

Keszei Ernő

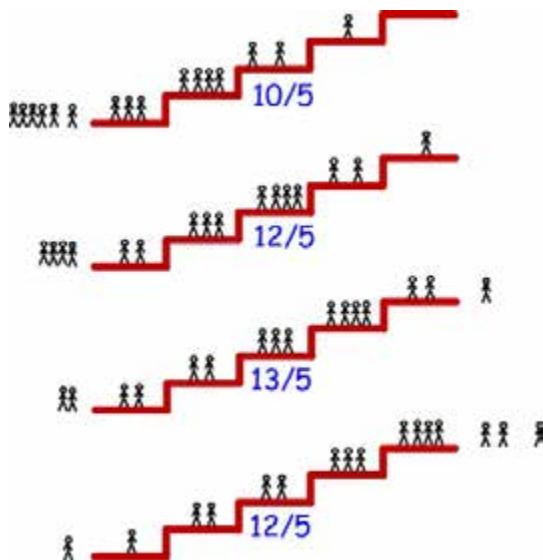
## Hogyan lehet jó megoldásokat tenyészteni?

Furcsán hangozhat ez a cím a KöKÉL lapjain, de nem takar semmi különösebben bonyolult dolgot. Matematikából nyilván ismerős, hogy megoldása egyenleteknek vagy egyenletrendszereknek van. A kémiában pedig sokféle egyenlet előfordul. Ebben a cikkben nem sztöchiometriai egyenletekkel, hanem algebrai egyenletekkel találkozunk majd. Az is kiderül, hogy miért kell és hogyan érdemes ezek megoldásait „tenyészteni”. De menjünk sorjában.

Az egyenletek, amikről szó lesz, azért kellenek, hogy pontosabb információkat szerezzünk egyes molekulák kémiai reakció közben mutatott viselkedéséről. Erről a témáról egyrészt elhangzott egy „Alkímia ma” előadás 2008-ban [1,2], másrészt lehet olvasni róla a Természet Világában [3], illetve az Élet és Tudományban is [4]. Angolul tudók elolvashatják a Nobel-díjas Ahmed Zewail Nobel-előadását is [5]. A dolog lényege az, hogy a  $10^{-12}$  m (pikométer; pm) nagyságrendű mérettel rendelkező, közel 1 km/s sebességgel „rohángáló” és másodpercenként  $10^{14}$  rezgést végző molekulák megfigyelése messze nem egyszerű dolog, továbbá vannak annak fizikai korlátai. Foglalkozunk először ezen korlátok közül az egyik kikerülhetetlennel.

Ahhoz, hogy érthető legyen ez a korlát, először egy analógiát vizsgálunk – próbára téve az olvasó türelmét, aki cserébe remélhetőleg megérti a témánk szempontjából fontos *konvolúció* fogalmát. Tegyük fel, hogy egy földalatti-megállóból sietve kiáradó utasok sebességét akarjuk megmérni a felfelé vezető lépcsőn. Mivel egy lépcsőfokon kb. 1 másodpercet töltenek az utasok felfelé haladtukban, ezért a lépcső alá helyezett mérleg –tehetetlensége miatt – nem tudná ennyi idő alatt megmérni a rajta hirtelen megjelenő, majd hirtelen eltűnő tömeget. Ha viszont – mondjuk – 5 lépcső alá tesszük a mérleget, ami az ezeken lévő együttes tömeget méri, akkor azt már pontosan meg lehet mérni. Ezzel a módszerrel viszont csak a lépcsőnkénti *átlagos* utasszámot lehet nyomon követni az idő függvényében. (Az emberek tömege átlagosan kb. 70 kg, így a tömegből vissza lehet következtetni a számukra. Ha másodpercenként haladnak egy lépcsőfoknyit, akkor a mért tömeg éppen a sebességük „lépcsőmagasság/s” egységben kifejezve.) Mit is

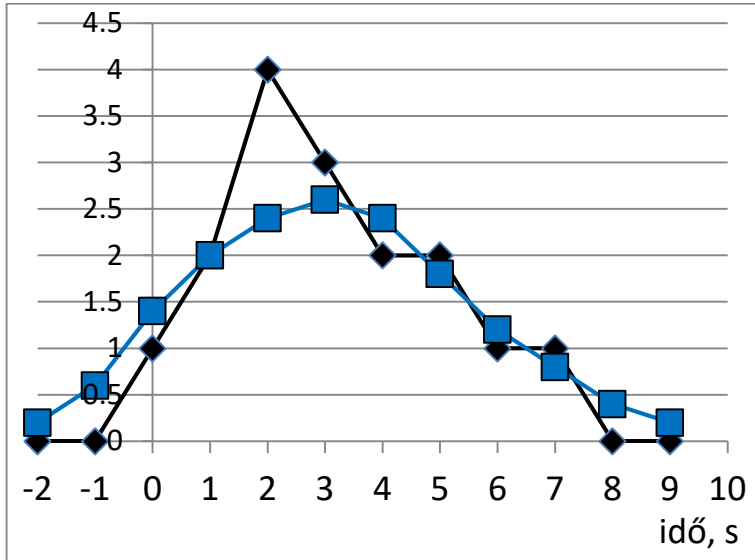
tudunk ilyenkor mérni? Nézzük meg ehhez az 1. ábrát. Ezen azt láthatjuk, hogy 16 utas a következő lépcsőnkénti megoszlásban halad át a lépcsőfokokon: 1, 2, 4, 3, 2, 2, 1, 1. Eközben azonban a mérleg 5 lépcsőjén mérve az *átlagosan* egy lépcsőn lévő emberek száma az összes mért létszám osztva 5-tel. Az ábrán csak 4 egymást követő másodpercben látjuk a lépcsőt, de ebből az egymásután a lépcsőkre lépők számát – ami az ábrán is látszik – figyelembe véve könnyen ki lehet számítani mind a 12 másodpercben mérhető átlagot, amíg az 5 lépcsőn emberek vannak:  $1/5$ ,  $3/5$ ,  $7/5$ ,  $10/5$ ,  $12/5$ ,  $13/5$ ,  $12/5$ ,  $9/5$ ,  $6/5$ ,  $4/5$ ,  $2/5$ ,  $1/5$ , illetve tizedes törtre áttérve: 0,2; 0,6; 1,4; 2; 2,4; 2,6; 2,4; 1,8; 1,2; 0,8; 0,4; 0,2.



