

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МИКРОВОЛНОВОГО И К*-АЛГОРИТМОВ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СОДЕРЖАНИЯ СПИРТА В ЖИДКОСТЯХ

© 2020 г. Эбру Эфеоглу¹, Гуркан Туна^{1,*}

¹Университет Тракия, Эдирне, Турция

*E-mail: gurkantuna@trakya.edu.tr

Поступила в редакцию 15.05.2020; после доработки 11.06.2020

Принята к публикации 11.06.2020

Спирт сегодня широко используется в различных сферах. Передозировка спиртом и его неправильное использование способны вызвать проблемы со здоровьем. Питьевые жидкости с высокой концентрацией спирта, особенно метанола, вызывают отравление, а употребление одеколонов с высокой концентрацией спирта вызывает различные кожные и респираторные заболевания. Поэтому, для санитарно-эпидемиологического благополучия населения важно определять тип и концентрацию спирта в напитках и других жидких продуктах. В этой статье К*-алгоритм используется для определения и классификации жидкостей с высокой концентрацией спирта путем измерения S-параметра жидкостей в микроволновом диапазоне частот. Для этого в качестве набора данных для обучения использовались значения S-параметров водных растворов этанола, метанола, 1-пропанола и 2-пропанола при различных концентрациях. Для доказательства точности предложенного подхода были проведены измерения на находящихся в продаже жидкостях с известными концентрациями этанола и жидкостях с известными концентрациями спирта. Как показывают результаты, предлагаемый подход позволяет успешно и с высокой точностью классифицировать спиртосодержащие жидкости и концентрацию спирта в них.

Ключевые слова: классификация, К*-алгоритм, микроволны, патч-антенна, векторный сетевой анализатор.

DOI: 10.31857/S0130308220080072

ВВЕДЕНИЕ

Загрязнение в результате промышленных процессов и увеличения численности населения представляет собой серьезную угрозу для здоровья людей, растений и животных [1]. Метанол, который является одной из опасных жидкостей, широко используется в лабораториях и промышленности в качестве синтетического прекурсора и растворителя. Это высокотоксичное вещество. Запах метанола и его контакт с кожей наносит вред здоровью человека. В последнее время дезинфицирующее средство для рук и одеколон часто использовались для остановки распространения эпидемий коронавирусной инфекции. Дезинфицирующие средства на основе спирта в основном включают этанол, изопропиловый спирт, n-пропиловый спирт или их комбинации [2]. При неправильном использовании они могут быть токсичными для человека. Например, при случайном или преднамеренном проглатывании они могут вызывать заболевания центральной нервной системы, дыхательных путей и глаз [3]. Дезинфицирующие средства для рук не должны содержать метанол [4], а присутствие метанола в дезинфицирующих средствах, имеющихся на рынке, представляет серьезную угрозу для здоровья населения. Точно так же высокое содержание спирта в одеколоне может вызвать проблемы с кожей и здоровьем. Кроме того, потребление незаконно произведенного алкоголя является важной проблемой общественного здравоохранения во многих частях мира [5, 6].

Содержание спирта может быть выше ожидаемого и вредно для здоровья в алкогольных напитках, которые производятся незаконно и без контроля качества в процессе производства. Кроме того, производители могут добавлять метанол в алкогольные напитки, чтобы увеличить крепость напитка и при этом снизить его стоимость, потому что метанол легче получить, и он дешевле, чем этанол. Конечным продуктом разложения этанола является уксусная кислота, которая может быть использована в нашем организме в рамках кислотно-щелочного баланса. С другой стороны, конечным продуктом метанола является муравьиная кислота, которая никак не используется в нашем организме. Муравьиная кислота медленно выводится с мочой и через дыхательные пути. Когда она накапливается в крови, это вызывает ацидоз. По этой причине при употреблении незаконно произведенных напитков, содержащих метанол, могут возникнуть проблемы со зрением или смерть из-за накопления в крови формальдегида и муравьиной кислоты в результате разложения метанола. Поскольку напитки, содержащие высокие концентрации метанола, могут вызывать серьезные проблемы со здоровьем или смертельные исходы при употреблении [7], а потребление токсичных алкогольных напитков является основной причиной смерти и заболеваний во всем мире [8], наличие метанола в напитках должно быть под запретом [9].

