



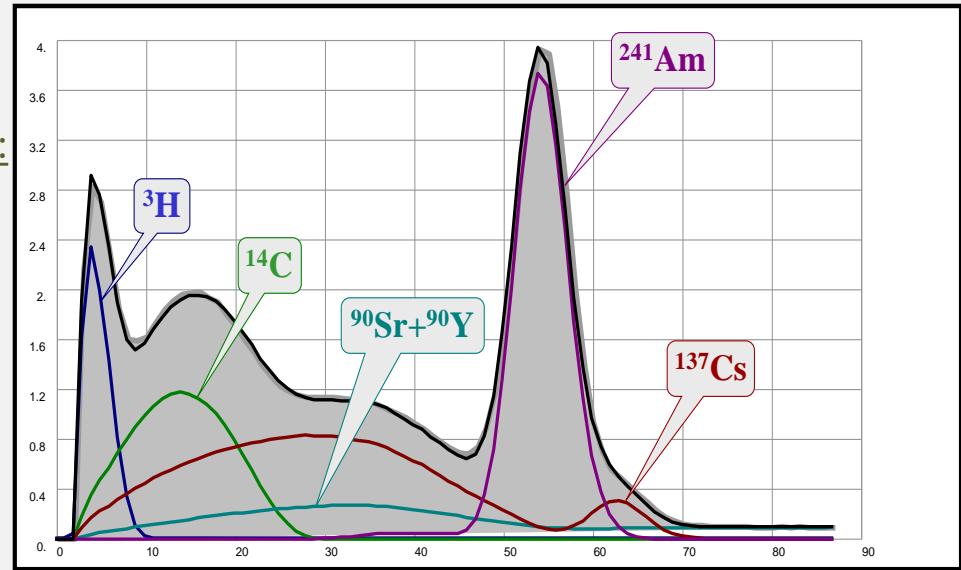
# Преобразование спектров с использованием искусственных НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

С.В. Малиновский, И.А. Каширин, В.А. Тихомиров  
*ГУП МосНПО «Радон», Москва, Россия*

# Предпосылки проблемы

## Жидкосцинтилляционная (ЖС) спектрометрия:

моделирование аппаратного спектра пробы спектрами отдельных радионуклидов из предварительно созданной библиотеки.



## Основная проблема:

несовпадение калибровок различных приборов, что требует создания для каждого из них своей собственной библиотеки, получаемой путём или прямых измерений калибровочных источников, или преобразованием библиотеки другого прибора.

## Цель:

создание объединённой базы библиотечных спектров с соответствующими калибровочными характеристиками, позволяющими пересчитывать спектры, измеренные на одних приборах, для возможности использования на других.

# Предпосылки проблемы

## Метод:

- определение для каждого прибора энергетической калибровки, разрешения и эффективности регистрации,
- построение функциональных зависимостей отношения этих характеристик разных приборов от номера канала и
- корректировка с учётом этих зависимостей библиотечных спектров.

Энергетическая калибровка определялась по характерным точкам - это граничные энергии бета-спектров и максимумы электронных пиков  $^3\text{H}$ ,  $^{63}\text{Ni}$ ,  $^{14}\text{C}$ ,  $^{137}\text{Cs}$ ,  $^{90}\text{Y}$ ,  $^{214}\text{Bi}$ ,  $^{106}\text{Rh}$ ,

- эффективность регистрации - по  $^3\text{H}$ ,  $^{63}\text{Ni}$ ,  $^{14}\text{C}$ ,
- разрешение - по  $\alpha$ -излучателям.



- это работает.



- большая трудоёмкость определения значений для характерных точек;
- сложность построения функциональных зависимостей спектрометрических характеристик от номера канала;
- невозможность построения зависимостей для приборов с сильно различающимися характеристиками;

....

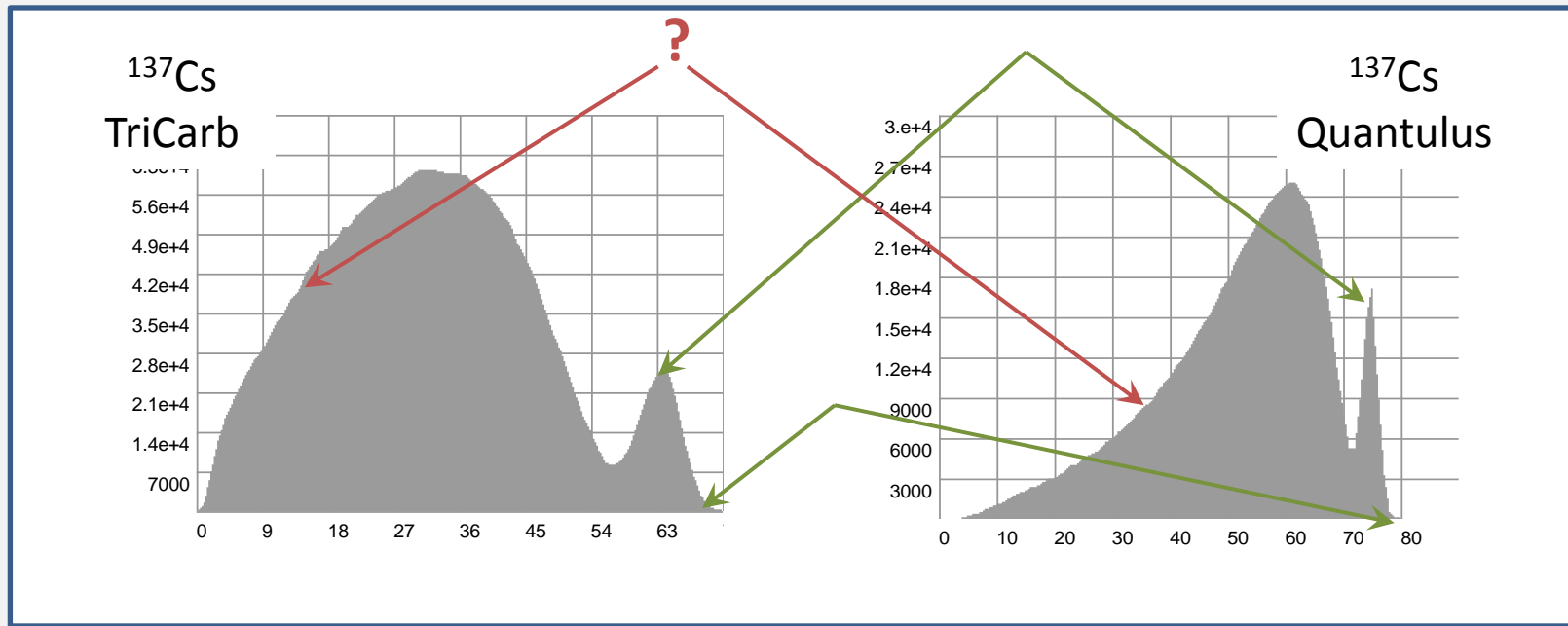
# Постановка задачи

## Задача:

- оптимизация процедуры перекалибровки спектров разных приборов.

## Требование:

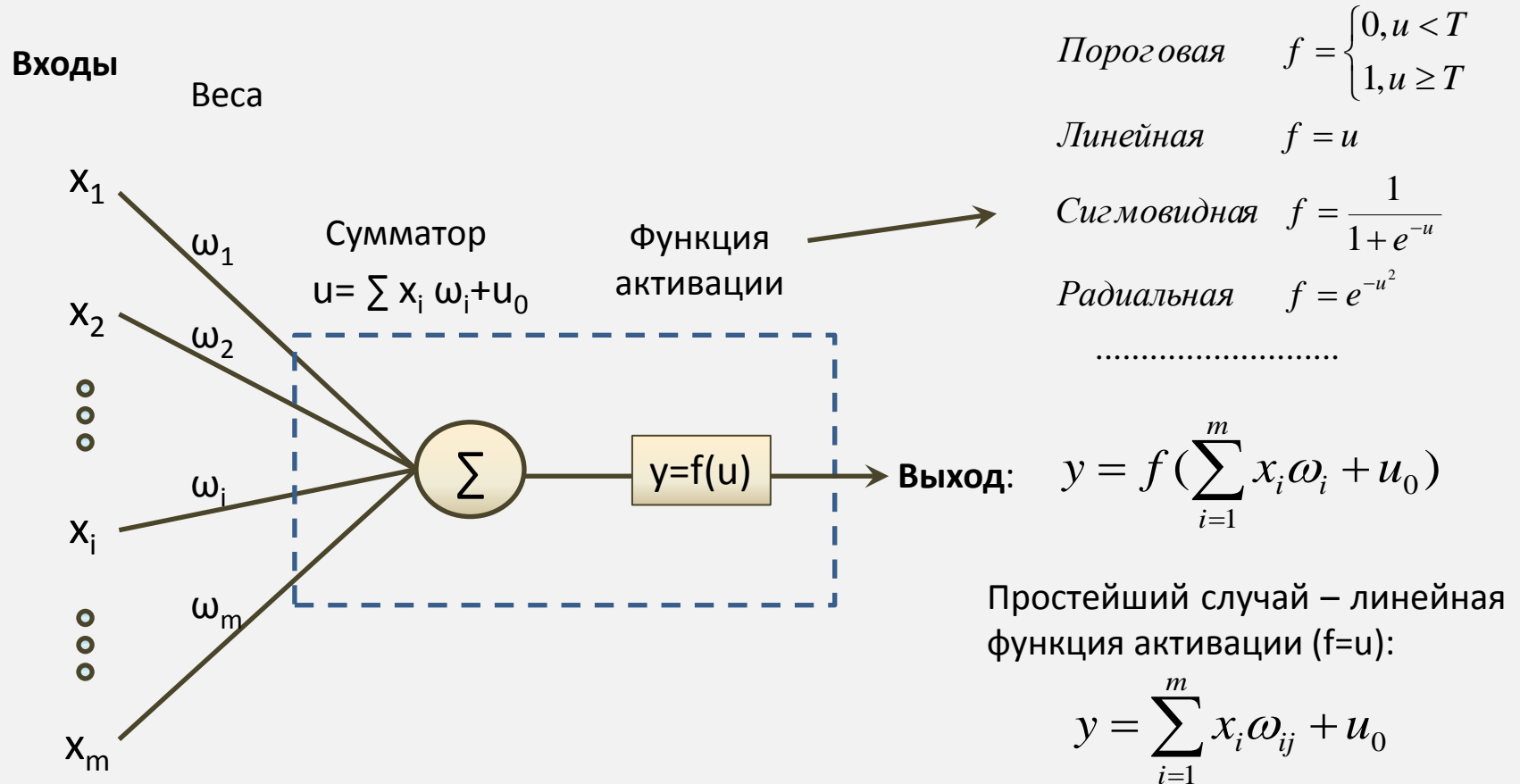
- использование всего спектра, а не только его характерных точек.