1. ábra

Foglaljuk össze az eredményeket egy diagramon. Ebbe rajzoljuk be a középső lépcsőn áthaladók valódi számát, majd azt, hogy az 5 lépcsőn mérhető átlag mennyi lesz a középső lépcsőre számolva. A 2. ábra ezt a diagramot mutatja. Érdekes megfigyelni, hogy a *mozgó átlag* (álló, kék négyzetek) máshogy néz ki, mint az „igazi” áthaladást leíró függvény. Egyrészt hamarabb kezdődik, aminek oka nyilván az, hogy mielőtt még a középső lépcsőfokra érnének az 1. lépcsőre rálépők, az 5 lépcső átlaga már méri őket. Hasonlóképpen még 2 másodpercig méri őket a mérleg,

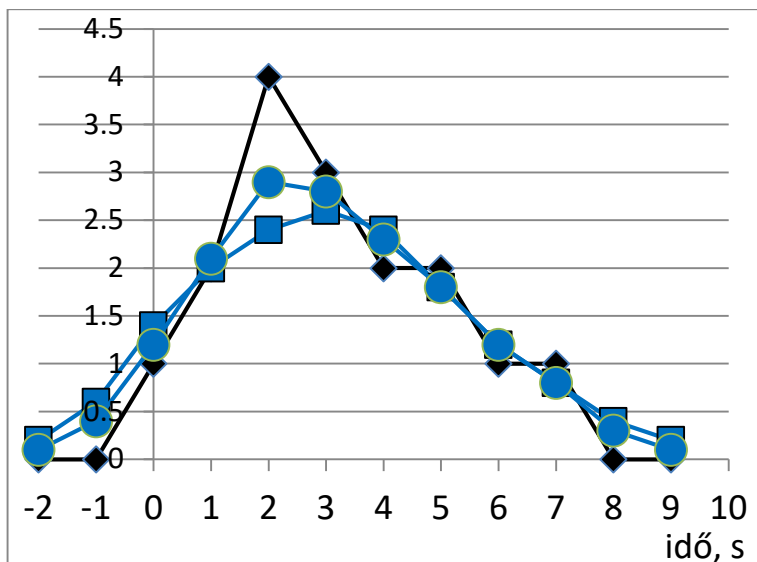
miután az utolsó is lelépett a középső lépcsőről. Megállapíthatjuk tehát, hogy a mozgó átlag az igazi időfüggéshez képest *időben kiszélesedik*, egyúttal a *nagyobb értékek lecsökkennek*.



2. ábra

A mérést máshogy is végezhetnénk. Benézhetnénk egy ablakon, ahol éppen az öt lépcsőn áthaladó embereket tudnánk megszámolni, amit másodpercenként (amely időközönként az utasok az egyes lépcsőfokokon egyet feljebb lépnek) feljegyeznénk. Az eredmény nyilván azonos lenne az előbbi mérésekkel. Végezhetnénk a mérést úgy is, hogy minden utas ruháján lenne egy fényvisszaverő csík, amit megvilágítunk, és a visszavert fény erőssége arányos lenne az ablakban látható személyek számával. Végül ezt úgy is elvégezhetnénk, hogy az ablak lépcsőnként más fényáteresztő képességű lenne. Ez azt eredményezné, hogy a látott fényerősség összege a fényáteresztő képességgel *súlyozott átlagot* mérné. Ha a legjobban a középső lépcső előtti ablaksáv engedi át a fényt, legkevésbé pedig a két szélső, akkor a súlyozott átlag közelebb lenne a középső lépcsőn éppen áthaladó utasok számához. Nézzük meg ezt a példát is, ugyanazon utasok megfigyelésével, mint az előbb.

Legyen az egyes lépcsők előtti ablaksáv fényáteresztő képessége rendre 0,1; 0,2; 0,4; 0,2; 0,1 . Észrevehetjük, hogy a fényáteresztő képességek összege éppen 1. Az 5-tel való osztás helyett ebben az esetben a súlyok összegével kell osztani, hogy a súlyozott átlagot kapjuk. Mivel ez az összeg éppen 1, a lépcsőkön lévő utasszámot a megfelelő súlyokkal megszorozva és összeadva éppen a súlyozott átlagot kapjuk. Az 1. ábrán látható lépcsőnkénti sorrendet figyelembe véve a legfelső esetben  $0 \cdot 0,1 + 1 \cdot 0,2 + 2 \cdot 0,4 + 4 \cdot 0,2 + 3 \cdot 0,1 = 2,1$  lesz a súlyozott átlag. A következő – felülről második – esetben a súlyozott átlag  $1 \cdot 0,1 + 2 \cdot 0,2 + 4 \cdot 0,4 + 3 \cdot 0,2 + 2 \cdot 0,1 = 2,9$ . Az ezt követő két esetben hasonló eljárással 2,8 és 2,3 lesz a súlyozott mozgó átlag. Egészítsük ki a 2. ábrát a súlyozott átlaggal is, és figyeljük meg az így kapott 3. ábrát.



3. ábra

Azt láthatjuk, hogy a kék körökkel jelzett súlyozott átlag valamivel jobban követi az „igazi” időfüggést, de ugyanúgy 2 másodperccel korábban mér utasokat és 2 másodperccel tovább is, hasonlóan a súlyozatlan átlaghoz. Továbbá ugyancsak lecsökkenti a nagy értékeket és megnöveli a kicsiket. Végző soron tehát a súlyozott mozgó átlag is

időben kiszélesíti az igazi időfüggő jelet, és lecsökkenti a nagyobb értékeket.