Влияние этих химических веществ на окружающую среду рассматривается в виде загрязнения питьевой воды, воздуха и моря. Чтобы устранить или минимизировать это, используются различные подходы очистки воды [10]. Такие жидкости как метанол, этанол, 2-пропанол токсичны не только для человека, но и для водных организмов [11]. Загрязнение морей и озер приводит к истощению кислорода в воде и, как следствие, может угрожать жизни под водой. Поэтому оценка экологической токсичности химических веществ может сыграть ключевую роль в получении пороговых значений с точки зрения безопасности и приемлемых концентраций, но необходимо учитывать надежность и пригодность получаемых данных [12].

Микроволновые методы измерения являются быстрыми, недорогими и безопасными и не зависят от условий окружающей среды [13, 14]. Они обычно используются для измерения значений относительной магнитной проницаемости материалов. Для этой цели была предложена модель, оптимизированная по алгоритму искусственной пчелиной колонии (ИПК-алгоритм) для расчета относительной проницаемости материалов с использованием микроволнового метода [15]. В литературе сообщалось о ряде микроволновых методов, которые использовались на практике для жидкостей. Их можно разделить на две основные группы: метод открытого конца коаксиального зонда [14] и метод свободного пространства [16]. Каждая группа имеет свои преимущества, недостатки и типы применений. Например, метод коаксиального зонда подвержен ошибкам, вызванным неправильным контактом зонда с поверхностью материала (например, воздушными зазорами или пузырьками воздуха). Динамические рефлектометры являются дорогими [17]. С другой стороны, особое внимание следует уделить выбору рупорной антенны, конструкции держателя образца и геометрии образца и местоположения для метода свободного пространства [18].

Методы классификации и группировки обычно используются в экологических приложениях. Общая концентрация тяжелых металлов в осадке сточных вод, полученном на установках механико-биологической очистки сточных вод, была определена с помощью иерархического кластерного анализа [19]. Кроме того, кластерный анализ был использован для исследования элементных концентраций в речных отложениях [20]. Для обнаружения никеля в растворе использовались кварцевые нановесы и метод главных компонент [21]. Наряду с методом главных компонент было проведено селективное определение этилацетата, ацетона, этанола и метилэтилкетона с использованием кварцевых нановесов [22]. Концентрации этанола и метанола изучали с помощью измерений скорости ультразвука в смесях этанол—вода и метанол—вода [23]. Помимо этого были определены параметры бутилированных водно-спиртовых растворов методом терагерцовой (ТГц) спектроскопии [24].

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ УСТАНОВКА, ОПИСАНИЕ МЕТОДИКИ И РЕЗУЛЬТАТЫ

Параметры рассеяния или S-параметры (элементы матрицы рассеяния или S-матрицы) описывают электрические свойства линейных электрических сетей при воздействии различных постоянных воздействий посредством электрических сигналов. S_{11} — коэффициент отражения, а S_{21} — коэффициент передачи. В исследовании были проведены измерения S_{11} для различных жидкостей. Как показано на рис. 1, измерительное устройство состоит из векторного сетевого анализатора

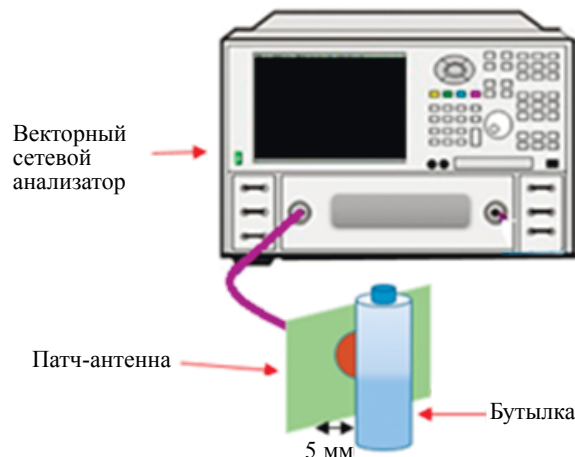


Рис. 1. Экспериментальная установка для классификации жидкостей.

