в своём классическом – чётком – варианте на вопрос об истинности логического выражения даёт один из двух ответов: истинно либо ложно, что явно недостаточно при решении задачи выбора. Здесь нужно применить нечёткую логику, которая даёт возможность охарактеризовать любое нечёткое высказывание величиной степени истинности, принимающей значения в интервале [0;1].

Сложные нечеткие высказывания (формула(1)) получены путем применения логических операций к высказывательным переменным. Степень истинности таких высказываний рассчитывается в соответствии с минимаксной трактовкой, введенной Заде [4]:

- конъюнкция (логическое И): $A \,\&\, B$, его степень истинности равна $A \,\&\, B = \min(A,B)$;
- дизъюнкция (логическое ИЛИ): $A \vee B$, для него степень истинности $A \vee B = \max(A,B)$;
- импликация (логическое следование ЕСЛИ, ТО): $A \rightarrow B$, для которого степень истинности составляет $A \rightarrow B = \max(1 - A, B)$;
- отрицание (логическое НЕ): $\neg A$ со степенью истинности $\neg A = 1 - A$.

Таким образом, выражение для степени истинности D нечёткого логического высказывания (1) можно записать следующим образом:

$$D = \min(a_1, a_2, \ldots, a_n) \qquad \textbf{(2)}$$

На наш взгляд именно степень истинности нечёткого логического высказывания «ЕСЛИ …, ТО … метод (методика) пригоден для определения данного элемента» может быть критерием выбора. Очевидно, что наиболее предпочтительным будет метод, для которого степень истинности рассматриваемого нечёткого логического высказывания максимальна.

Очевидно, что степень истинности будет полезна и при выработке решения о соответствии образца стандарту. Чем больше значение D, тем выше качество анализируемого образца.

Не менее интересным и практически важным является вопрос об отнесении исследуемого образца к определенному сорту или к определенному производителю [8], а иногда необходимо определить тип сырья, из которого приготовлен анализируемый объект. Для решения подобных задач можно использовать различные подходы, например, кластерный анализ или метод построения нейронных сетей [8]. Авторы считают возможным использовать величину степени истинности логического выражения и для классификации исследуемых образцов по типу используемого для их производства сырья.

НЕЧЁТКИЕ АЛГОРИТМЫ

На основе нечёткой конъюнктивной формулы (1) авторами разработаны нечёткие алгоритмы решения задачи выбора метода (методики) и задачи о соответствии качества образца стандарту, их общие схемы представлены на рисунке 1.

Первым шагом в реализации обоих алгоритмов является отбор параметров-переменных. При выборе метода (методики) определения элемента ими могут быть характеристики аналитической реакции (чувствительность, избирательность, диапазон определяемых содержаний и др.) и параметры, описывающие условия проведения анализа («кислотность среды», «растворитель», «пробоподготовка» и др.).

Параметры-переменные для задачи о соответствии качества образца стандарту заранее определены – это концентрации контролируемых веществ.

Сведения о значениях выбранных параметров-переменных удобно организовать так, чтобы иметь непосредственный доступ к информации по каждому из перечисленных параметров. Для этого хорошо подойдут таблицы реляционных баз данных или соответствующие структуры данных языков программирования высокого уровня, например, записи в языке Турбо Паскаль, размещённые в файлах на внешнем носителе. Такая форма организации данных универсальна и весьма удобна, так как при необходимости легко исключить или добавить поле записи, отвечающее за какой-либо параметр. Например, если мы имеем дело с кинетическим или проточно-инжекционным методом, то целесообразно добавить поле «время отклика».

Вторым этапом, согласно разработанным алгоритмам, является построение вектора (или матрицы) функций принадлежности μ(n) (или μ(m,n)). Для построения функций принадлежности используют прямые и косвенные методы, основанные на опросе одного или группы экспертов [5,9]. В роли экспертов обычно выступают опытные химики-аналитики, специализирующиеся в предметной области функционирования советующей системы.

Если функция принадлежности построена опросом экспертов, то изменения условий функционирования нечётких моделей требуют чаще всего корректировки нечётких множеств, то есть повторного опроса экспертов. Преодолеть этот недостаток можно, переходя к так называемым универсальным шкалам измерения значений оцениваемых параметров. Универсальность шкалы удобна также с точки зрения автоматизации процесса её получения. Процедура построения универсальной шкалы, которую использовали авторы данной статьи, описана в работе [10].

Роль эксперта заключается в установлении минимального (то есть наихудшего) и максимального (наилучшего) значения каждого параметра и шага цикла по сортировке значений функций принадлежности. Каждое конкретное значение параметра-переменной обязательно попадает в один из интервалов и получает значение функции принадлежности, соответствующее этому интервалу.