Általánosítsuk az ablakban mérhető súlyozott mozgó átlag fogalmát a következőképpen. Az „ablakolással” mérhető időfüggő sorozat úgy áll elő, mintha az „igazi” sorozaton „végigtolnánk” az ablakfüggvényt, és minden egyes eltolás után kiszámítanánk a látott átlagot, amit az ablak közepéhez rendelnénk. Fenti példánkban a 8 lépcsőfokot elfoglaló 16 utason toljuk végig az ablakfüggvényt, és az egyszerre 5 lépcsőt látó ablakkal számított mozgó átlagokat mérhetjük – mivel a mérés csak ezeket „látja” –, az egyes lépcsőkön lévő létszámot nem. A mérés eredményét a következőképpen írhatjuk fel az idő függvényében. Jelentse az egyes lépcsőfokokon haladó utasok számát a  $T_1, T_2, T_3, T_4, T_5, T_6, T_7, T_8$  jelsorozat. Az első nemzérus mérési eredmény akkor jelentkezik, amikor az ablak „széle” rátolódik az első lépcsőre, majd ezt követően minden másodpercrek megfelelően eggyel tovább tolva, mindig eggyel több lépcső kerül be az átlagolásba. Ha az ablak által látott lépcsők száma eléri az ötöt, utána kikerül a mérésből a  $T_1$ , majd a  $T_2, T_3$ , és így tovább. Amikor az ablakot teljesen végigtoltuk a lépcsőkön, utána ismét zérus a mérés eredménye. (Az áttekinthetőség kedvéért az alábbiakban az ablakfüggvény szorzótényezői **vastag számok**.)

$$\begin{aligned}
 T_1 \cdot \mathbf{0,1} + T_2 \cdot 0 + T_3 \cdot 0 + T_4 \cdot 0 + T_5 \cdot 0 + T_6 \cdot 0 + T_7 \cdot 0 + T_8 \cdot 0 &= 0,1 \\
 T_1 \cdot \mathbf{0,2} + T_2 \cdot \mathbf{0,1} + T_3 \cdot 0 + T_4 \cdot 0 + T_5 \cdot 0 + T_6 \cdot 0 + T_7 \cdot 0 + T_8 \cdot 0 &= 0,4 \\
 T_1 \cdot \mathbf{0,4} + T_2 \cdot \mathbf{0,2} + T_3 \cdot \mathbf{0,1} + T_4 \cdot 0 + T_5 \cdot 0 + T_6 \cdot 0 + T_7 \cdot 0 + T_8 \cdot 0 &= 1,2 \\
 T_1 \cdot \mathbf{0,2} + T_2 \cdot \mathbf{0,4} + T_3 \cdot \mathbf{0,2} + T_4 \cdot \mathbf{0,1} + T_5 \cdot 0 + T_6 \cdot 0 + T_7 \cdot 0 + T_8 \cdot 0 &= 2,1 \\
 T_1 \cdot \mathbf{0,1} + T_2 \cdot \mathbf{0,2} + T_3 \cdot \mathbf{0,4} + T_4 \cdot \mathbf{0,2} + T_5 \cdot \mathbf{0,1} + T_6 \cdot 0 + T_7 \cdot 0 + T_8 \cdot 0 &= 2,9 \\
 T_1 \cdot 0 + T_2 \cdot \mathbf{0,1} + T_3 \cdot \mathbf{0,2} + T_4 \cdot \mathbf{0,4} + T_5 \cdot \mathbf{0,2} + T_6 \cdot \mathbf{0,1} + T_7 \cdot 0 + T_8 \cdot 0 &= 2,8 \\
 T_1 \cdot 0 + T_2 \cdot 0 + T_3 \cdot \mathbf{0,1} + T_4 \cdot \mathbf{0,2} + T_5 \cdot \mathbf{0,4} + T_6 \cdot \mathbf{0,2} + T_7 \cdot \mathbf{0,1} + T_8 \cdot 0 &= 2,3 \\
 T_1 \cdot 0 + T_2 \cdot 0 + T_3 \cdot 0 + T_4 \cdot \mathbf{0,1} + T_5 \cdot \mathbf{0,2} + T_6 \cdot \mathbf{0,4} + T_7 \cdot \mathbf{0,2} + T_8 \cdot \mathbf{0,1} &= 1,8 \\
 T_1 \cdot 0 + T_2 \cdot 0 + T_3 \cdot 0 + T_4 \cdot 0 + T_5 \cdot \mathbf{0,1} + T_6 \cdot \mathbf{0,2} + T_7 \cdot \mathbf{0,4} + T_8 \cdot \mathbf{0,2} &= 1,2 \\
 T_1 \cdot 0,1 + T_2 \cdot 0 + T_3 \cdot 0 + T_4 \cdot 0 + T_5 \cdot 0 + T_6 \cdot \mathbf{0,1} + T_7 \cdot \mathbf{0,2} + T_8 \cdot \mathbf{0,4} &= 0,8 \\
 T_1 \cdot 0,1 + T_2 \cdot 0 + T_3 \cdot 0 + T_4 \cdot 0 + T_5 \cdot 0 + T_6 \cdot 0 + T_7 \cdot \mathbf{0,1} + T_8 \cdot \mathbf{0,2} &= 0,3 \\
 T_1 \cdot 0,1 + T_2 \cdot 0 + T_3 \cdot 0 + T_4 \cdot 0 + T_5 \cdot 0 + T_6 \cdot 0 + T_7 \cdot 0 + T_8 \cdot \mathbf{0,1} &= 0,1
 \end{aligned}$$

