وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه
گاوازنگ - زنجان

تحلیل عامل تفکیکی با استفاده از بهینه‌سازی آشوبناک جمعیت ذرات

پایان‌نامهٔ کارشناسی ارشد

سمیرا بیرامی سلطان

استاد راهنما: دکتر حمید عبداللهی

شهریور ۱۳۸۸

بسم الله الرحمن الرحیم

خیال روی تو در هر طریق همره ماست

نسیم موی تو پیوند جان آگه ماست

دوست دارم تلاش‌هایم را در قالب هدیه‌ای هر چند کوچک تقدیم کنم به:

نگاه نگران مادرم

روح پاک پدرم

عزم راسخ استاد گرانقدرم، جناب آقای دکتر عبداللهی

تشکر و قدردانی

الهی!

ای نزدیک‌تر از ما به ما، مهربان‌تر ازما به ما، نوازنده‌ی ما بی ما، به کرم خویش نه به سزای ما، هرچه کردیم تاوان بر ما، هرچه تو کردی باقی بر ما، هرچه کردی به جای ما، به خود کردی نه به سزای ما.

آغاز می‌کنم کلامم را با نام مهربانی که هر آنچه دارم از لطف و رحمت اوست.

در ابتدا از استاد ارجمند و معلم بزرگوارم جناب آقای دکترحمید عبداللهی که در طی مراحل تحقیق و تدوین پایان‌نامه همواره همراه و راهنمای من بودند نهایت سپاس و قدردانی را دارم و برای ایشان از خداوند منان توفیق روز افزون و سعادت آروزمندم.

از اساتید گرانقدرم که در محضرشان کسب درس علم و زندگی کردم، آقایان دکتر حقیقی، دکتر کمپانی و دکتر رفیعی ممنون و سپاسگزارم. توفیق و سعادتمندی برای ایشان و تمام معلمانم در همه‌ی مقاطع تحصیلی‌ام آرزومندم.

از خانم دکتر زینلی و سایر اساتید مدعو که زحمت داوری پایان‌نامه مرا پذیرفتند سپاس بی‌پایان دارم. از استاد محترم خانم دکتر نظری به خاطر همه‌ی الطافشان صمیمانه متشکرم.

از همه‌ی دوستان و همکلاسی‌های خوبم که روزهای خوب تحصیل و کار را در کنار هم سپری کردیم و شادی آفرین لحظات تحصیلم بودند کمال تشکر را دارم و امیدوارم همواره مورد الطاف بی‌پایان حق باشند.

در نهایت از اولین معلمان زندگیم، مادرم که وجودم از وجود او آرام می‌گیرد و پدرم که ریشه‌ی درخت زندگیم بود سپاس بی‌پایان دارم و از خواهران و برداران عزیزم که همواره همراه و پشتیبان من در زندگی بودند و به من دلگرمی می‌دادند، صمیمانه تشکر می‌کنم و امیدوارم همواره شاد و خرم باشند.

امیدوارم یادگار دوران تحصیلم آغازی باشد برای دیگر راه‌های علمی.

چکیده

روش تحلیل عامل تفکیکی یکی از روش‌های مدلسازی نرم است که به جستجوی ماتریس **T** بهینه‌ای می‌پردازد که توسط روابط زیر پروفایل‌های غلظتی و طیفی را ایجاد کنند،

$$A=UST^{-1} \qquad B=TV$$

طوری‌که این پروفایل‌ها در معادله روبرو صدق کنند.

$$D=AB$$

در روش RFA، بردارهای ویژه چرخیده شده به‌طور تکرار پذیر اصلاح می‌شوند تا از قیدها تبعیت کنند و در نهایت تابع حداقل مربعات را در فرآیند بهینه‌سازی غیر خطی مینیمم کنند؛ الگوریتم نیوتن – گوس – لونبرگ/مارکوات وظیفه بهینه‌سازی غیرخطی در این روش را برعهده دارد.

الگوریتم بهینه‌سازی آشوبناک جمعیت ذرات، تلفیقی از دو الگوریتم تکراری روش بهینه‌سازی جمعیت ذرات (PSO) و الگوریتم جستجوی محلی آشوبناک با ویژگی‌های آشوبناک است.

در این تحقیق، روش RFA و CPSO برای نخستین بار تلفیق و حاصل آنها به عنوان روشی متفاوت با روش‌های موجود در متون کمومتریکس ارائه شده است. این روش به عنوان جایگزینی مناسب برای روش RFA در تفکیک داده‌هایی که حل منحصر به فرد ندارند، پیشنهاد می‌شود. چرا که روش RFA در این موارد واگرا می‌شود درحالیکه روش پیشنهاد شده به‌دلیل مزایای CPSO قادر به حل این مسئله است. جهت بررسی این موضوع داده‌های کروماتوگرافی با همپوشانی و سطح نویزهای متفاوت تولید و توسط روش موردنظر تحلیل شدند.

کارآیی روش توسط تحلیل داده‌های سه و چهار جزئی شبیه‌سازی شده و آزمایشگاهی بررسی شد. نتایج، توانایی این روش را در تحلیل داده‌های مختلف نشان می‌دهد. همچنین این روش بر خلاف سایر روش‌های مدلسازی نرم حتی با تخمین اولیه تصادفی نیز همگرا می‌شود و توانایی تحلیل داده‌های با کمتر از پنج جزء را دارا می‌باشد.