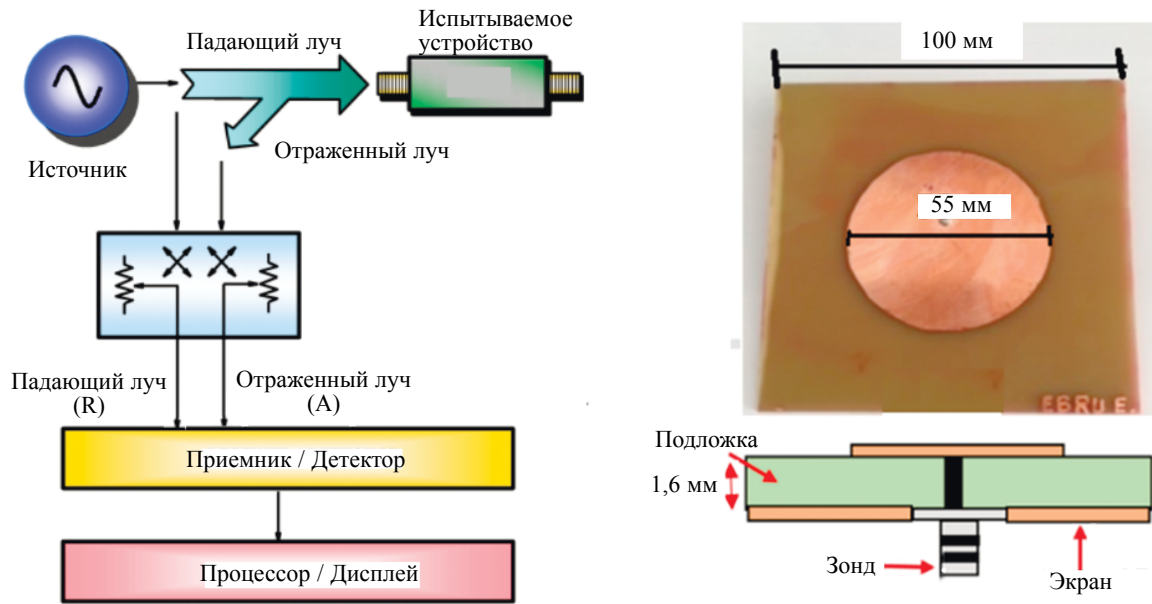


Рис. 2. Конструкция сетевого анализатора и антенны.

(ВСА) и круглой патч-антенны. Измерения жидкости можно проводить в закрытых емкостях, а также погружением в саму жидкость для емкостей более 10 см. Резонансная частота антенны, питаемой через 50-омный коаксиальный электрический соединитель, составляет 1,5 ГГц. На рис. 2 показана схема конструкции сетевого анализатора и антенны.

Часть сигнала от источника передается, а часть отражается. Коэффициент отражения определяется как отношение амплитуды отраженного сигнала к амплитуде передаваемого сигнала и рассчитывается по формуле (1).

$$\text{Коэффициент отражения} = \text{Отраженный луч} / \text{Падающий луч} (A/R). \quad (1)$$

Два разных экспериментальных исследования были проведены в данной работе. В первом из них было определено, содержит ли измеряемая жидкость спирт или нет, и какой именно это спирт. На втором этапе определялись как тип, так и концентрация спирта в жидкости. Принцип метода показан на рис. 3.



Рис. 3. Принцип метода для классификации типа жидкости и концентрации спирта.

K^* -АЛГОРИТМ

K^* -алгоритм использует измерение энтропийного расстояния, чтобы определить спектральное расстояние или схожесть между данными [25]. Это расстояние основано на теории передачи информации. В теории передачи информации энтропия — это мера неопределенности относительно случайных величин [26], оценка расстояния между данными — это сложность преобразования одних данных в другие. Эта сложность рассчитывается в два этапа. На первом этапе определяется конечное число наборов преобразований, которые определяются как преобразования между объектами. На втором этапе преобразование одного признака (a) в другой признак (b) определяется как ряд ограниченных преобразований, которые начинаются в (a) и заканчиваются в (b) [25]. K^* -алгоритм вычисляет кратчайшее расстояние, которое соединяет два объекта, используя расстояние Колмогорова. В этом случае K^* расстояние является суммой всех возможных преобразований между двумя свойствами [27].