Vegyük észre, hogy méréssel csak a mozgó súlyozott átlagot látjuk, hiszen a  $T_1, T_2, T_3, T_4, T_5, T_6, T_7, T_8$  jelsorozatot a mérésből nem ismerjük. (Ha ismernénk, nem kellene mérnünk. Fenti példánkban azt csak azért tettük ismertté, hogy lehessen látni az átlagolás hatását.) Hogyan juthatunk hozzá ehhez az „igazi”, torzítatlan jelsorozathoz? Meg kell hozzá oldani a felírt egyenletrendszer, amiből az is látszik, hogy

igazából négyet el is hagyhatnánk belőle, mert a 8 ismeretlen  $T$  érték 8 egyenletből meghatározható. A baj azonban az, hogy az egyenletek túlságosan hasonlítanak egymásra, ami miatt azoknak több megoldása is lehet, még ha nagyon pontosak is a mérési eredmények. Ha azonban a méréseknek hibája is van, akkor nagyon sok, általában végtelen számú megoldás létezik. (Ezt pl. úgy lehet elképzelni, hogy a szomszédos  $T$  értékek váltakozva hol igen nagyok, hol igen kicsik. Ez az ingadozás az átlagolás miatt eltűnik, és eredményként végtelen sok jelsorozat ugyanazt a 12 átlagos értéket adja az idő függvényében.)

A matematika nyelvén a mozgó átlag képzését *konvolúciónak* nevezik. A mérendő  $T$  jelsorozat és az  $A$  ablakfüggvény esetén így a fenti 12 egyenlet helyett egyszerűen írhatjuk az azokat szimbolizáló  $T * A = K$  alakot, ahol  $K$  a mért jelsorozat (a mozgó átlag). Szokás ezeket a jelsorozatokat *tárgyfüggvénynek*, *ablakfüggvénynek* és *képfüggvénynek* is nevezni. Ez arra utal, hogy az éles „tárgyat” csak torzított „kép” alakjában látjuk az „ablakon” keresztül. A továbbiakban ezeket az elnevezéseket használjuk.

Amint láthattuk, a konvolúció egy olyan művelet, amelynek során csak mozgó átlagot látunk, ami eltorzítja a képet. Ha ebből a képből vissza szeretnénk állítani az eredeti tárgyat, akkor a konvolúció inverz (fordított) műveletét kell elvégeznünk: a képfüggvényből (az ablakfüggvény ismeretében) visszaállítani a tárgyfüggvényt. Amint azonban a példából is látszott, ez nem egy egyszerű művelet, mint ahogy pl. a szorzás inverz művelete az osztás. Ehelyett egy (rosszul viselkedő) egyenletrendszer kell megoldani. Az inverz műveletek mintájára azonban ennek az eljárásnak is van egy egyszerű neve: *dekonvolúció*, azaz a konvolúció „visszafordítása”. Ha tehát csak konvolúción keresztül tudunk mérni egy jelsorozatot, akkor az eredeti, torzítatlan jel visszanyeréséhez dekonvolúciót kell végeznünk. Azt is láttuk viszont, hogy a dekonvolúció eredménye akár végtelen sok különböző képfüggvény is lehet.

Na de miért is kell konvolúciót mérni? Ilyent csak akkor teszünk, ha máshogy nem tudjuk megmérni az adott jelsorozatot. (A fenti példában, amikor mérleggel mérünk pl. azért nem, mert egyetlen lépcsőn töltött idő a mérleg tehetetlensége miatt nem elég ahhoz, hogy meg tudjuk mérni a rajta túl gyorsan megjelenő és eltűnő tömeget.) Nyilván kitalálta az olvasó, aki eddig eljutott, hogy a molekulák viselkedésében is lehet

valami nagyon gyors dolog, ami miatt csak konvolúcióval torzítva tudjuk nyomon követni viselkedésüket a kémiai reakciók során. Nézzük most ennek az okait. Amint a bevezetőben említésre került, a molekulák nagyon gyorsan mozognak, és nagyon sokan vannak. A kémiai reakció során az atommagoknak kell más elrendeződést felvenni, azaz jelentősen elmozdulni. Az atommagok tehetetlensége kicsi, ezért elmozdulásuk gyors. Stabilis molekulákban ez a periodikus mozgás éppen a rezgési frekvenciáknak felel meg. Amint a bevezetőben olvasható, a molekulák másodpercenként kb. néhányszor  $10^{14}$  rezgést végeznek, ennek megfelelően  $10^{-15}$  másodperc (femtoszekundum; fs) egységben kifejezve kb. 10 és 100 fs közötti idő szükséges a molekulák átrendeződéséhez; a régi kötések felszakadásához és az újak kialakulásához. Az időmérést mostanában elektronikus rezgőkörök rezgéseinek számlálásával végezzük. Kvarckristállyal működő digitális óráinkban ez a rezgés szám kb. 1 kHz, azaz másodpercenként 1000 rezgés. Ezzel legfeljebb 0,001 másodperc időtartamot tudunk mérni. A leggyorsabb rezgéseket, amit időmérésre tudunk használni, számítógépeink processzorai végzik. Ezek közül a leggyorsabbak mostanában kb. 10 GHz frekvenciájúak, ami azt jelenti, hogy  $10^{-10}$  másodperc alatt rezegnek egyet. Ennek megfelelően legfeljebb 0,1 nanoszekundum ( $0,1 \times 10^{-9}$  másodperc) rövidegű időtartam mérhető velük. A 10 fs ennek 100 000-ed része, ezért ez nem jöhet szóba időmérésként. A megoldást a fény kínálja: közel 300 000 km/s sebességével 1 fs alatt 0,3 mikrométert ( $0,3 \mu\text{m}$ ) tesz meg. Ez azt jelenti, hogy ha a reakciót elindító és annak előrehaladását mérő fényimpulzusok között 0,3  $\mu\text{m}$  a fényút-különbség, akkor azok időben éppen 1 fs különbséggel követik egymást. Ezt az útkülönbséget egy tükör megfelelő elmozdításával pontosan be lehet állítani, így elérhető az 1 fs időfelbontás. Természetesen ehhez elég rövid fényimpulzusokra is szükség van.