## Метод решения:

*искусственные нейронные сети.*

# Модель искусственного нейрона

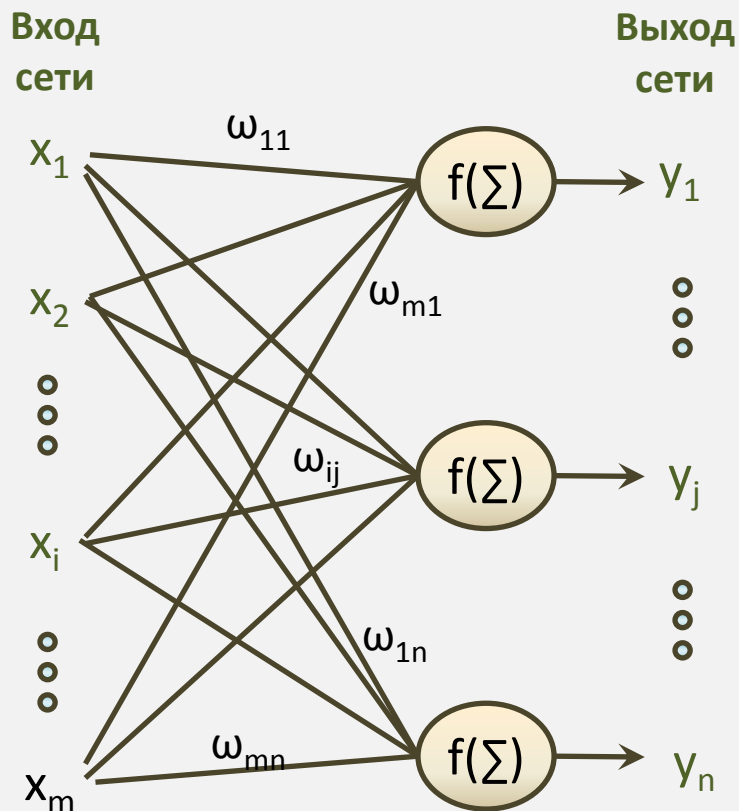


Нейрон определяется:

- значением порога  $u_0$  и
- типом функции активации.

# Однослойная нейронная сеть

(однослойный перцептрон)

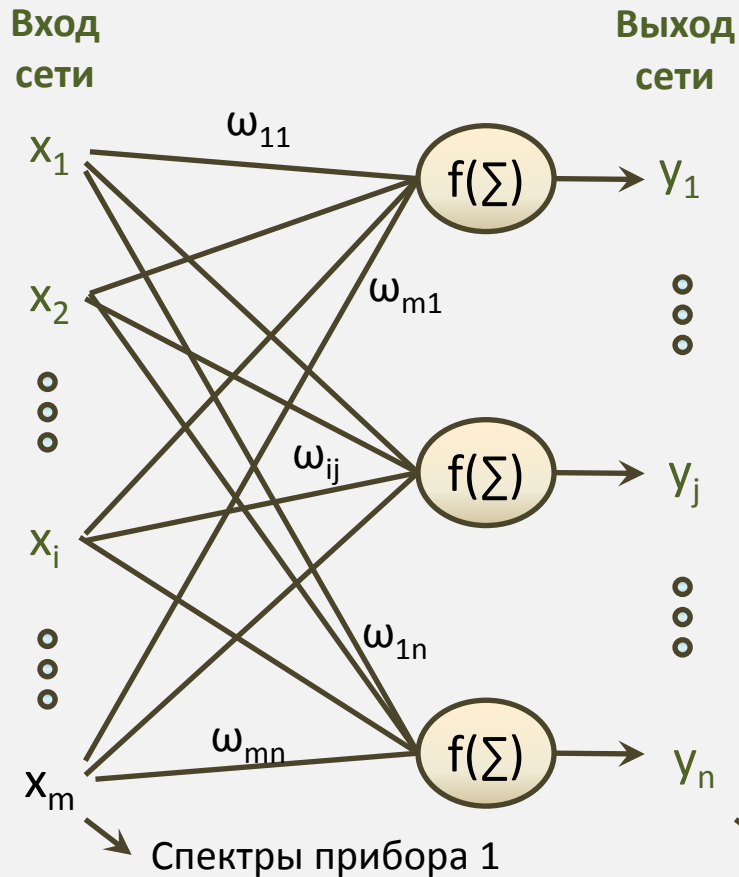


$$y_j = f\left(\sum_{i=1}^m x_i \omega_{ij} + u_{0j}\right), j = 0..n$$

Однослойная нейронная сеть определяется:

- параметрами нейронов,
- числом входов,
- числом нейронов (выходов),
- весами  $\omega_{ij}$ .

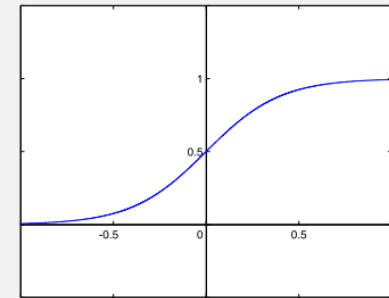
# Постановка задачи



Архитектура сети - однослойный перцептрон.

Функция активации нейрона - сигмовидная:

$$f = \frac{1}{1 + e^{-u}}$$



Число входов  $m$  – количество каналов прибора 1,  
Число нейронов  $n$  – количество каналов прибора 2.

## Задача НС:

При подаче на вход сети спектры, измеренные на приборе 1 получить на выходе соответствующие им спектры для прибора 2.

# Свойства нейронной сети

- 1. Способность к обучению** - НС не программируются, они обучаются. Для этого сети предлагаются обучающие примеры, на основе которых проводится подбор весов  $\omega_{ij}$  и порогов  $u_{0j}$ .
- 2. Способность к обобщению:**
  - в случае успешного обучения сеть сможет выдавать верные результаты на основании данных, которые отсутствовали в обучающей выборке,
  - при этом входные данные могут быть неполны, излишни и (или) частично искажены.
- 3. Способность моделировать очень сложные закономерности и**
- 4. Отсутствие необходимости знать вид аппроксимируемых функций.**
- 5. Меньшее влияние «проклятия размерности»** - для обучения сети не обязательно иметь большую обучающую выборку.
$$y_j = f\left(\sum_{i=1}^m x_i \omega_{ij} + u_{0j}\right), j = 0..n$$
- 6. Большое значение имеет качество обучающей выборки** – она должна быть способна обучить сеть тому, что от неё требуют.



# Обучение нейронной сети

**Метод обучения** - Обучение с учителем.

## Задача обучения ИНС:

Предлагая сети обучающие пары спектров, научить сеть генерировать спектры для прибора 2, измеренные на приборе 1 путём подбора весов  $\omega_{ij}$  и порогов  $u_{oj}$ .

Каждая пара – это спектры одинакового радионуклидного состава при одинаковых тушениях, измеренные на обоих приборах.


## **Алгоритм обучения** - Обратное распространение ошибки:

1. Инициализация весов  $\omega_{ij}$  маленькими случайными значениями.

2. Выбор очередной обучающей пары  $\{x, s\}$  из обучающей выборки и подача спектра прибора 1 на вход сети.

3. Вычисление выходов  $\{y\}$  сети.