Функция вероятности P^* , как вероятность всех путей от свойства a до свойства b при t преобразований:

$$P^*(b/a) = \sum_{\bar{t} \in P: \bar{t}(a)=b} p(\bar{t}). \quad (2)$$

Тогда K^* -функция определяется как

$$K^*(b/a) = -\log_2 P^*(b/a). \quad (3)$$

K^* -функция может использоваться для числовых или символьных наборов данных. При использовании функции для значений численного класса параметр x_0 определяется пользователем до начала обучения. В обоих случаях число выборок, включенных в распределение вероятностей, варьируется от значения 1 до значения N для распределения ближайшего соседства, где все выборки имеют одинаковый вес [25]. Эффективное число образцов для любой функции P^* :

$$n_0 \leq \frac{\left(\sum_b P^*(b/a) \right)^2}{\sum_b P^*(b/a)^2} \leq N. \quad (4)$$

Здесь N обозначает количество всех обучающих выборок, а n_0 указывает количество обучающих выборок из обучающей выборки на кратчайшем расстоянии. K^* -алгоритм определяет значение a для параметров x_0 и s , выбирая значение между n_0 и N . Таким образом, выбранное n_0 дает алгоритм ближайшего соседства и количество N выборок с равным весом. Пригодность этих определенных чисел определяется с помощью параметра смешивания (b). Параметр смешивания варьируется от $b = 0\%$ (для n_0), $b = 100\%$ (для N).

ПОКАЗАТЕЛИ ЭФФЕКТИВНОСТИ

Существуют некоторые показатели эффективности, используемые при оценке производительности алгоритмов распознавания и классификации. Наиболее популярными из них являются точность, среднеквадратическое отклонение (СКО) и коэффициент Каппа.

Точность показывает количество правильно классифицированных образцов:

$$\text{Точность} = \frac{\text{Истинно положительное} + \text{Истинно отрицательное}}{\text{Количество значений}} \quad (5)$$

СКО используется для масштабирования разницы между фактическими и прогнозируемыми значениями. Рассчитывается как

$$\text{СКО} = \sqrt{\frac{(P_1 - a_1) + \dots + (P_n - a_{1n})^2}{n}}, \quad (6)$$

где P — расчетные значения и a — истинные значения. Когда значение СКО приближается к нулю, точность прогнозирующей модели увеличивается, а при удалении СКО от нуля точность прогнозирующей модели уменьшается. Следовательно, желательно, чтобы СКО было очень близким к нулю.

Величина параметра Каппа используется для измерения соответствия между прогнозируемым и наблюдаемым распределениями в группе данных. Параметр Каппа рассчитывается по формуле:

$$K = \frac{P(a) - P(e)}{1 - P(e)}, \quad (7)$$

где $P(a)$ обозначает точность алгоритма, а $P(e)$ представляет собой средневзвешенную величину ожидаемой точности алгоритма, по которому производится расчет на одном и том же наборе данных. Чем ближе значение к 1, тем лучше соответствие.

РЕЗУЛЬТАТЫ

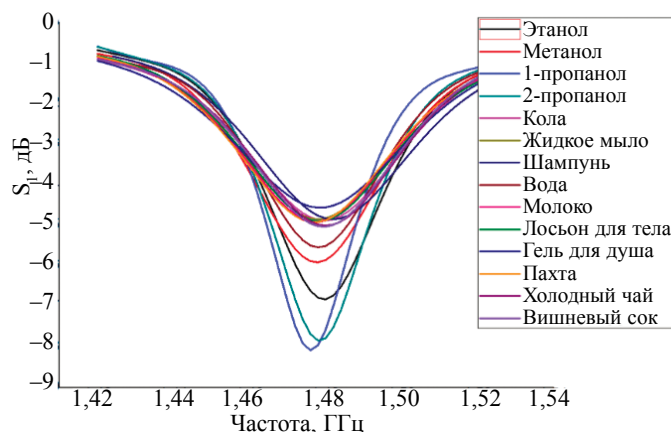
В первом эксперименте, целью которого было определить, содержит ли жидкость спирт или нет, было использовано 14 различных жидкостей, 10 из которых — это напитки, которые мы пьем повседневно, а также жидкости, которые находятся в контакте с человеческой кожей, например, мыло для рук, гель для душа и т.д. Были использованы четыре различных спирта. Названия жидкостей приведены в табл. 1.