Ugyan rövid fényimpulzusok előállítására impulzuslézerekkel ma már megoldott, de alkalmazásuknak határt szab egy természeti törvény, a *Heisenberg-féle határozatlansági reláció*. Eszerint a fényimpulzust alkotó fotonok energiája és az impulzus időbeli kiterjedése között érvényes az alábbi összefüggés:

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{1}{2} \frac{h}{2\pi}$$

A képletben  $\Delta E$  a fotonenergia-eloszlás szélessége, míg  $\Delta t$  az impulzus időbeli kiterjedésének szélessége. A jobb oldalon szereplő  $h$  a *Planck-állandó*, amelynek értéke  $6,626 \cdot 10^{-34}$  J·s. Eszerint az energia kiszélesedésének mértéke fordítottan arányos az időbeli szélességgel; minél kisebb a fényimpulzus kiterjedése időben, annál kiterjedtebb az abban haladó fotonok energiatartománya. Ha ezt kb. 520 nm hullámhosszú, zöld színű látható fényre vonatkoztatjuk, akkor a hullámhosszban fellépő kb. 10 nm kiszélesedésnek kb. 100 fs időbeli impulzusszélesség felel meg.<sup>1</sup> Mivel a reakció indítása is, de még inkább a molekulák reakció közben történő változásának nyomon követése igen pontos energiát (azaz fényhullámhosszat) igényel, ezért nem nagyon lehet 100 fs-nál rövidebb impulzusokat alkalmazni erre a célra, mert akkor a fotonok energiája nem lenne elég pontos. (Itt érdekes az, hogy a molekulák nagyon sokan vannak, és a lézerympulzus közülük csak kevésben indítja el a reakciót. Ezt a keveset kell megkülönböztetni a rengeteg többitől, ami pontos energiát kíván meg.)

Adva van tehát egy olyan folyamat – a molekulák átalakulása más molekulákká –, ami 100 fs nagyságrendű idő alatt játszódik le, valamint két fényimpulzus, aminek segítségével ezt a folyamatot akarjuk nyomon követni, de a fényimpulzusok szélessége is 100 fs nagyságrendbe esik. Szerencsére a konvolúciónak van egy jó tulajdonsága, a *kommutativitás*. A szorzáshoz hasonlóan ennél a műveletnél is mindegy a sorrend, ha pl. három függvény konvolúciójáról van szó. Így megtehetjük azt, hogy először a reakciót elindító „ablakfüggvényt” ( $A_1$ ) konvolváljuk a termékek viselkedését mérő „ablakfüggvénnyel” ( $A_2$ ), majd az eredményt konvolváljuk a termékek viselkedését visszatükröző jelsorozattal. Ez a jelsorozat lehet az átalakuló molekulák fényelnyelése a mérő impulzusból, vagy a mérő impulzus által gerjesztett molekulák fénykibocsátása. Az egyszerűség kedvéért a két ablakfüggvény konvolúciójából előálló „eredő ablakfüggvényt” tekintsük a továbbiakban a mérés során alkalmazott egyetlen ablakfüggvénynek:

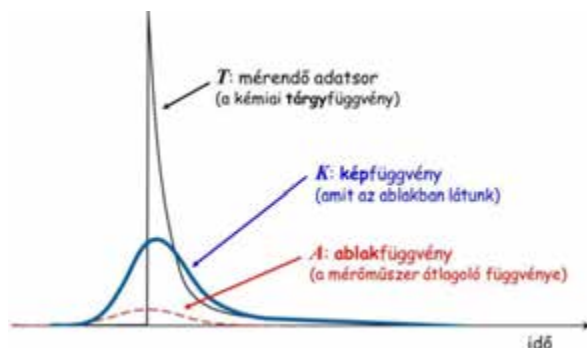
$$A_1 * T * A_2 = A * T = K$$

---

<sup>1</sup> A fény  $E$  energiája a  $\nu$  hullámhossz függvényében  $E = h\nu$ , amit kifejezhetünk a  $c$  fénysebességgel és a  $\lambda$  hullámhosszal  $E = hc/\lambda$  alakban is.



Ezzel a jelöléssel elérkeztünk a mérés során fellépő torzítás értelmezéséhez. A továbbiakban még egy egyszerűsítést alkalmazunk; mivel a mérések során elvileg akármilyen kis időközökre bonthatnánk a jelsorozatokat (már amit a fényútkülönbség beállításának pontossága megenged), ezért a jelsorozat pontjai helyett csak az azokat összekötő görbét rajzoljuk a diagramokba. Így pl. egy széteső molekula bomlása közben mérhető, monoton csökkenő jelsorozat példáján a femtoszekundum időfelbontású mérést a 4. ábrával szemléltethetjük.



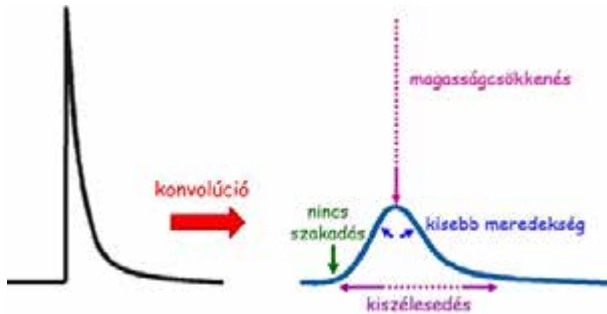
4. ábra

A 4. ábrán látható, hogy a fent felsorolt okok miatt a molekulákban lévő kötések felszakadását és az új kötések kialakulását közvetlenül nem, csak az ablakfüggvény átlagoló torzításán keresztül tudjuk megmérni. Ha a molekuláris átrendeződés időbeli lefolyását – az „igazi” tárgyfüggvényt – szeretnénk megismerni, dekonvolúciót kell végeznünk, azaz megoldani a konvolúciót leíró egyenletrendszer. Mivel a mérések során mindig fellép valamilyen véletlen (ingadozásszerű) hiba is, ezért eleve reménytelen a szokásos matematikai módszerek alkalmazása, mert azok végtelen sok megoldást eredményezhetnek. Vannak olyan módszerek is, amelyek a megoldás során megpróbálják az eredményt valamilyen korlátok között tartani, de ennek az az ára, hogy belevisznek valami olyan torzítást, amely eleve nem engedi meg a helyes, teljesen torzítatlan megoldást eredményként. (Erről angol nyelven részletesen lehet olvasni jelen cikk szerzőjének munkájában [6]).