4. Вычисление ошибки - разности между выходом сети и требуемым выходом:

5.  Корректировка весов сети для минимизации ошибки:  
( $0 < \eta < 1$  – скорость обучения)

6. Повторение шагов с 2 по 5 для каждой пары обучающей выборки до тех пор, пока ошибка не достигнет приемлемого уровня.

$x_p, i=1, m$  – измеренный спектр прибора 1  
 $y_p, j=1, n$  – спектр на выходе сети  
 $s_p, j=1, n$  – измеренный спектр прибора 2

$$E(\{\omega_{ij}\}) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n (s_j - y_j)^2$$

$$\Delta \omega_{ij} = -\eta \frac{\partial E}{\partial \omega_{ij}} = \eta x_i y_j (1 - y_j) (s_j - y_j)$$

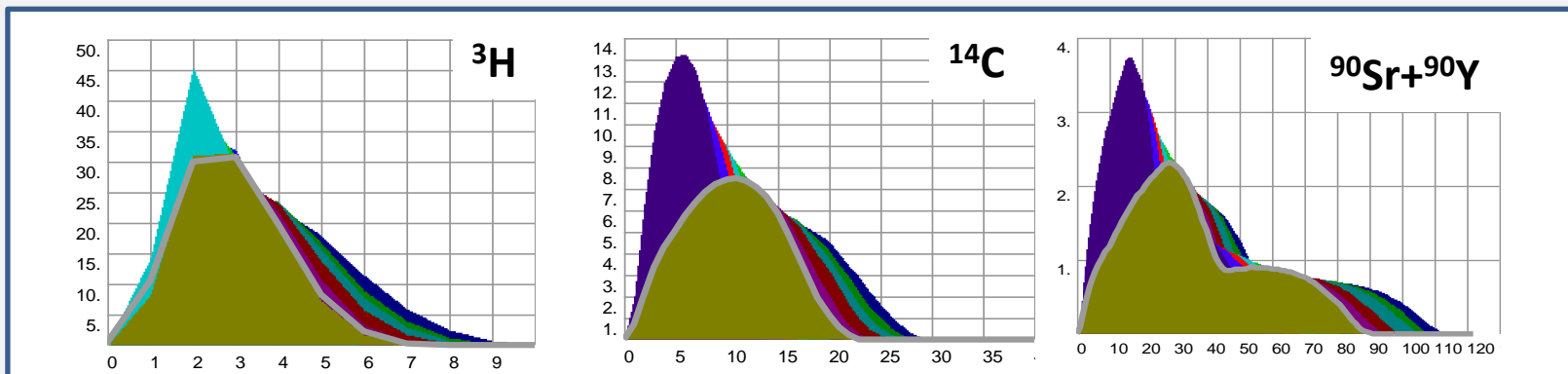
# Реализация

Приборы:

1. TriCarb-2550 (USA) ,

2. GreenStar СКС-07П-Б11 (Россия).

Радионуклиды обучающей выборки -  $^3\text{H}$ ,  $^{14}\text{C}$ ,  $^{90}\text{Sr}+^{90}\text{Y}$  :

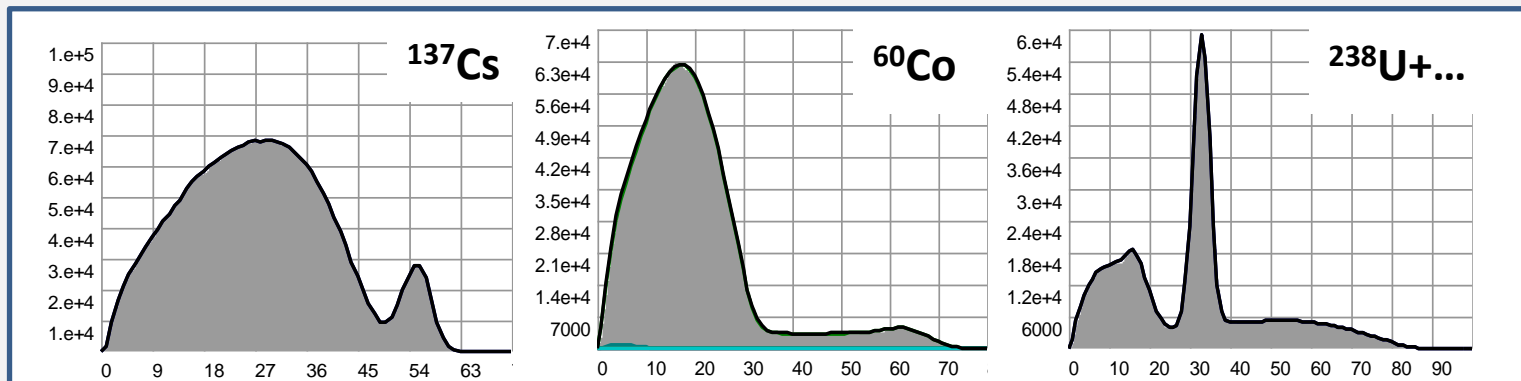


Число пар спектров – 33 (по 11 спектров с разными тушениями на каждый радионуклид).

Каждый спектр нормирован и умножен на эффективность регистрации.

Число каналов (групп) – 110 => число весов – 12100.

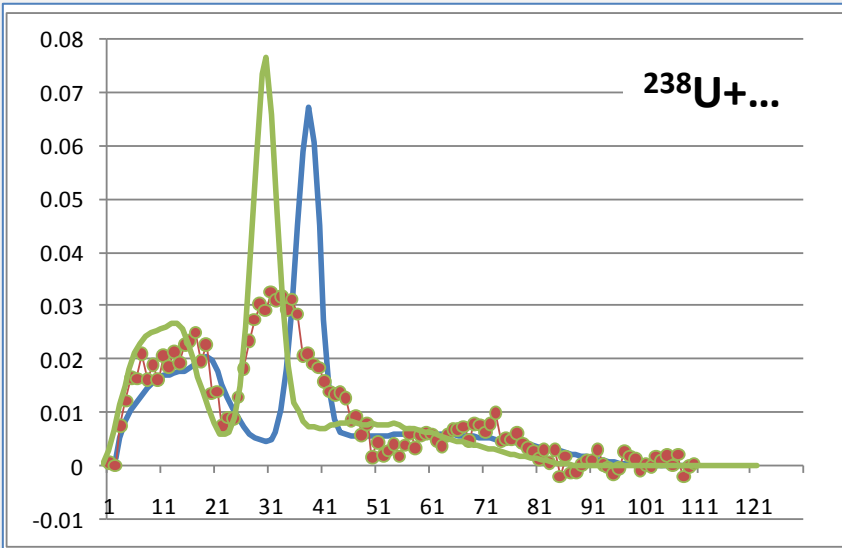
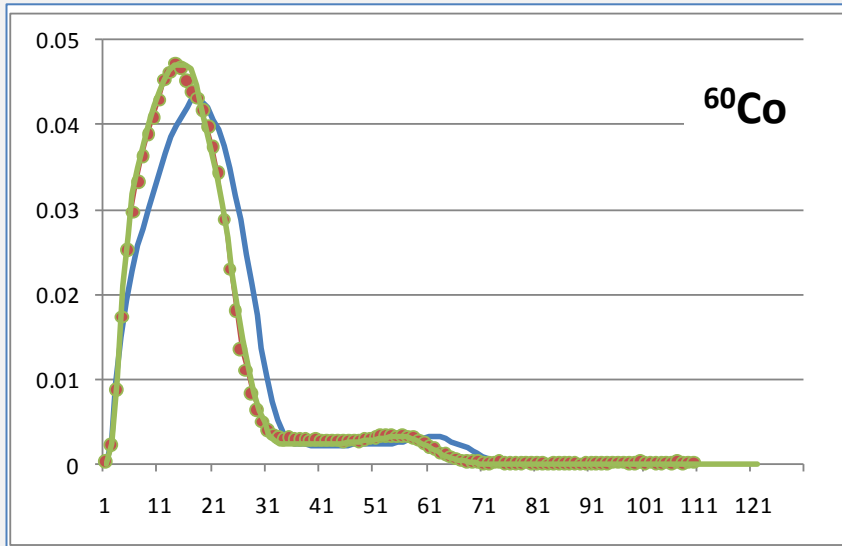
Контрольные радионуклиды:  $^{137}\text{Cs}$ ,  $^{60}\text{Co}$ ,  $^{238}\text{U}+^{234}\text{Th}+^{234\text{m}}\text{Pa}$ :