Таблица 1

Жидкости, использованные в эксперименте

Жидкости (Безалкогольные)		Спирты
Вишневый сок	Гель для душа	Этанол
Кола	Жидкое мыло	Метанол
Молоко	Шампунь	1-пропанол
Пахта	Лосьон для тела	2-пропанол
Вода	Холодный чай	

Параметры S_{11} для жидкостей показаны на рис. 4. На этом рисунке вертикальная ось показывает амплитуду параметров S_{11} , а горизонтальная ось показывает частоту в ГГц. Как видно из рисунка, жидкость с наибольшим значением амплитуды представляет собой 1-пропанол, а жидкость с наименьшим значением амплитуды представляет собой метанол. Как видно из рис. 5, безалкогольные напитки были также сгруппированы в отдельный класс.

Рис. 4. Параметры S_{11} жидкостей, использованных в эксперименте.

Во втором эксперименте было использовано 45 различных жидкостей, и были предсказаны как типы жидкостей, так и концентрации спирта в них. Были приготовлены водные растворы спиртов этанола, метанола, 1-пропанола и 2-пропанола (10 %, 20 %, ... , 100 % объемных) различных концентраций, и в качестве обучающих данных были использованы параметры S_{11} жидкостей этих

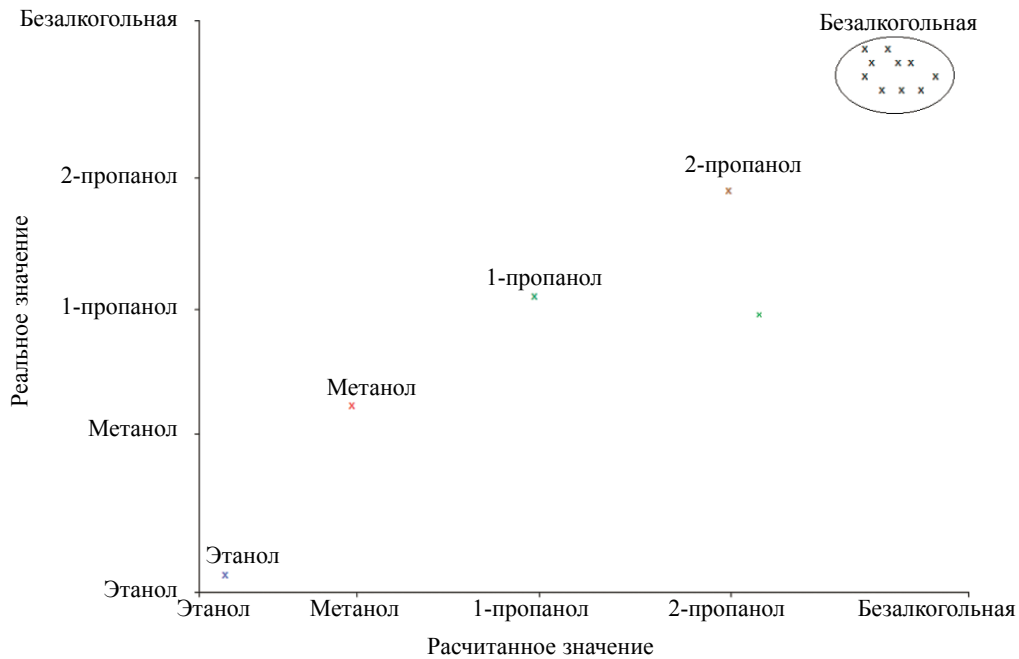


Рис. 5. Распределение жидкостей по типам.

жидких растворов. Точность алгоритма была затем проверена с использованием фирменных алкогольных напитков (красное вино, виски, водка и белое вино) и жидкостей с различной концентрацией спирта. Параметры S_{11} образцов водно-спиртовых растворов с различными концентрациями спирта показаны на рис. 6. Точность предлагаемого подхода для этих жидкостей представлена