A „korlátok között tartás” egyik érdekes és nagyon hatékony lehetősége a jó megoldások *tenyésztése*, amely az állatok, ill. növények nemesítésének eljárását utánozza: kiválasztja a jobbaknak bizonyuló megoldásokat, és azokat engedi tovább „szaporodni”. Azokat a módszereket, amik eszerint működnek, *evolúciós algoritmusoknak* szokás nevezni. Ezeknek több változata is van, amik közül az egyik leggyakrabban alkalmazott módszer a *genetikus algoritmus*. A továbbiakban ezzel foglalkozunk. Mielőtt a konkrét probléma megoldásával foglalkoznánk, röviden áttekintjük, hogyan is működik egy genetikus algoritmus. Az eredeti ötlet evolúcióbiológusoktól származik, akik az evolúció számítógépes modellezésére használták a módszert. Létrehoztak egy *kezdeti génállományt*, ami minden egyed esetén kissé különböző volt a többiekétől. Az egyedeknek ebből a genomjából létrehozták magukat az élőlényeket, majd megmérték mindegyiknek az életképességét, azaz *fitneszét*. A továbbiakban az egyedeket fitneszükkel arányos valószínűséggel válogatták ki szaporodásra. A kiválasztott szülők génállományát *keresztelték*, majd az így kialakuló genomot még *mutációnak* vetették alá, aminek során véletlenszerűen megváltoztattak néhány gént. A mutáción is átesett utódok alkották a következő generációt, akikkel ismét végrehajtották ezt a „szaporítási” folyamatot. (A szülők vagy „kihaltak”, vagy a leg fittebbet közülük megtartották az új generációban is – ami garantálta, hogy biztosan nem romlott az új generáció legjobb egyedének fitnesze. Ennek a szülőmegtartásnak a neve az *elitizmus*.) A tenyésztés során így az egyedek fitnesze sosem romlott, de gyakran javult. Amikor a megfelelő fitneszt (a kívánt tulajdonságú egyedet) elérték, akkor volt vége a tenyésztésnek. Amint látható, az eljárásban két kulcsprobléma merül fel. Az egyik a *kezdeti populáció* kialakítása (a „teremtés”), a másik az evolúció során alkalmazott evolúciós műveletek (kiválasztás, keresztezés és mutáció) módszereinek megválasztása.

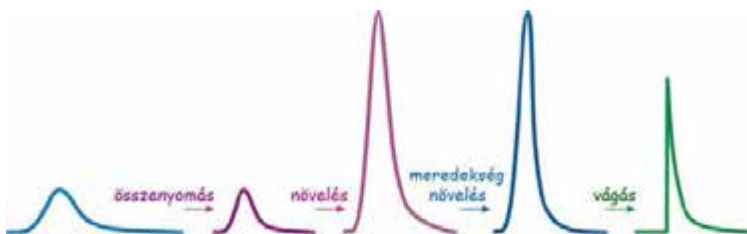
Térjünk át most a genetikus algoritmus alkalmazására a dekonvolúció elvégzése céljából. Foglalkozzunk először a kezdeti populáció létrehozásával. A genetikus algoritmusok alkalmazása esetén a leggyakrabban teljesen véletlenszerűen állítják össze a kezdeti populációt. Az rögtön kiderül, hogy dekonvolúciós célokra ez alkalmatlan; a megoldás „kordában tartását” semmiképpen nem szolgálja, pedig ez a fő feladat. Ha viszont megfigyeljük, milyen változásokat okoz a mozgó átlagolás (a konvolúció) a tárgyfüggvényben,

akkor kiindulhatunk a képfüggvényből, és azt úgy változtathatjuk, hogy jobban hasonlítson a konvolúció előtti, torzítatlan alakjához. Ebből az is következik, hogy célszerű a génállomány szerepében eleve egy megoldásfüggvény-jelölt adatsort használni, mint a lehetséges torzítatlan tárgyfüggvény valamilyen közelítését. Ennek kialakításához tekintsük az 5. ábrát, amin nyomon követhetjük a konvolúció torzító hatását.



5. ábra

Az ábrán feltüntetett hatásokat kell „visszaalakítani”, azaz a mért képfüggvényen a 6. ábrán látható változtatásokat kell végrehajtani. Észrevehetjük, hogy a kezdeti populáció 6. ábrán vázolt „teremtésével” valóban közelebb juthatunk a dekonvolúció megvalósításához, a képfüggvényből a kevésbé torzított változatok létrehozásához.



6. ábra

Hogyan lesz az ábrán látható eljárás eredménye több változat? Az összenyomás, a jelmagasság és a meredekség növelése, valamint a vágás

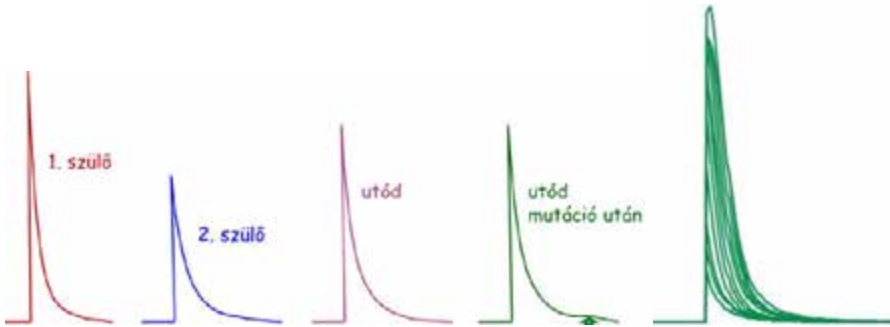
helyének kiválasztása tartalmaz *véletlen hatásokat* is, így a kezdeti populáció egyedei valamelyest különbözni fognak egymástól.