# Настройка сети

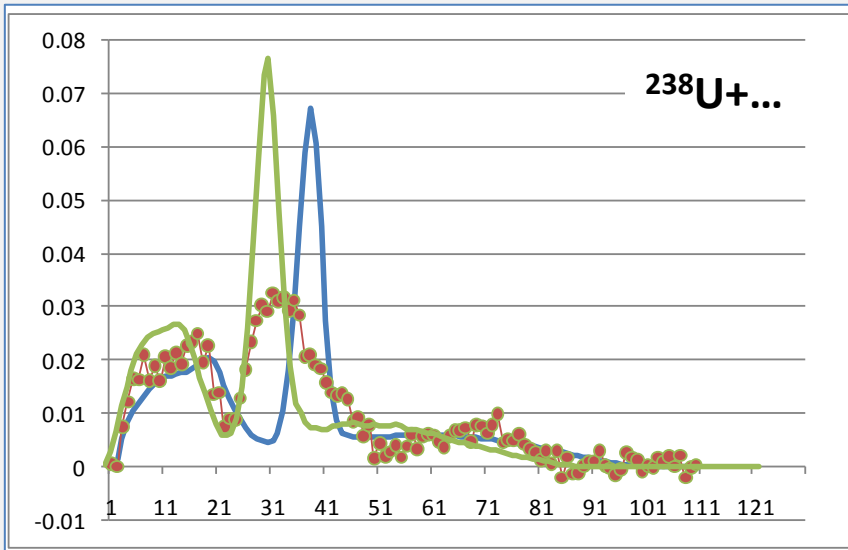
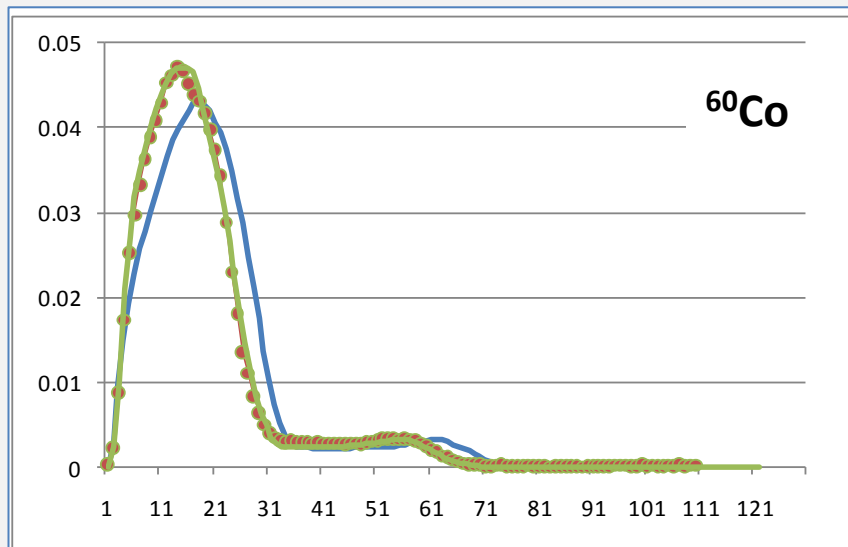
Два пути улучшения качества обобщения:

- увеличение числа обучающих примеров,
- уменьшение размерности задачи - количества весов.

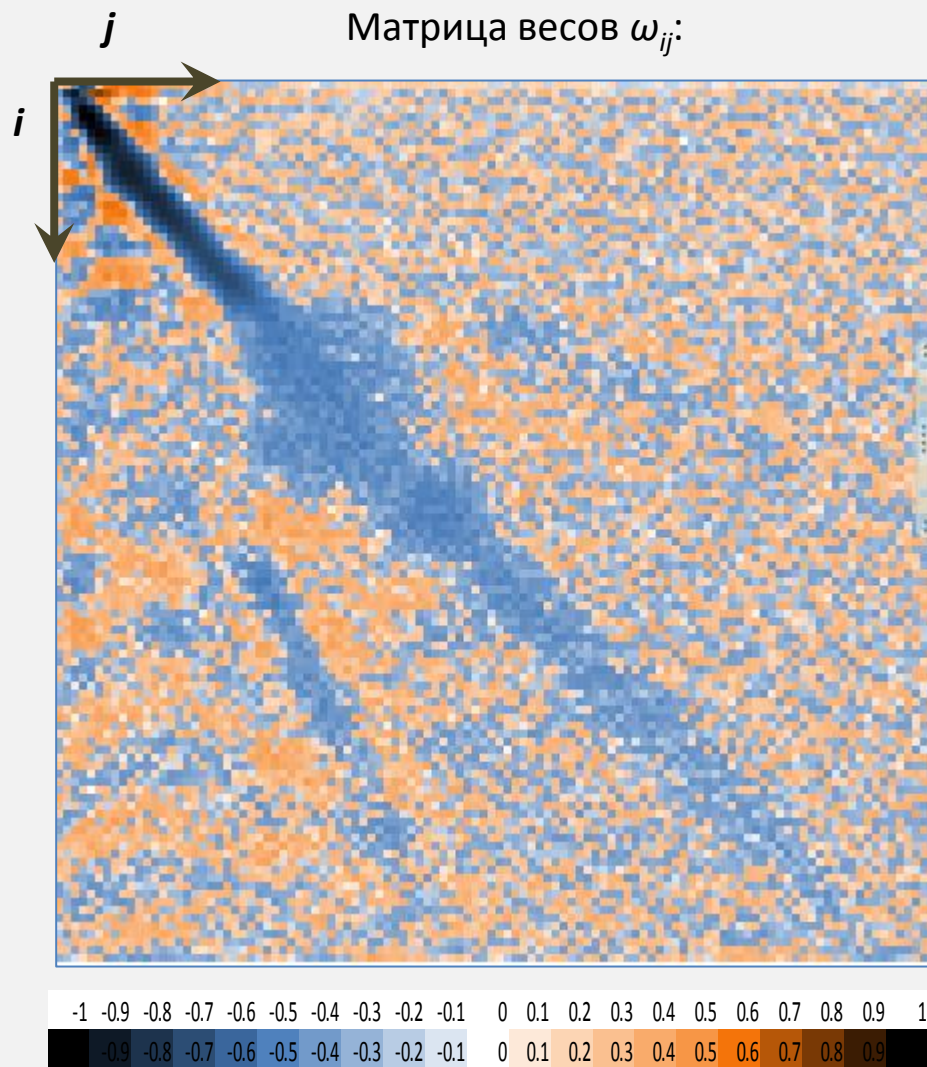


- - измеренный спектр TriCarb
- - измеренный спектр SKS
- - спектр на выходе сети

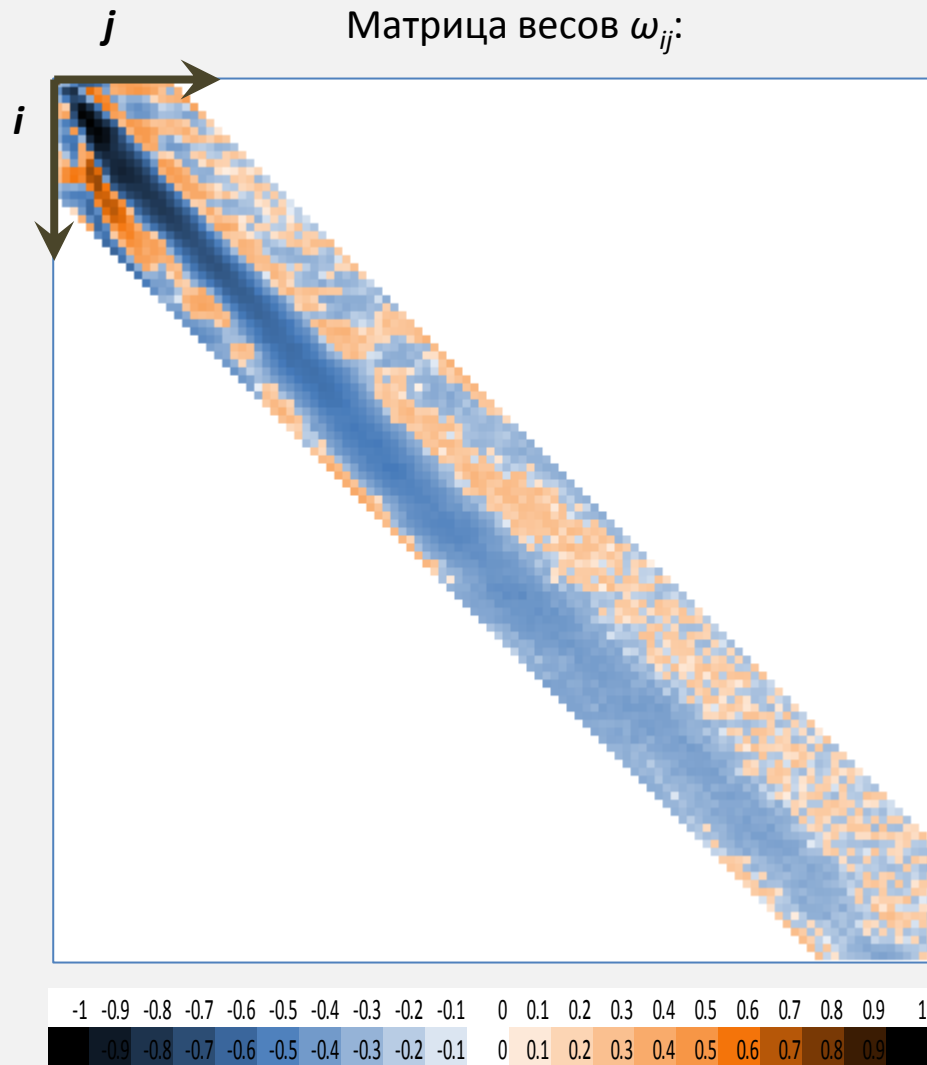
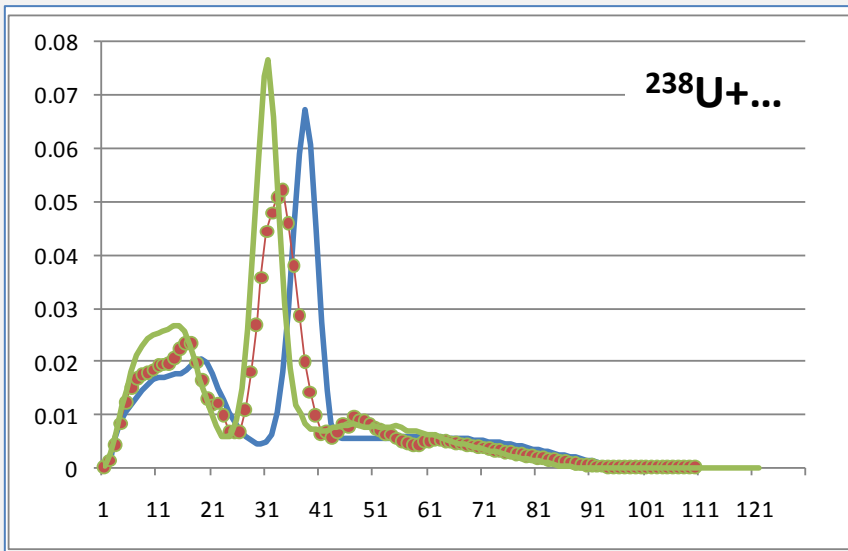
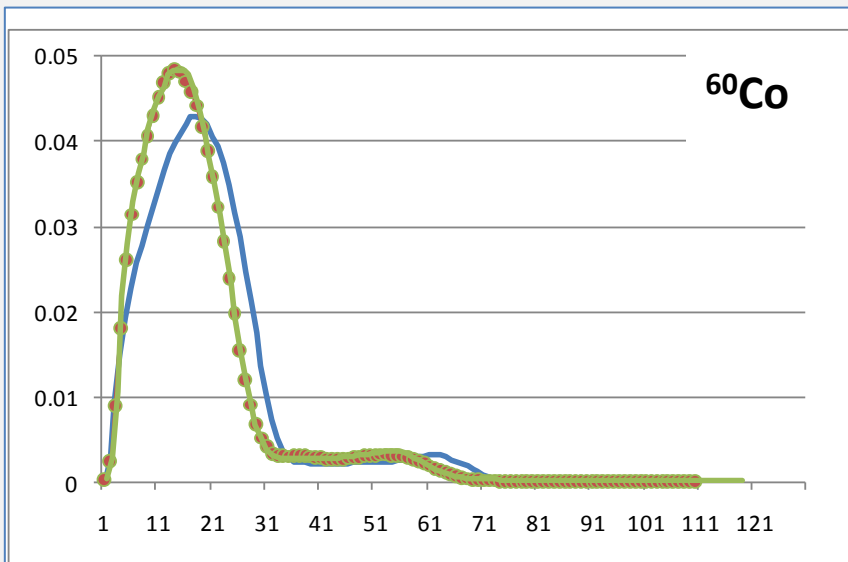
# Настройка сети