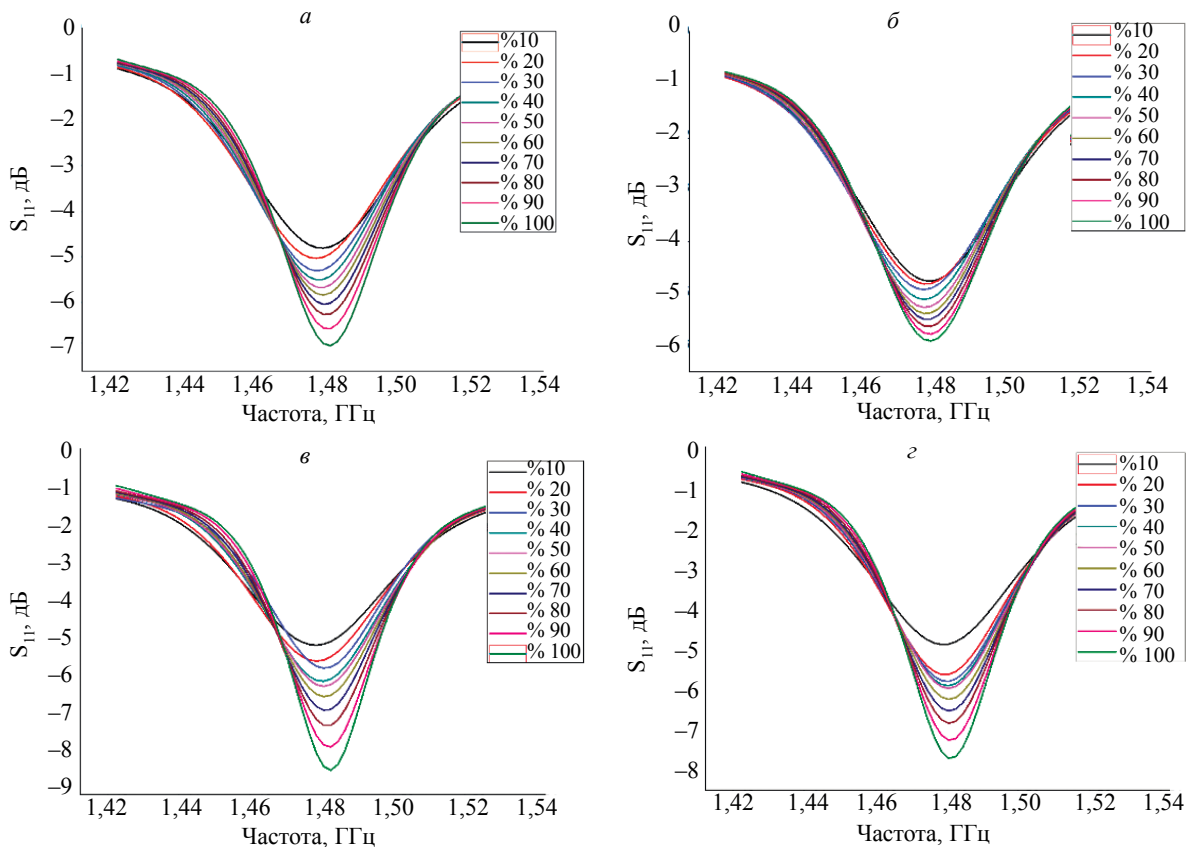


Рис. 6. Параметры S_{11} водно-спиртовых растворов различных концентраций:
 а — этанол; б — метанол; в — 1-пропанол; г — 2-пропанол.

Точность предложенного подхода для различных жидкостей

Спирт/ Алкоголь	Реальное значение, %	Расчетное значение, %	Правда/Ложь
Красное вино	12 % Этанол	10 % Этанол	Правда
Водка	40 % Этанол	40 % Этанол	Правда
Виски	40 % Этанол	40 % Этанол	Правда
Белое вино	12 % Этанол	10 % Этанол	Правда
Этанол	(10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90, 100) % Этанол	(10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90, 100) % Этанол	Правда
Метанол	(10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90, 100) % Метанол	(10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90, 100) % Метанол	Правда
1-пропанол	(10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90, 100) % 1-пропанол	(10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90, 100) % 1-пропанол	Правда
2-пропанол	(10, 20, 30, 50, 60, 70, 80, 90, 100) % 2-пропанол	(10, 20, 30, 50, 60, 70, 80, 90, 100) % 2-пропанол	Правда
2-пропанол	% 40 2-пропанол	% 100 Метанол	Ложь

в табл. 2. Как видно, за исключением случая 40 %-го 2-пропанола, точность предлагаемого подхода достаточно высока, очень близка к 100 %.

Общая эффективность предлагаемого подхода показана на рис. 7. Как видно, алгоритм правильно классифицировал все 14 жидкостей (синим цветом) и 45 из 46 жидкостей (красного цвета). Он имеет точность 100 % при определении типа жидкости и точность 97 % при определении типа и концентрации спирта. Кроме того, значение Каппа равно 1 при определении типа жидкости и 0,977 при определении типа и концентрации спирта. И в том, и в том случае СКО довольно близко к нулю: 0,001 и 0,023 соответственно.