فهرست

فهرست مطالب شماره صفحه

فهرست شکل شماره صفحه

فهرست جدول **شماره صفحه**

فصل اول

مقدمه

۱. ۱ کمومتریکس [۱]

واژه‌ی کمومتریکس[۱] اولین بار در سال ۱۹۷۱ ابداع شد که بیانگر رشد استفاده از مدل‌های ریاضی، اصول آماری و سایر روش‌های بر پایه منطق در شاخه‌ی شیمی به ویژه شیمی تجزیه است. یک نظام بین رشته‌ای که آمار چند متغیره، مدل کردن ریاضی، علم کامپیوتر و شیمی تجزیه را در بر می‌گیرد. در سال‌های اخیر، رشد کمومتریکس حاصل رشد عموم آمار، کامپیوتر و افزایش حجم اطلاعات است. پیشرفت سریع فناوری به‌طور خاص درسطح دستگاه‌های کامپیوتری برای شیمی تجزیه باعث رشد چشمگیر شاخه‌ی کمومتریس طی ٤ دهه‌ی اخیر شده است. وجود جهان چند متغیره الهام بخشی برای اندازه‌گیری‌های چند متغیره به‌طور همزمان در فرآیندهای تحلیلی است، طوری‌که در این دوره بیشتر توجه روی روش‌های چند متغیره[۲] تمرکز داشته است. ملاحظه‌ی مناسب پخش پارامترهای چند متغیره اطلاعات بیشتری نسبت به مشاهده‌ی یک متغیر تنها ایجاد می‌کند.

مزایا استفاده از روش‌های چند متغیره:

۱- کاهش نویز وقتی متغیرهای وابسته به‌طور همزمان بررسی می‌شوند.

۲- اندازه‌گیری‌های گزینش‌پذیر انجام می‌شوند و نتایج می‌تواند بی تأثیر از اثرات سیگنال‌های مزاحم باشد.

۳- نمونه‌های غلط[۳] به راحتی تشخیص داده می‌شوند، چرا که رفتاری متفاوت با بقیه‌ی نمونه‌ها خواهند داشت.

در ادامه روش‌هایی را که به تفکیک داده‌های چند متغیره می‌پردازند، شرح خواهیم داد.

---

[۱] Multivariate methods

[۲] Chemometrics

[۳] False samples

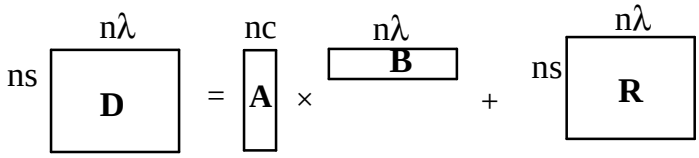
۱. ۲ روش‌های تفکیک منحنی چند متغیره[۱] [۱]

اولین بار روش‌های تفکیک منحنی [۲ و۳] در پاسخ نیاز به ابزاری برای تحلیل ماتریس داده چند متغیره [٤ و٥] حاصل از کار آزمایشگاهی در سیستم‌های دینامیکی چند جزئی به وجود آمدند.

همه‌ی روش‌های تفکیک با استفاده ازسیگنال کل مخلوط‌ها، تعداد اجزا و سهم‌های مربوط به اجزای خالص در سیستم مورد بررسی را تعیین می‌کنند [٦-١٤]. سیگنال دستگاهی به صورت یک ماتریس سازمان‌دهی می‌شود که هر سطر ماتریس اندازه‌گیری همه‌ی اجزای حاضر در مخلوط را در بر می‌گیرد. اساس این روش‌ها تفکیک ماتریس داده به دو یا چند ماتریس دیگر است که با رابطه‌ی زیر نمایش داده می‌شود.

(۱-۱)

$$\mathbf{D}=\mathbf{A}\mathbf{B}^{t}+\mathbf{R}$$



nλ و ns به ترتیب تعداد متغیرهای سطر و ستون، nc تعداد اجزای شیمیایی موجود در سیستم هستند.

D ماتریس داده حاصل از سیگنال دستگاهی (ماتریس داده) و **A** و$\mathbf{B}^{t}$ شامل سیگنال‌های خالص اجزای مخلوط در جهات ستون و سطرهای ماتریس داده‌ی اولیه می‌باشد. **R** ماتریس هم اندازه با ماتریس داده است که ماتریس باقیمانده نام دارد و تغییرات آن مربوط به سهم شیمیایی نمی‌شود و معمولاً مربوط به نویز دستگاهی است. در مسائل جذبی ماتریس‌های **A** و$\mathbf{B}^{t}$ اغلب نمایانگر پروفایل‌های غلظتی و طیفی هستند.

این روش‌ها از ارزش زیادی برای تفکیک سیستم‌های پیچیده برخوردارند، به ویژه وقتی‌که سیگنالهای انتخابی برای گونه‌های مجزا از نظر آزمایشگاهی ممکن نیست یا خیلی پیچیده و زمان‌بر است.

چندین روش هدف بالا را میسر می‌کنند که به عنوان روش‌های مدلسازی نرم[۲] یا روش‌های مستقل از مدل[۳] یا خود مدلسازی[۱] شناخته می‌شوند. مشخصه‌ی بارز آنها عدم نیاز به مدل شیمیایی جهت تحلیل و تفکیک ماتریس داده‌هاست.

---

[۱] Multivariate curve resolution methods

[۲] Soft modeling

[۳] Model-free analysis