

Métaheuristiques pour l'identification de composés chimiques

Olivier Hotel, Jean-Philippe Poli, Samuel Saada

CEA, LIST, 91191 Gif-sur-Yvette, France.

{olivier.hotel, jean-philippe.poli, samuel.saada}@cea.fr

Mots-clés : *métaheuristique, essais particulières, identification de composés chimiques.*

1 Introduction

Dans ce document, nous proposons une nouvelle méthode pour identifier des composés chimiques volatiles par l'intermédiaire de capteurs SAW (surface acoustic waves). Ces capteurs sont constitués d'un résonateur acoustique sur lequel est déposée une couche sensible. D'un point de vue sensitif, les interactions physico-chimiques de composés volatils cibles avec cette couche sensible perturbent la propagation d'une onde acoustique à la surface du résonateur et induisent de ce fait une variation de la fréquence de résonance mesurable. La mise en réseau de plusieurs capteurs comportant chacun une couche sensible différente en termes d'affinités chimiques permet alors d'enregistrer un ensemble de réponses qui contient ainsi une information sur la nature du composé et de sa concentration. Il a été établi que la réponse d'un capteur SAW est la superposition d'une perturbation massique F_m et d'une perturbation viscoélastique F_v [1], toutes deux régies par des systèmes du premier ordre de la forme $F_m[n] = A_m T_m^n * c[n]$ (phénomène massique) et de la forme $F_v[n] = A_v T_v^n * c[n]$ (phénomène viscoélastique), T_m , T_v , A_m et A_v étant respectivement les constantes de temps et les amplitudes de ces phénomènes, et $c(t)$ étant l'entrée du capteur, c'est-à-dire le profil de concentration du composé cible dépendant du temps. Ainsi, le décalage en fréquence d'un capteur SAW est $F[n] = F_m[n] + F_v[n]$. Nous proposons une méthode pour estimer ces paramètres sans connaître ni faire d'hypothèses quant au profile de concentration c ; et nous proposons d'utiliser ces estimations comme descripteur pour des techniques de reconnaissance de forme pour identifier à la fois le composé chimique et sa concentration.

2 Identification des paramètres

Nous avons pu établir que les paramètres précédemment cités peuvent être estimés en résolvant le problème d'optimisation suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \operatorname{argmin} \\ \text{sous les contraintes :} \end{array} \right. \sum_{x \in X} \left\| \left(\begin{array}{c} \frac{A_{m,2}}{1-T_{m,2}x} + \frac{A_{v,2}}{1-T_{v,2}x} \\ \vdots \\ \frac{A_{m,N}}{1-T_{m,N}x} + \frac{A_{v,N}}{1-T_{v,N}x} \end{array} \right) \frac{GF(F_1, x)}{\frac{A_{m,1}}{1-T_{m,1}x} + \frac{A_{v,1}}{1-T_{v,1}x}} - \left(\begin{array}{c} GF(F_2, x) \\ \vdots \\ GF(F_N, x) \end{array} \right) \right\|_2$$

$$\begin{array}{l} \forall i \quad T_{m,i} \in]0..1[\\ \forall i \quad T_{v,i} \in]0..1[\\ \forall i \quad A_{m,i} > 0 \\ \forall i \quad \frac{A_{m,i}}{1-T_{m,i}} + \frac{A_{v,i}}{1-T_{v,i}} = SS_i \end{array}$$

où X est un sous-ensemble de $] -1..1[$ de dimension finie, $A_{-,i}$ et $T_{-,i}$ sont les paramètres du $i^{\text{ième}}$ capteur, F_i est sa réponse et SS_i l'amplitude de sa réponse en régime stationnaire. GF représente la fonction génératrice. La non-linéarité de la fonction objectif, des contraintes et la dimension potentiellement importante ($4N_c$ où N_c représente le nombre de capteurs) de ce problème rend l'utilisation de métaheuristiques judicieux. Nous proposons donc d'estimer les paramètres $A_{-,i}$ et $T_{-,i}$ en utilisant le recuit simulé, la stratégie d'évolution ($\lambda + \mu$) et l'optimisation par essais particuliers, puis de comparer les performances de ces algorithmes en construisant des modèles de classification supervisée à partir de leur résultats pour identifier les composés cibles.

3 Résultats expérimentaux

Les performances des métaheuristiques précédemment citées ont été évaluées sur un ensemble de 5 composés chimiques (méthanol, ammoniac, dioxyde de soufre, toluène et sulfure d'hydrogène) à des concentrations de 2ppm, 4ppm, 6ppm, 8ppm et 10ppm. Le processus d'optimisation a été utilisé pour estimer les paramètres pour chaque acquisition. Les résultats étant utilisés comme espace des descripteurs pour l'algorithme des k plus proches voisins à vastes marges. Expérimentalement, il a été mis en évidence que les performances en terme de classification sont meilleurs lorsque les paramètres sont estimés avec la techniques des essais particuliers. Dans ce cas, les composés chimiques sont identifiés avec un taux de succès supérieur à 95%.

Références

- [1] B. Tard. Etudes des interactions gaz-surfaces diamant par gravimétrie sur résonateur à onde acoustique. Thèse de Doctorat, Université Pierre et Marie Curie, 2013.