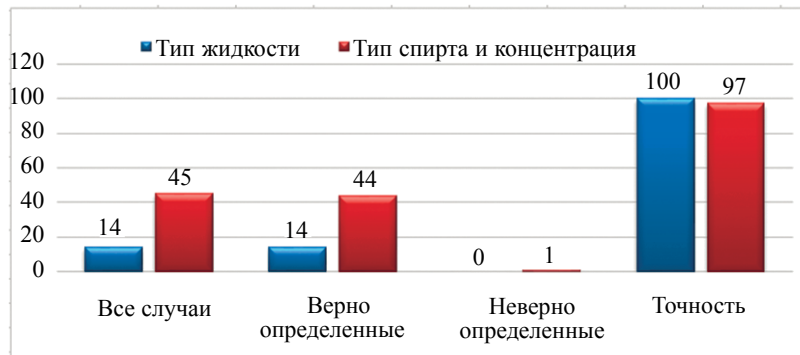


Рис. 7. Показатели эффективности алгоритма.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Недопущение высоких концентраций спиртов и их ненадлежащего использования важно для минимизации и устранения рисков, угрожающих здоровью человека. В этом исследовании была разработана и изготовлена патч-антенна для измерения коэффициентов отражения, которые используются при классификации жидкостей. Параметры S_{11} , полученные с помощью антенны, подключенной к векторному сетевому анализатору, обрабатывались с использованием алгоритма К*. Как показывают результаты классификации, предлагаемый подход позволяет классифицировать жидкости, содержащие спирт и его концентрации успешно и с высокой точностью. Прототип системы, который основан на предложенном подходе и который достаточно легкий, может быть практически использован на практике, находится в стадии разработки.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Valavanidis A., Fiotakis K., Vlachogianni T.* Airborne particulate matter and human health: toxicological assessment and importance of size and composition of particles for oxidative damage and carcinogenic mechanisms // *Journal of Environmental Science and Health. Part C.* 2008. V. 26 (4). P. 339—362.
2. *Pires D., de Kraker M.E.A., Tartari E., Abbas M., Pittet D.* Fight antibiotic resistance — It's in your hands: call from the World Health Organization for 5th may 2017 // *Clinical Infectious Diseases.* 2017. V. 64 (12). P. 1780—1783.
3. *Slaughter R., Mason R., Beasley D., Vale J., Schep L.* Isopropanol poisoning // *Clinical toxicology.* 2014. V. 52 (5). P. 470—478.
4. *Chan A.P., Chan T.Y.* Methanol as an unlisted ingredient in supposedly alcohol-based hand rub can pose serious health risk // *International journal of environmental research and public health.* 2018. V. 15 (7). P. 1440.
5. *Lachenmeier D.W., Rehm J., Gmel G.* Surrogate alcohol: what do we know and where do we go? // *Alcoholism: Clinical and Experimental Research.* 2007. V.31 (10). P. 1613—1624.
6. *Rehm J., Kailasapillai S., Larsen E., Rehm M.X., Samokhvalov A.V., Shield K.D., Roerecke M., Lachenmeier D.W.* A systematic review of the epidemiology of unrecorded alcohol consumption and the chemical composition of unrecorded alcohol // *Addiction.* 2014. V. 109 (6). P. 880—893.
7. *Destanoğlu O., İsmail A.* Determination and Evaluation of Methanol, Ethanol and Higher Alcohols in Legally and Illegally Produced Alcoholic Beverages // *Journal of the Turkish Chemical Society. Section A: Chemistry.* 2019. V. 6 (1). P. 21—28.
8. *Organization W.H.* Global status report on alcohol and health 2018. World Health Organization: 2019.
9. *Zamani N., Rafizadeh A., Hassanian-Moghaddam H., Akhavan-Tavakoli A., Ghorbani-Samin M., Akhgari M., Shariati S.* Evaluation of methanol content of illegal beverages using GC and an easier modified Chromotropic acid method, a cross sectional study // *Substance Abuse Treatment, Prevention, and Policy.* 2019. V. 14 (1). P. 56.
10. *Chowdhary P., Raj A., Bharagava R.N.* Environmental pollution and health hazards from distillery wastewater and treatment approaches to combat the environmental threats: a review // *Chemosphere.* 2018. V. 194. P. 229—246.
11. *Network D.R., Bishop R.E.* Chemical and Biological Hazards Posed by Drilling Exploratory Shale Gas Wells in Pennsylvania's Delaware River Basin Report for the Delaware River Basin Commission Exploratory Well Hearing. 2010.
12. *Moermond C.T., Kase R., Korkaric M., Ågerstrand M.* CRED: Criteria for reporting and evaluating ecotoxicity data // *Environmental Toxicology and Chemistry.* 2016. V. 35 (5). P. 1297—1309.
13. *Kharkovsky S., Zoughi R.* Microwave and millimeter wave nondestructive testing and evaluation- Overview and recent advances // *IEEE Instrumentation & Measurement Magazine.* 2007. V. 10 (2). P. 26—38.
14. *Li Z., Haigh A., Soutis C., Gibson A., Sloan R.* Microwaves sensor for wind turbine blade inspection // *Applied Composite Materials.* 2017. V. 24 (2). P. 495—512.
15. *Tekbas M., Toktas A., Ustun D.* In A Formulaic Model Calculating the Permittivity of Testing Materials Placed on a Circular Patch Antenna / 2019 XXIVth International Seminar/Workshop on Direct and Inverse Problems of Electromagnetic and Acoustic Wave Theory (DIPED), 2019 // *IEEE.* 2019. P. 88—92.
16. *Jose K., Varadan V., Varadan V.* Wideband and noncontact characterization of the complex permittivity of liquids // *Microwave and Optical Technology Letters.* 2001. V. 30 (2). P. 75—79.
17. *Venkatesh M., Raghavan G.* An overview of dielectric properties measuring techniques // *Canadian biosystems engineering.* 2005. V. 47 (7). P. 15—30.
18. *Li Z., Haigh A., Soutis C., Gibson A., Sloan R.* Evaluation of water content in honey using microwave transmission line technique // *Journal of Food Engineering.* 2017. V. 215. P. 113—125.
19. *Gusiatin Z.M., Kulikowska D., Klik B.K., Hajdukiewicz K.* Ecological risk assessment of sewage sludge from municipal wastewater treatment plants: A case study // *Journal of Environmental Science and Health. Part A.* 2018. V. 53 (13). P. 1167—1176.