- - измеренный спектр TriCarb
- - измеренный спектр SKS
- - спектр на выходе сети

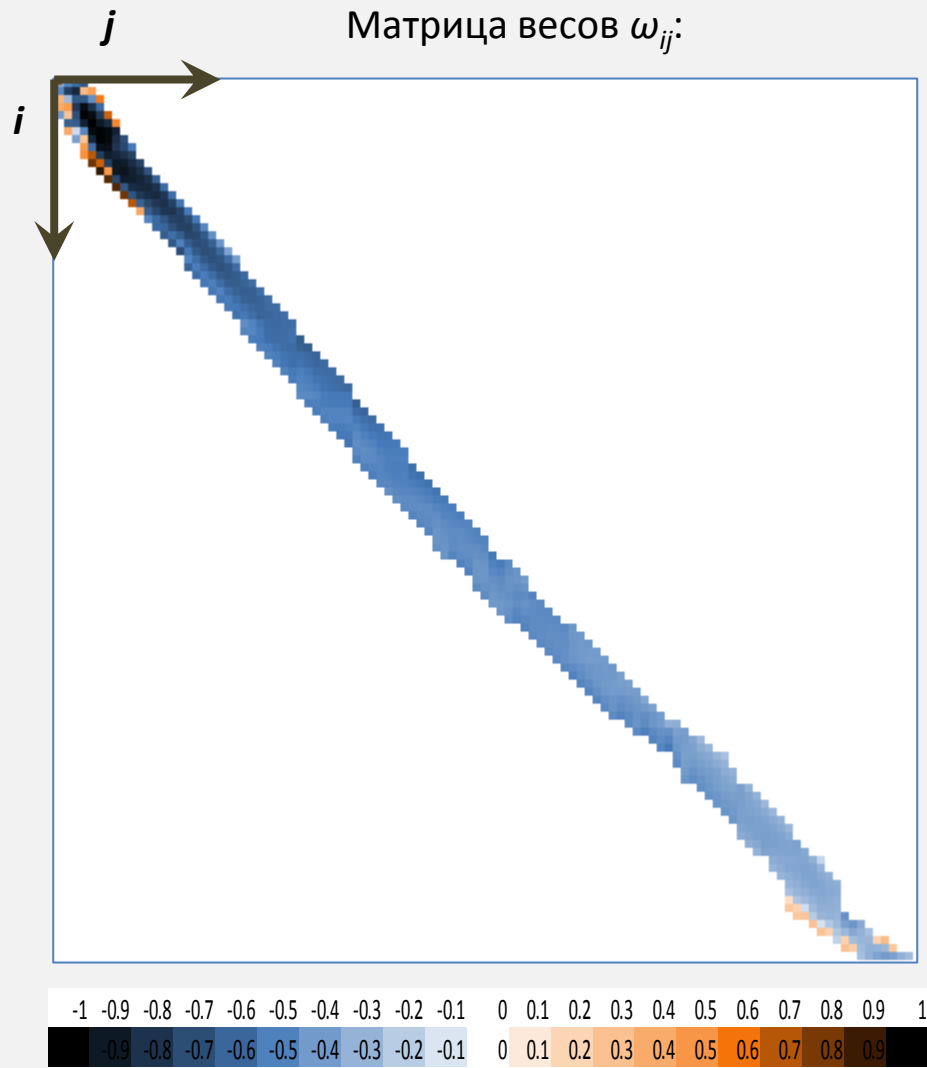
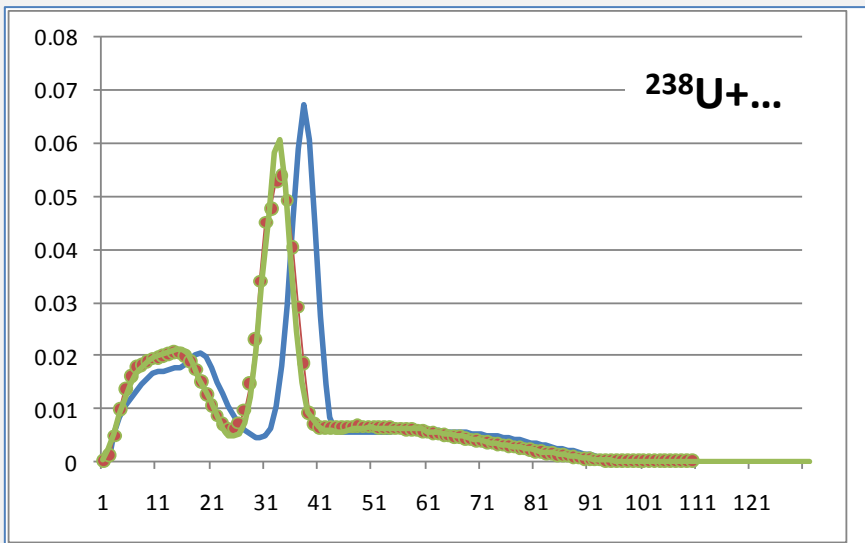
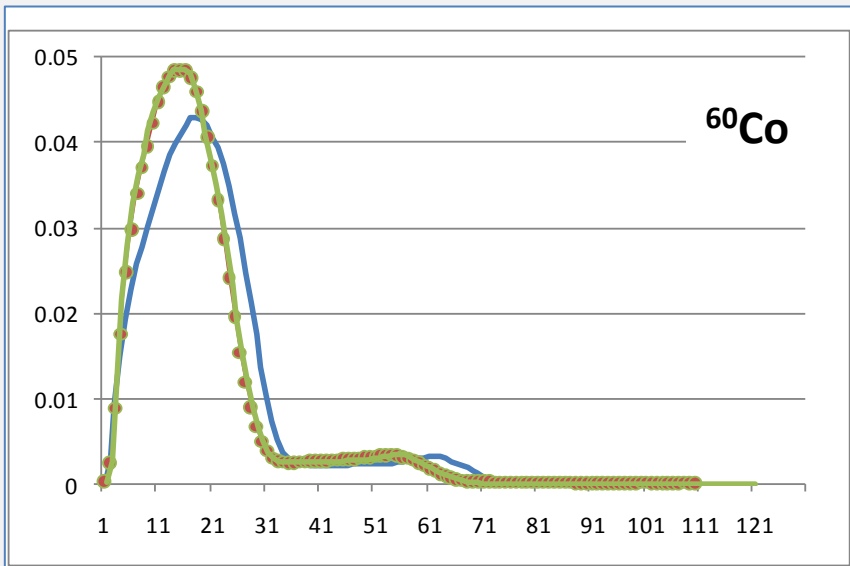