A fenti eljárás viszont nem fordít arra figyelmet, hogy a kezdeti populáció egyedei megfeleljenek annak az elvárásnak, hogy ha őket az *A* ablakfüggvénnyel konvolváljuk, akkor *pontosan* a képfüggvényt kell visszakapnunk. Az evolúció – az egymást követő generációk tenyésztése – éppen ezt a célt szolgálja: azokat az egyedeket részesíti előnyben a szaporodásra nagyobb valószínűséggel, akik jobban teljesítik ezt a feltételt. Vizsgáljuk meg az egyes evolúciós műveleteket ennek során.

Először az adott generáció egyedeinek fitnessét kell kiszámítani. Ez úgy történik, hogy mindegyiket konvolváljuk az ablakfüggvénnyel, majd a konvolvált jelsorozat minden pontját összehasonlítjuk a megfelelő képfüggvény-ponttal. A pontonként képezett eltérések négyzetének összege mutatja meg a különbség mértékét a két jelsorozat között. (Azért a négyzete, hogy a pozitív és negatív különbségek egyaránt növeljék ezt az eltérést.) Ennek az összegnek a reciprok értéke pl. annál nagyobb, minél kisebb az eltérés, így ez egy jó fitness-mérő szám. Az egyedekből a fitnesszel arányos valószínűséggel kiválasztunk két szülőt, akik keresztezésével megkapjuk az utódjukat. Ez a keresztezés úgy történik, hogy a két jelsorozat megfelelő pontjainak *átlaga* lesz az utód-jelsorozat adott pontja. Ezután következik a mutáció. Hogy az ne „hullámoztassa meg” nagyon a jelsorozatot, ezért az átlag-utód jelsorozatához egy viszonylag hosszú, sima, kis magasságú (vagy mélységű) jelsorozatot adunk hozzá. Ennek magasságát és hosszúságát véletlen számok határozzák meg, ettől alakul véletlenszerűen a végleges utód jelsorozata. Miután elegendő számú utódot hoztunk így létre, hozzájuk adjuk a szülők legfittebb egyedét, a többi szülő-jelsorozat pedig törődik. A szaporítást az így kapott generációval megismételjük. Az eljárást addig folytatjuk, amíg a legnagyobb fitnessű jelsorozat és a képfüggvény közötti eltérések négyzeteinek összege kisebb lesz egy előre meghatározott küszöbértéknél.

A tenyésztésbe beépíthetünk további korrekciókat is. A 4–5–6. ábrán szereplő, szakadással induló tárgyfüggvény esetén pl. a kezdeti populációban jónak talált szakadási helyet nem engedjük megváltoztatni. (Ehhez persze jól kell azt az elején megválasztani, amit egy előzetes „próbatenyésztés” eredményeire alapozva tehetünk meg.)

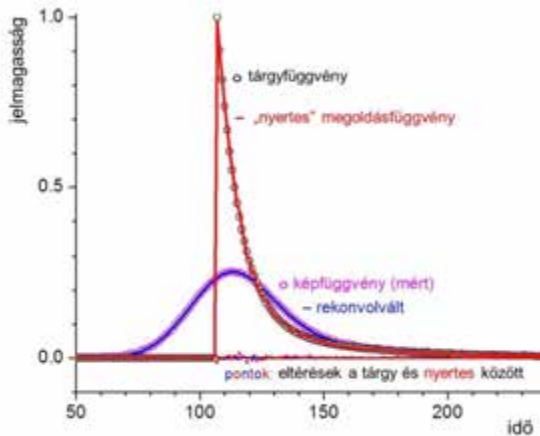
Nézzük meg a 7. ábrán, hogyan alakul ki egy új jelsorozat egy generáció szaporítása során.



7. ábra

A mutáció előtt létrehozott utód a két szülő pontonkénti átlaga. A mutáció ezen úgy változtat, hogy – az ábrán egy pozitív értékekből álló, azaz felfelé módosító – sima görbét ad hozzá a nyíllal jelölt helyen. A mutációt azonban véletlen számok irányítják, így lehet negatív korrekció is, amelynek magassága (mélysége) és szélessége is véletlen számoktól függ. Az így létrehozott egyedek egymástól is, szüleiktől is különböznek. Mutáció nélkül nem tudnak ugyan sem kisebbek, sem nagyobbak lenni a szülőknél (mivel átlaguk szükségképpen a kettő között marad), de a mutáció a véletlen változtatások miatt akár nagyobb, akár kisebb utódot is eredményezhet a szülőknél. A 7. ábra jobb szélén egy lehetséges generációt láthatunk.