20. *Ewa I., Oladipo O., Dim L.* Cluster analysis of elemental concentrations of cored Nigerian river sediments // *Journal of Environmental Science & Health. Part A.* 1992. V. 27 (1). P. 1—11.
 21. *Mirmohseni A., Shojaei M., Feizi M.A.H., Azhar F.F., Rastgouye-Houjaghan M.* Application of quartz crystal nanobalance and principal component analysis for detection and determination of nickel in solution // *Journal of Environmental Science and Health, Part A.* 2010. V. 45 (9). P. 1119—1125.
 22. *Mirmohseni A., Razzaghi M., Pourata R., Rastgouye-Hojagan M., Zavareh S.* Selective determination of ethyl acetate, acetone, ethanol, and methyl ethyl ketone using quartz crystal nanobalance combined with principle component analysis // *Journal of Environmental Science and Health. Part A.* 2009. V. 44 (9). P. 847—853.
 23. *Vatandas M., Koc A.B., Koc C.* Ultrasonic velocity measurements in ethanol—water and methanol—water mixtures // *European Food Research and Technology.* 2007. V. 225 (3—4). P. 525—532.
 24. *Jepsen P.U., Jensen J.K., Møller U.* Characterization of aqueous alcohol solutions in bottles with THz reflection spectroscopy // *Optics express.* 2008. V. 16 (13). P. 9318—9331.
 25. *Cleary J.G., Trigg L.E.* K*: An instance-based learner using an entropic distance measure / In *Machine Learning Proceedings, 1995.* Elsevier: 1995. P. 108—114.
 26. *Shannon C.E.* A mathematical theory of communication // *Bell system technical journal.* 1948. V. 27 (3). P. 379—423.
 27. *Piramuthu S., Sikora R.T.* Iterative feature construction for improving inductive learning algorithms // *Expert Systems with Applications.* 2009. V. 36 (2). P. 3401—3406.
-