# Настройка сети



- - измеренный спектр TriCarb
- - измеренный спектр SKS
- - спектр на выходе сети

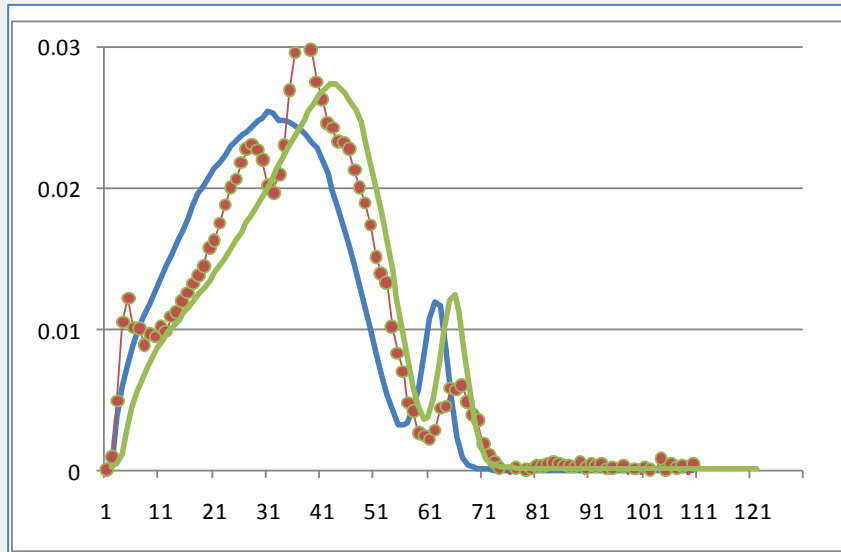
# Настройка сети



- - измеренный спектр TriCarb
- - измеренный спектр SKS
- - спектр на выходе сети

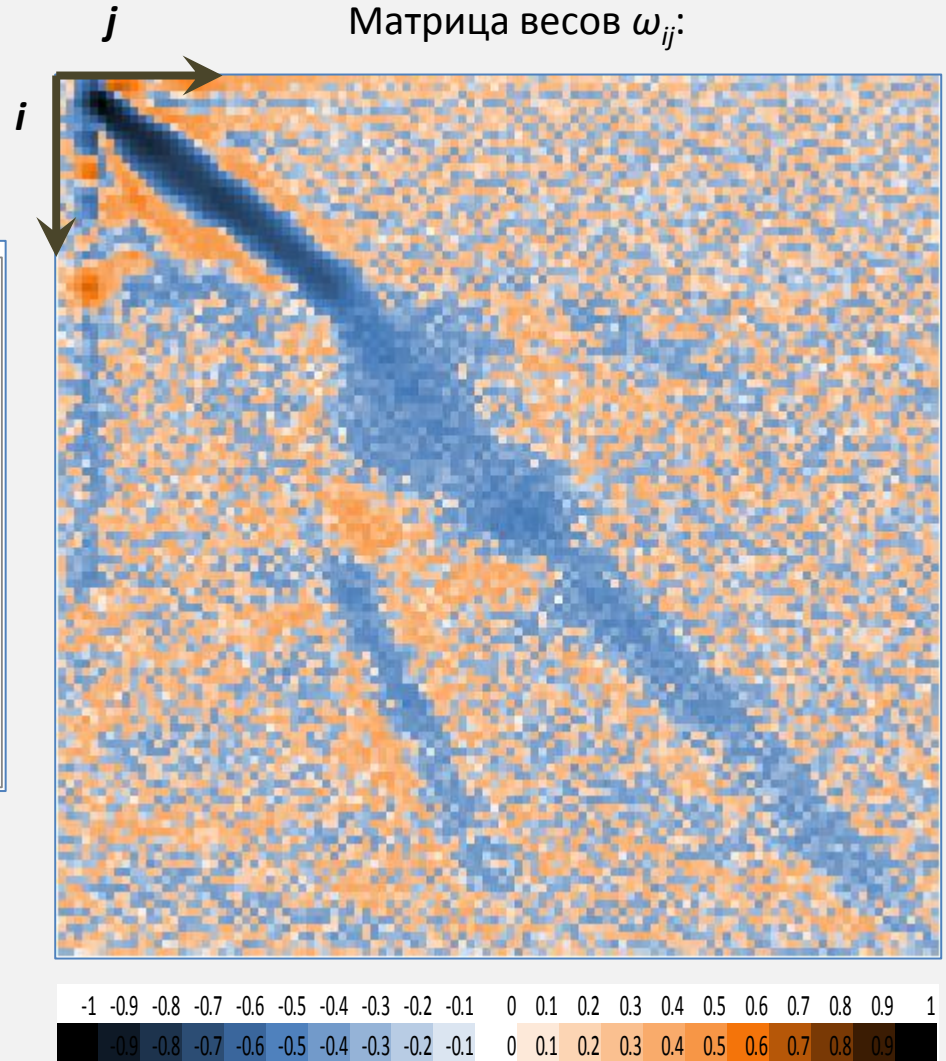
# Настройка сети

$^{137}\text{Cs}$



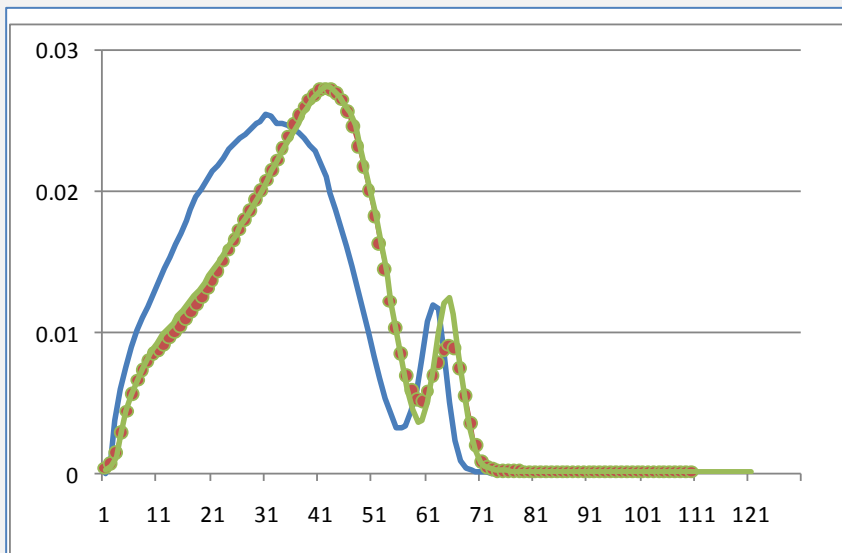
- спектр TriCarb
- спектр SKC
- спектр на выходе сети

Матрица весов  $\omega_{ij}$ :



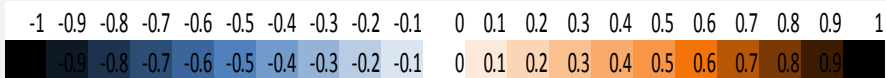
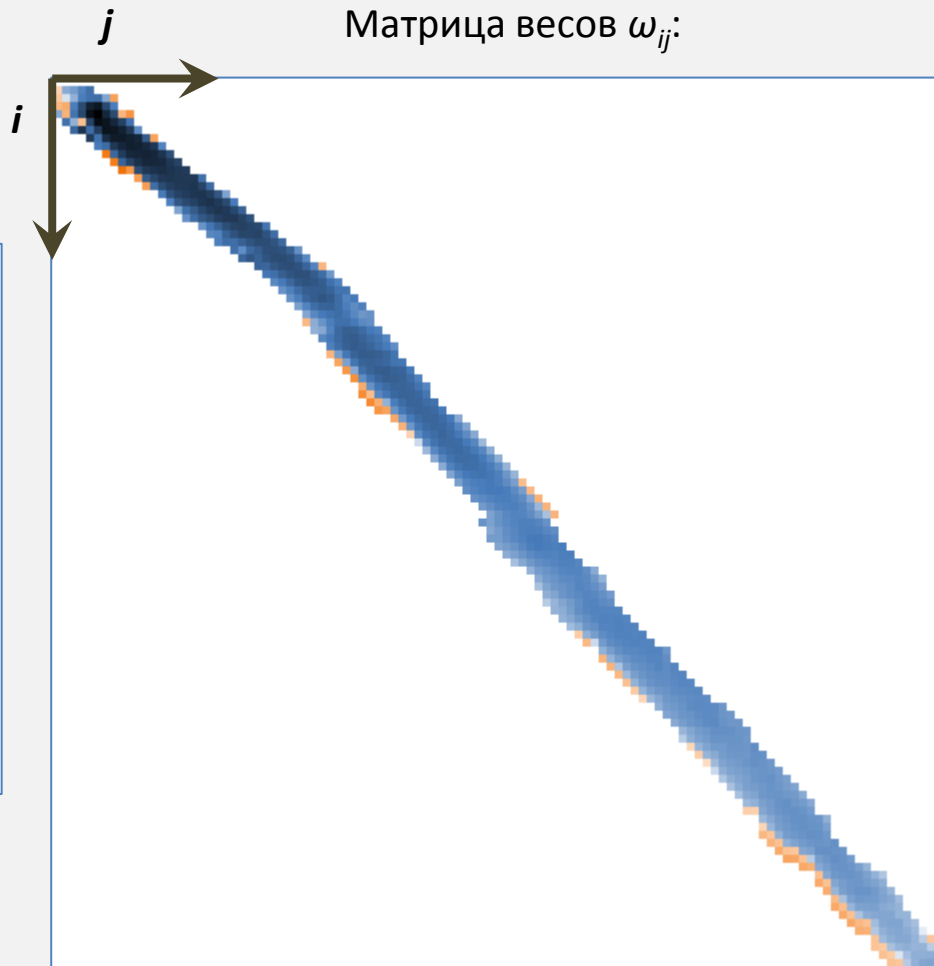
# Настройка сети