На третьем этапе представленных алгоритмов происходит вычисление степени истинности нечёткого логического высказывания D. Для задачи о соответствии качества образца стандарту расчёт производится по формуле (2), этого осуществляется путём поиска минимального значения для вектора $\mu(n)$.

В случае выбора метода или методики алгоритм немного усложняется. Некоторой первоначальной информацией об анализируемом объекте обладает химик-аналитик, использующий советующую систему. Напомним, что компьютерная система предлагает пользователю некоторые рекомен-дации по выработке решения, а в роли лица, принимающего решение (ЛПР), выступает сам аналитик.

На основании имеющихся сведений ЛПР может высказать своё мнение о важности для конкретного случая того или иного параметра, то есть сформулировать суждение о предпочтении. Нечёткое множество предпочтений ЛПР обозначим через pi, где i = 1…n. Вектор предпочтений ЛПР (p(n)) можно сформировать в диалоговом режиме.

Как видно из формулы (2), степень истинности всего логического выражения определяется величиной функции принад-лежности самого «плохого» параметра. В то же время, если ЛПР считает данный параметр незначимым или не очень важным для конкретного случая, то значение этого параметра не должно повлиять на конечный результат. Таким образом, в формуле (2) должна учитываться функция принадлежности параметра, если ЛПР высоко оценил его значимость, или, при необходимости, оценка ЛПР, эту значимость отрицающая. Применив логические операции отрицания и дизъюнкции (логического ИЛИ), моделирующие эти обе возможности, получим следующее выражение для степени истинности сложного нечёткого высказывания:

$$D = min(max(a_1, 1 - p_1), max(a_2, 1 - p_2), \ldots, max(a_n, 1 - p_n)). \quad \textbf{(3)}$$

На заключительном этапе выводятся результаты работы алгоритмов, то есть значения степеней истинности сложных нечётких высказываний, в удобном для пользователя и отвечающем целям данного алгоритма виде.

ПРИМЕРЫ ПРИМЕНЕНИЯ НЕЧЁТКИХ АЛГОРИТМОВ.

Описанные алгоритмы реализованы авторами на практике (на языке Турбо Паскаль и в системе программирования Делфи) для выбора методики спектрофотометрического определения металлов [11] и интерпретации результатов анализа образцов водок [12,13].

Более подробно разберём тестовый пример – выбор органического реагента для спектрофотометрического определения алюми-ния [11]. В качестве параметров – переменных были выбраны следующие характеристики аналитической реакции: чувствительность, избирательность, контрастность, диапазон определяемых содержаний, время одного определения. Исходные данные для реагентов различных классов представлялись в виде файла, состоящего из записей – структурированного типа данных языка Турбо Паскаль.

Предпочтения ЛПР выяснялись через организацию диалога аналитика-пользователя с программой, где ему предлагалось по десятибалльной шкале оценить значимость каждого из рассматриваемых параметров.

Мы считаем, что программа должна не только предлагать оптимальный вариант выбора, но и давать возможность самому химику-аналитику провести сравнение относительной предпочтительности реагентов на основании величин степеней истинности.

© В.Н. Решетникова, В.В. Кузнецов

Поэтому сначала проводилась сортировка массива D(n) методом прямого выбора, а затем выводились результаты для всех реагентов в порядке убывания степени истинности.

Примеры полученных результатов приведены в таблице 1.

Таблица 1 *Величины степеней истинности нечёткого логического высказывания при различных оценках ЛПР значимости некоторых параметров (некоторые реагенты для спектрофотометрического определения алюминия)*

Название реагента	*Учтены все параметры*	*Без учёта избирательности*	*Без учёта чувствительности*
Эриохромцианин R	0,7	0,7	0,7
Алюминон	0,6	0,6	0,6
Сульфохлорфенол С	0,5	0,7	0,5
Сульфохлорфенол Т	0,5	0,7	0,5
Стильбазо	0,5	0,7	0,5
Морин	0,5	0,6	0,5
Арсеназо М	0,3	0,3	0,3
Пикрамин	0,3	0,3	0,3
Антраниловый К	0,2	0,2	0,2
8-Оксихинолин	0,2	0,8	0,2

Таблица 2 *Отнесение степени истинности нечёткого логического высказывания к марке спирта, из которого изготовлен образец*

Название образца	*Степень истинности D*	*Марка спирта*
Русский стандарт	0,8	Высшей очистки, «Экстра», «Люкс»
Экстра	0,8	Высшей очистки, «Экстра», «Люкс»
Посольская	0,8	Высшей очистки, «Экстра», «Люкс»
Гжелия	0,7	Высшей очистки, «Экстра», «Люкс»
Исток оригинальная	0,7	Высшей очистки, «Экстра», «Люкс»
Столичная	0,6	Высшей очистки, «Экстра»
Красная Аврора	0,6	Высшей очистки, «Экстра»
Ха-ха-ха	0,6	Высшей очистки, «Экстра»

Тестовым примером для задачи о соответствии качества образца стандарту была программа контроля качества водочной продукции, исследовались различные образцы водок российского производства [12].

