

Téma címe: Dekonvolúció genetikus algoritmus segítségével,
alkalmazás femtoszekundum felbontású kinetikai mérésekre

Témavezető: Keszei Ernő, <http://keszei.chem.elte.hu>

A műszaki-tudományos gyakorlatban sokszor előfordul, hogy a mérések eredménye nem a megmérni kívánt jel, hanem annak konvolúciója a mérőberendezés torzítását leíró függvénnyel. A „tisztá”, konvoluátlan információ kinyeréséhez dekonvolúcióra van szükség, ami két okból is problémát jelent. Egyrészt a torzítatlan jelet leíró függvény általában nem periodikus, másrészt annak diszkrét pontokban mért értékei kísérleti zajt is tartalmaznak. A probléma nemlineáris dekonvolúciós módszerek megfelelő adaptációjával oldható meg. Ezek közül – a tapasztalatok szerint – a legjobban egy genetikus algoritmus segítségével végzett dekonvolúció működik. Az eddig elért eredmények egyelőre még nem teljesen kielégítőek, további módosításokra, azok próbaszámításokkal történő tesztjeire van szükség.

A vizsgált konkrét alkalmazás ún. elemi kémiai reakciók során a molekulákat alkotó atommagok átrendeződésének kísérleti vizsgálata. Az atommagok tömege és szokásos energiája miatt ezek az átrendeződések a 10^{-13} – 10^{-11} s időtartományban játszódnak le, ezért a femtoszekundumok (1 femtoszekundum = 10^{-15} s) tartományába eső felbontásra van szükség méréssel történő nyomonkövetésükre. Az 1980-as évek közepe óta megvalósítható ez a mérés, az azóta hozzáférhető, 100 fs-nál rövidebb lézerpulzusok segítségével. A molekuláris átrendeződések azonban valós idejű detektálással nem követhetők nyomon, hiszen a 10^{-11} s (10 ps) idő méréséhez is 100 GHz-nél gyorsabb elektronikára lenne szükség. A femtokémiai méréseket ezért úgy végzik, hogy egy kb. 100 fs szélességű impulzussal elindítják a kémiai reakciót, majd az ugyancsak kb. 100 fs szélességű mérőimpulzust az optikai úthossztól függő késleltetéssel utánaküldik. A detektor a teljes változást csak kb. 10^{-8} s alatt képes megmérni, így a mérés eredménye egy integrált jel lesz, amely a reakciót elindító és a mérő fényimpulzus korrelációjának konvolúciója a molekuláris változás jelével.

Az aktuális feladat a Matlab kódban írt genetikus algoritmus továbbfejlesztése, tesztelése, valamint a már működő és könnyen használható, felhasználóbarát grafikus kezelőfelület továbbfejlesztése. A jelenlegi algoritmus nagyon jól működik egy pillanatszerűen felfutó és lassan lecsengő jelalakokra, de ennél bonyolultabb esetekre egyelőre nehézkesen. Nagy tere van még a használt genetikus operátorok optimalizálásának is. A témából már született két alkalmazott matematikus diplomamunka, és elérhető angol nyelvű cikkek, valamint egy magyar nyelvű folyóiratcikk is, amelyek jó felkészülési lehetőséget biztosítanak az elvégzendő munkához. A munkához meg kell ismerkedni a Fourier-transzformációval, valamint integrálegyenletekkel (konvolúció) és azok megoldási lehetőségeivel. Egyéni konzultációkra hetente van lehetőség.

A genetikus algoritmussal végzett dekonvolúció természetesen nem csak kémiai kinetikai problémák megoldására alkalmas módszer; használható minden egymódusú (tranzien) függvény dekonvolválására, ahol az egzakt módszerek nem vagy nagyon rosszul működnek. (Pl. hang- és képfeldolgozás.) Igény lenne a módszer továbbfejlesztésére is egyéb lehetőségek, pl. az egymódusútól eltérő alakú függvényekre történő alkalmazás, illetve két- vagy háromdimenziós dekonvolúcióra történő kiterjesztés megvalósítására.

Elérhető hivatkozások:

László Bengi, Balázs Kovács, Máté Bezdek, Ernő Keszei: Model-Free Deconvolution of Transient Signals Using Genetic Algorithms. *In: Handbook of Genetic Algorithms, New Research*, ISBN 978-1620811580; Editors: A. R. Muñoz and I. G. Rodriguez, Nova Science Publishers (2012); <http://keszei.chem.elte.hu/papers/HbookOfGA-Deconvolution.pdf>

Ernő Keszei: Efficient model-free deconvolution of measured femtosecond kinetic data using genetic algorithm, *J. Chemometrics*, **23**, 188-196 (2009); http://keszei.chem.elte.hu/papers/JChemomet23_188.pdf

Keszei Ernő, Kovács Balázs: Evolúciós módszerek ultragyors kinetikai eredmények hatékony kiértékelésére, *Magy. Kém. Folyóirat* **117**, 174-181 (2011); http://keszei.chem.elte.hu/papers/MKL_2011_GenAlg.pdf