$^{137}\text{Cs}$



- спектр TriCarb
- спектр СКС
- спектр на выходе сети

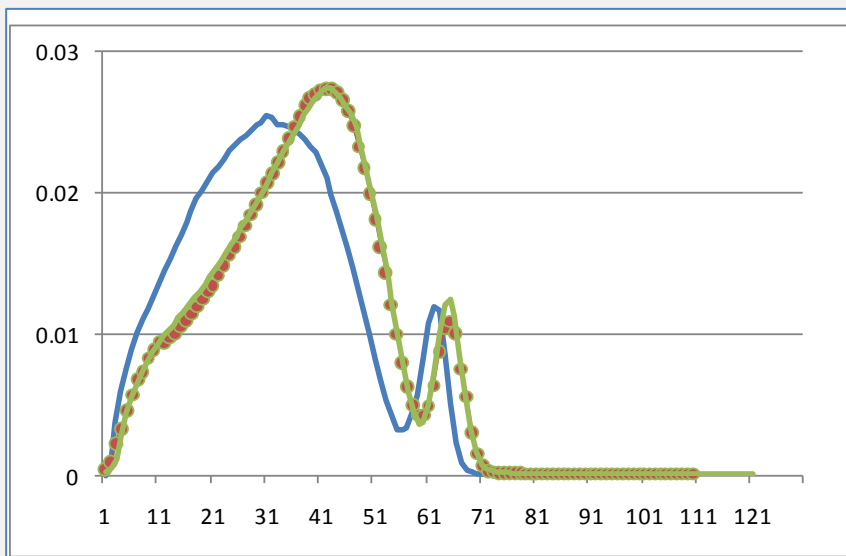
Матрица весов  $\omega_{ij}$ :





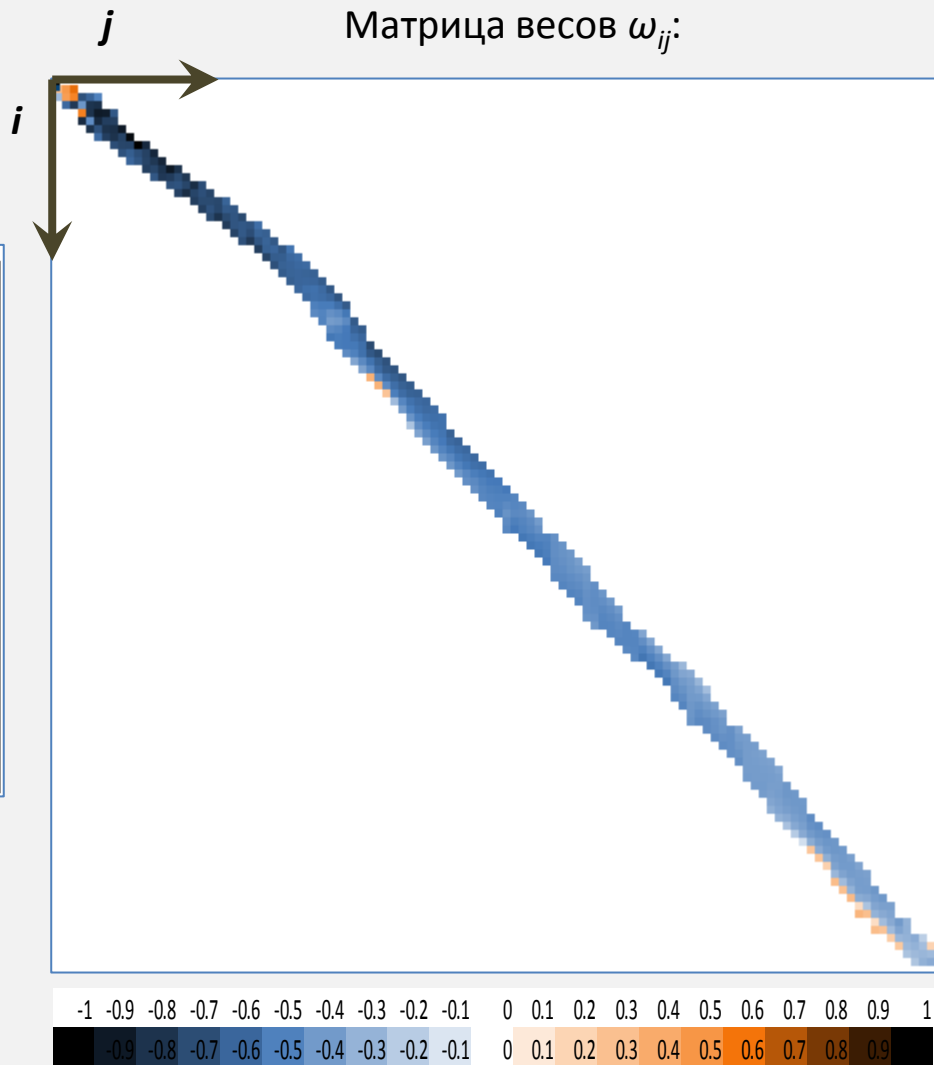
# Настройка сети

$^{137}\text{Cs}$



- спектр TriCarb
- спектр СКС
- спектр на выходе сети

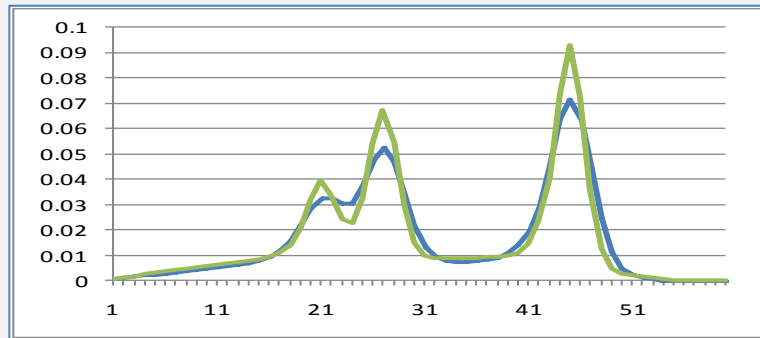
Матрица весов  $\omega_{ij}$ :



# Улучшение разрешения аппаратных спектров.

## Метод:

- определение разрешения исходного прибора,
- определение требуемого разрешения,
- создание «обучающей» выборки, состоящей из трёх типов пар спектров:
  - ✓ одиночные пики с исходным и требуемым разрешением,
  - ✓ одинаковые протяжённые спектры, имитирующие бета-составляющую, не зависящую от разрешения прибора,
  - ✓ сложные спектры – несколько пиков на имитации бета-подложки,



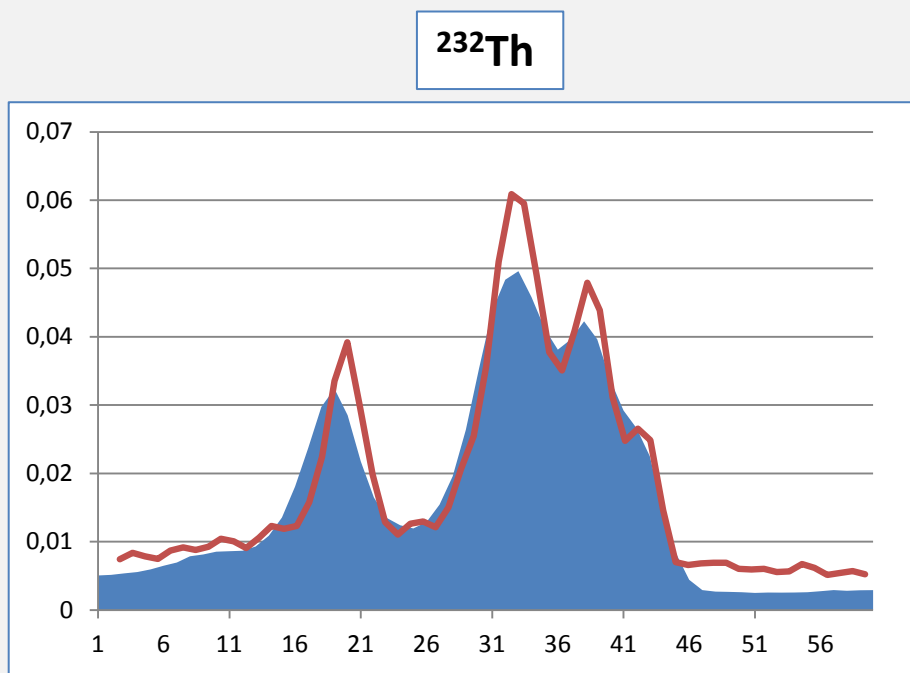
— - исходный спектр  
— - требуемый спектр

- обучение на этой выборке нейронной сети.

