

Распознавание образов вместо покомпонентного анализа

Ю.А. Золотов, Журнал Аналитической Химии, 2001, том 56, № 9, с. 901

Достоинство вина лучше всего оценивают профессиональные дегустаторы. Несмотря на то что обычными аналитическими методами можно достаточно точно определить множество веществ, содержащихся в вине, общий "образ" напитка получить таким образом довольно трудно. До сих пор у дегустаторов не было "инструментальных" конкурентов. Аналогичную ситуацию имеем в случае парфюмерных продуктов, особенно духов: можно надежно определить хроматографическими методами несколько десятков или даже сотен компонентов их запахов, но только знаток-парфюмер или даже обычная женщина может оценить запах "в целом". А про способность собак различать запахи и говорить нечего -они продолжают искать взрывчатые вещества и наркотики.

Однако мы, похоже, на пороге значительных изменений в этой области.

Проводятся конференции, тема которых – электронный нос; издана, по крайней мере, одна монография под таким же названием. На Питсбургской конференции по аналитической химии и прикладной спектроскопии 2000 года фирма Cyano Sciences продемонстрировала серийный набор такого типа под названием Cyanoose 320. Прибор портативный, его можно носить в руках.

Что же такое электронный нос? Это устройство, состоящее из относительно большого числа отдельных газовых сенсоров, аналитические сигналы которых обрабатываются с использованием современных математических приемов, прежде всего теории распознавания образов, искусственных нейронных сетей. В приборе, о котором только что сказано, 32 сенсора, изготовленных из композиционных материалов – комбинации проводящего углеродного материала с непроводящим полимером. В присутствии тех или иных паров (газов) полимер набухает, при этом изменяется сопротивление. Эта технология разработана химиком Натаном Льюисом из Калифорнийского технологического института. В результате компьютерной обработки совокупности сигналов такого набора сенсоров возникает некий обобщенный сигнал, который служит характерным признаком изучаемой смеси паров (газов). Практически невероятно, чтобы этот сигнал совпал с сигналом какой-либо другой смеси.

Это позволяет, после набора градуировочных показателей, либо находить нужные вещества, либо обнаруживать подделки, оценивать степень свежести пищевого продукта, диагностировать заболевания по выдыхаемому воздуху и т.д.

Известны и другие подходы к созданию электронного носа.

Для жидкостей нужен искусственный язык. Принцип его создания похож на принцип устройства электронного языка: сигналы неселективных датчиков, например ионселективных электродов, одновременно помещаемых в изучаемую жидкость, обрабатывает компьютер по той же схеме, что и в случае электронного носа. На упомянутой Питсбургской конференции фирма Alpha M.O.S. показала, как было объявлено, "первый в мире коммерческий электронный язык" под названием α Astree. Прибор включает автосамплер,

электронный блок и компьютер. Анализируемая жидкость вносится в стакан на 150 мл, и туда вводится зонд, состоящий из набора датчиков.

В нашей стране есть весьма продвинутая работа по созданию электронного языка, успешно выполняемая в Санкт-Петербургском университете при участии коллег из одного университета Рима и Московского энергетического института. Руководитель этой работы Ю.Г. Власов неоднократно делал доклады о полученных результатах, о них писала даже широкая пресса ("Российская газета", 10.11.2000). Созданное устройство различает, например, 30 видов минеральных вод, более 30 различных соков, 15 видов кофе, отличает природную минеральную воду от ее подделки и т.д.

Мы имеем дело по существу с новой методологией анализа: вместо определения большого числа отдельных компонентов оценивается общий "образ" пробы, что в ряде случаев чрезвычайно важно.