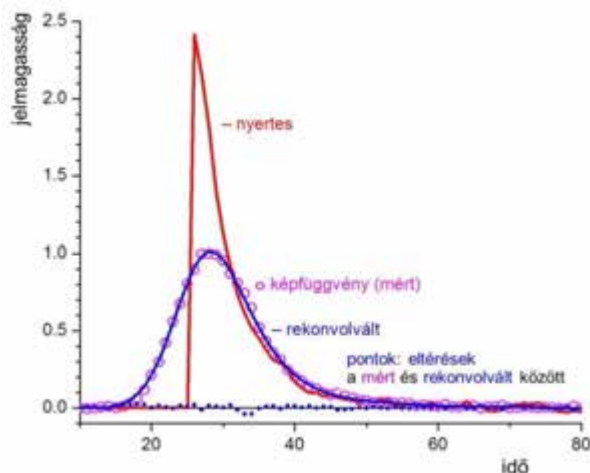
A genetikus algoritmusok teljesítőkéességét úgy lehet megítélni, hogy számítógéppel előállítunk egy jelsorozatot, amit tárgyfüggvényként kezelünk, és konvolváljuk egy adott ablakfüggvénnyel. Az így kapott képfüggvényt aztán dekonvolváljuk az algoritmus használatával. A kapott dekonvolvált jelsorozat összehasonlítása az eredeti tárgyfüggvénnyel megmutatja a módszer jóságát. (Ezt az eljárást szokás *validációnak*, azaz a módszer érvényességét bizonyító eljárásnak nevezni.) A 8. ábrán ennek az eljárásnak a részletei láthatók.



8. ábra

Az ábrán a kiindulási tárgyfüggvényt pontonként, üres fekete körökkel tüntettük fel. Ebből képeztük a pontonként lila körökkel rajzolt szintetikus képfüggvényt, amit dekonvolúciónak vetünk alá. A genetikusan algoritmus során „nyertes” (az eljárás végén a leg fittebb) megoldásfüggvényt a piros vonal mutatja, amin látszik, hogy torzítatlanul követi a fekete köröket. Ennek a rekonvolt (újra konvolt) változata a folyamatos kék vonal. A tárgy és a nyertes közötti eltéréseket kis piros pontok jelzik. Jól látható, hogy azok csak kissé és véletlenszerűen térnek el zérustól, ami a pontos megoldásra utal. (Az eltérések oka az, hogy a szintetikus tárgyfüggvényhez adtunk egy kis véletlen hibát is, a valódi mérés utánzása céljából.) Az ábráról megállapíthatjuk, hogy a tárgyfüggvény ismerete nélkül azt nagyon pontosan megtalálta a genetikusan algoritmus.

A validálást követően valódi kísérleti adatokkal is elvégezhetjük a dekonvolúciót. Egyik ilyen vizsgálathoz a 9. ábrán lila körökkel berajzolt mért jelsorozatot használtuk, amelyet dezoxi-adenozin-foszfát (a DNS molekula egyik monomer nukleotidja) gerjesztését követően kialakuló molekulák fluoreszcencia-lecsengésének mérése során kaptak egy francia laboratóriumban.



9. ábra

A gerjesztés során képződött molekuláktól az várható el, hogy a fluoreszcencia hirtelen felugrással kezdődik, és monoton lecsengéssel folytatódik. Ezt a tendenciát sikerült egészen jól visszaadni, miközben a dekonvolvált (nyertes) jel maximuma közel a mért jel 2,5-szeresére emelkedett. A felutás itt is lépcsőszerű, és nem jelentkeznek nagyobb hullámzások sem a dekonvolvált jelben.

Az ábrán a piros vonal a dekonvolvált megoldásfüggvényt mutatja, a folyamatos kék vonal pedig ennek a rekonvolvált (újra konvolvált) változata. A mért és a rekonvolvált jelsorozatok közötti eltéréseket kis kék pontok jelzik. Látszik, hogy az eltérések kicsik és véletlenszerűek. (Ebben az esetben természetesen nem tudjuk kiszámítani a nyertes eltérését az ismeretlen tárgyfüggvényről.)

Az itt leírt dekonvolúciós eljárás nemcsak ultragyors folyamatok eredményeire alkalmazható. A különböző spektrumokban megjelenő sávok is értelmezhetők spektrumvonalak kiszélesedéseként, ami ugyancsak leírható konvolúcióval. Hasonló tulajdonságúak a különböző kromatogramokban megjelenő, kiszélesedett csúcsok is. De nemcsak a kémiai gyakorlatban fordul elő olyan eset, ahol konvolúció eredményeként lehet leírni valamely jelet. Pl. torzított hangfelvételek helyreállításakor is kiválóan alkalmazható a dekonvolúció. Az eljárás kétdimenziós, síkon történő általánosításával életlen képek is

hatékonyan élesíthetők. Érdeemes tehát tudni róla, hogy a mozgó átlaggal leírható, gyakran előforduló mérési eredményeket hogyan lehet megszabadítani a konvolúció okozta torzítástól.

### Hivatkozások

- [1] [www.chem.elte.hu/w/pr/alkimia\\_2008\\_2009/alkimia\\_Keszei.wmv](http://www.chem.elte.hu/w/pr/alkimia_2008_2009/alkimia_Keszei.wmv)
- [2] [www.chem.elte.hu/w/pr/alkimia\\_2008\\_2009/alkimia\\_Keszei.pdf](http://www.chem.elte.hu/w/pr/alkimia_2008_2009/alkimia_Keszei.pdf)
- [3] Keszei Ernő: Molekulák viselkedése reakció közben: a kísérleti megfigyelés korlátai és azok meghaladása, *Természet Világa*, 140. évfolyam, 5. szám, 2009. május;  
[www.termeszetvilaga.hu/szamok/tv2009/tv0905/keszei.html](http://www.termeszetvilaga.hu/szamok/tv2009/tv0905/keszei.html)
- [4] Bajomi Bálint: Interjú Keszei Ernővel. *Élet és Tudomány*, 2016. október 12.;  
[www.eletestudomany.hu/a\\_molekulak\\_ultragyors\\_viselkedese](http://www.eletestudomany.hu/a_molekulak_ultragyors_viselkedese)
- [5] Ahmed Zewail: Femtochemistry. Atomic-scale dynamics of the chemical bond using ultrafast lasers. Nobel lecture, December 8, 1999; [www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/chemistry/laureates/1999/zewail-lecture.pdf](http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/1999/zewail-lecture.pdf)
- [6] Ákos Bányász, Ernő Keszei: Model-free deconvolution of femtosecond kinetic data, *J. Phys. Chem. A*, **110**, 6192-6207 (2006)