В этом случае на основании величины D формулировался вывод о качестве образца и предположение о марке используемого спирта. В описываемой программе универсальная шкала для функций принадлежности μ была построена таким образом, что степень истинности для водок из спирта высшей очистки должна быть не менее 0,3, для водок из спирта «Экстра» - не менее 0,5, самые качественные образцы из спирта «Люкс» должны иметь D не менее 0,7.

Если степень истинности нечеткого логического высказывания не превышала 0,2, делался вывод о несоответствии образца требованиям ГОСТа. Некоторые результаты расчётов представлены в таблице 2.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключении хочется отметить, что рассматриваемые нечёткие алгоритмы универсальны, их легко адаптировать к любым задачам выбора и принятия решений о соответствии качества образца стандарту.

Для этого нужно лишь добавить необходимую информацию в базу данных и определить соответствующие параметры-переменные.

Мы считаем перспективным внедрение в аналитическую практику компьютерных советующих систем, построенных на принципах нечёткой логики.

Рис. 1. *Схемы алгоритмов: 1 – задачи выбора; 2 – задачи о соответствии образца стандарту. m – количество методов (методик); n – количество параметров.*

© В.Н. Решетникова, В.В. Кузнецов

ЛИТЕРАТУРА

1. Мелихов А.Н., Берштейн Л.С., Коровин С.Я. Ситуационные советующие системы с нечёткой логикой. – М.: Наука, 1990. – 272 с.

2. Otto M. Fuzzy theory. A promising tool for computerized chemistry// Anal. Chim. Acta. – 1990. – 235. – P. 169–175.

3. Хургин Я.И. Проблемы неопределённости в задачах нефти и газа. – Москва−Ижевск: «Институт компьютерных исследований», 2004. – 320 с.

4. Заде Л. Понятие лингвистической переменной и его применение к принятию приближённых решений. – М.: Мир, 1976. – 165с.

5. Кафаров В.В., Дорохов И.Н., Марков Е.П. Системный анализ процессов химической технологии. Применение метода нечётких множеств. – М.: Наука, 1988. – 272 с.

6. Кузнецов В.В. Логическая модель кривых титрования и кластерно-аналитическая процедура нахождения конечных точек// Журн. аналит. химии. – 1990. – 45, № 6. – С. 1157–1166.

7. Кузнецов В.В., Решетникова В.Н., Якубович Л.М., Чупилко А.В. Логический анализ и теория избирательной индикаторной титриметрической спектрофотометрии// Журн. аналит. химии. – 1994. – 49, № 10. – С. 1059–1066.

8. Gonzalez-Arjona D., Gonzalez-Gallero V., Pablos F., Gonzalez A. Authentication and differentiation of irish whiskeys by higher-alcohol congener analysis// Anal. Chim. Acta. – 1999. – 381. – P. 257–264.

9. Мелихов А.Н., Берштейн Л.С., Коровин С.Я. Ситуационные советующие системы с нечеткой логикой. – М.: Наука, 1990. – 272 с.

10. Ежкова И.В., Поспелов Д.А. Принятие решений при нечётких основаниях. Универсальная шкала// Изв. АН СССР. Техн. кибернетика. – 1977. – № 6. – С. 3–11.

11. Кузнецов В.В., Решетникова В.Н. Алгоритмы нечеткой логики и проблема выбора реагента в спектрофотометрии// Журн. аналит. химии. – 1999. – 54,№ 3. – С. 230–236.

12. Решетникова В.Н., Филатова Е.А., Кузнецов В.В. Нечёткая логика и идентификация сырья для изготовления водок на основе результатов газо-жидкостной хроматографии// Журн. аналит. химии. – 2007. – 62,№ 11. – С. 1127–1131.

13. Решетникова В.Н., Кузнецов В.В. Некоторые примеры использования нечёткой конъюнктивной формулы в аналитической химии// Тез. докл. VIII Укр. конф. по аналитической химии. – Одесса. – 2008. – С.58.