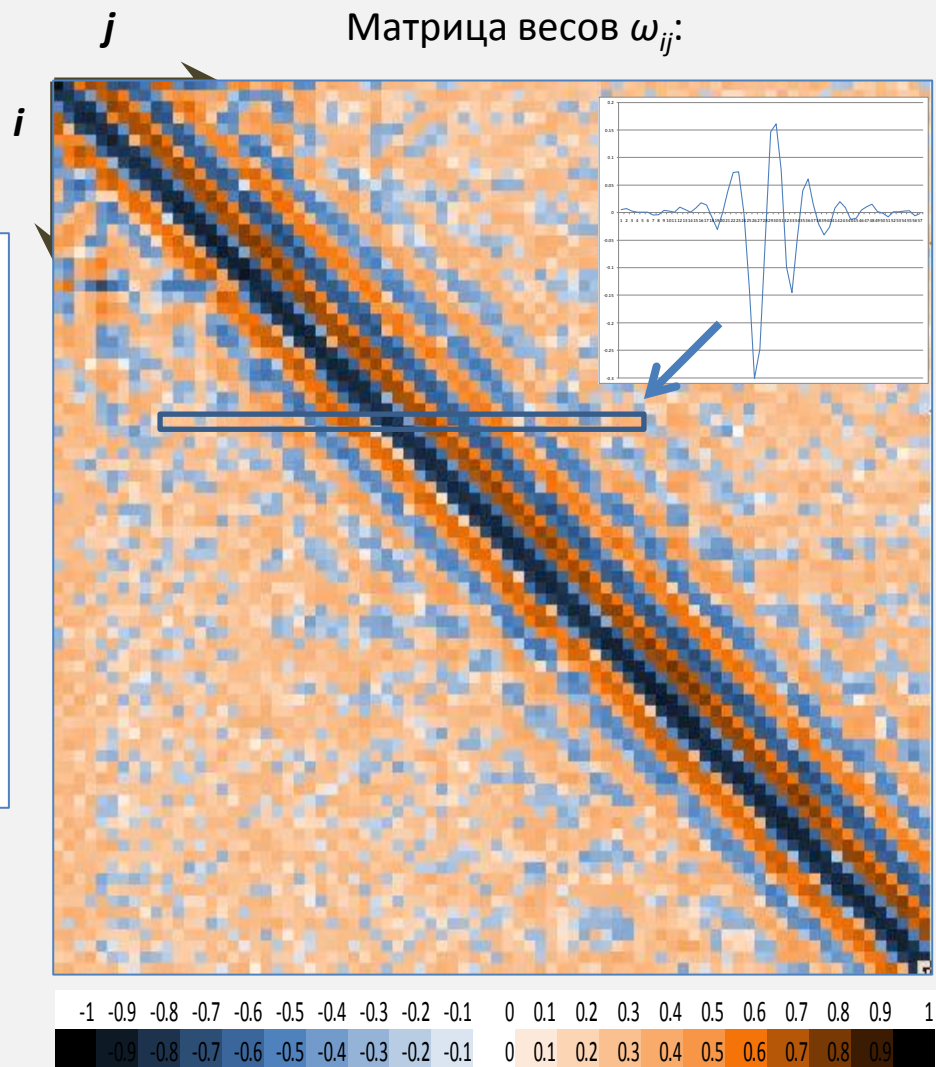
## Замечание:

- так как в данном случае мы искусственно генерируем обучающую выборку, то нет необходимости ограничивать её размер – требуемая степень обобщения может быть достигнута увеличением количества различающихся обучающих пар.

# Улучшение разрешения аппаратных спектров.



- спектр TriCarb-2550
- спектр на выходе сети, «улучшенный» на 30%



# Выводы

## Требования к обучающей выборке:

- «обучающие» спектры должны охватывать, по-возможности, весь диапазон каналов,
- «гладкость» спектров «обучающих» радионуклидов. Лучше использовать малое количество простых спектров, чем большое сложных (требование процедуры поиска минимума на поверхности ошибок).

- + - это тоже работает,
- автоматический расчёт эффективности регистрации,
- не нужно искать функциональных зависимостей,
- щадящие требования к обучающей выборке,
- малое количество калибровочных измерений,
- автоматическая фильтрация «плохих» данных,
- ...
- 
- не замечено

**Найден простой и эффективный метод преобразования библиотек ЖС-спектрометров, который позволит значительно упростить создание и пополнение объединённой базы библиотечных спектров.**

Перспектива:

Разработка методов преобразования спектров испускания из библиотек ядерных данных в аппаратные спектры, что позволит вводить в аналитические базы ЖС-спектрометров радионуклиды, спектры которых невозможно измерить.

# СПАСИБО ЗА

Библиотека алгоритмов ALGLIB ([www.alglib.net](http://www.alglib.net)).

Авторы: Сергей Бочканов и Владимир Быстрицкий, Нижний Новгород.

# ВНИМАНИЕ

ALGLIB - кросс-платформенная библиотека численного анализа, поддерживающая несколько языков программирования: C++, C#, Pascal, VB, и несколько операционных систем (Windows, Linux, Solaris).

Открытый исходный код на всех поддерживаемых языках.

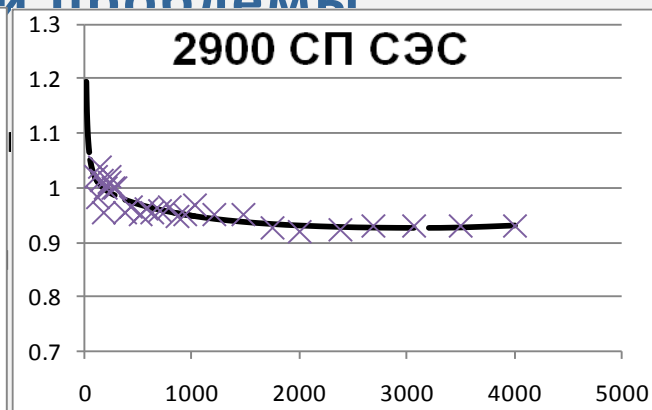
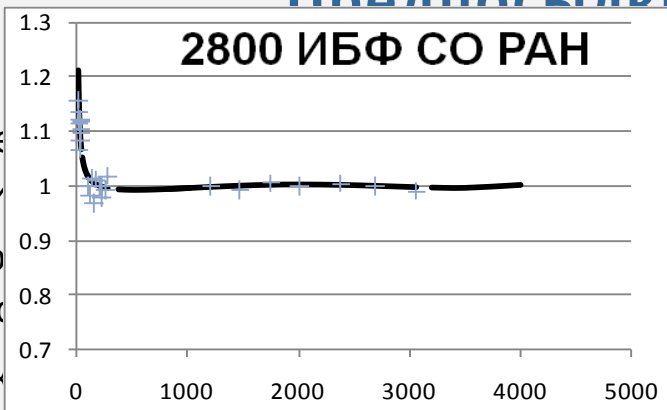
Двойная лицензия, допускающая некоммерческое (GPL) и коммерческое использование.

Включает функции для работы с нейронными сетями.

# Предпосылки проблемы

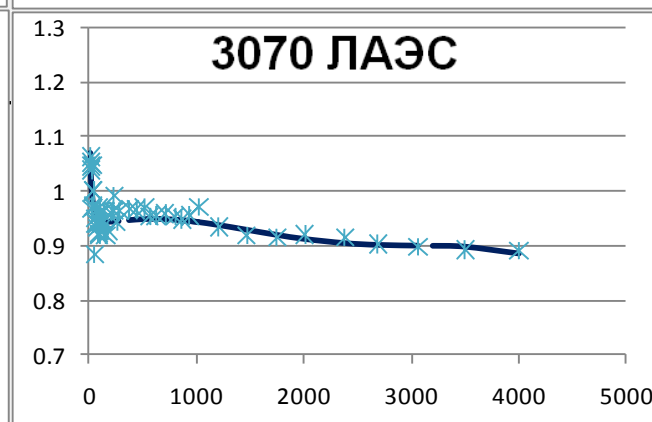
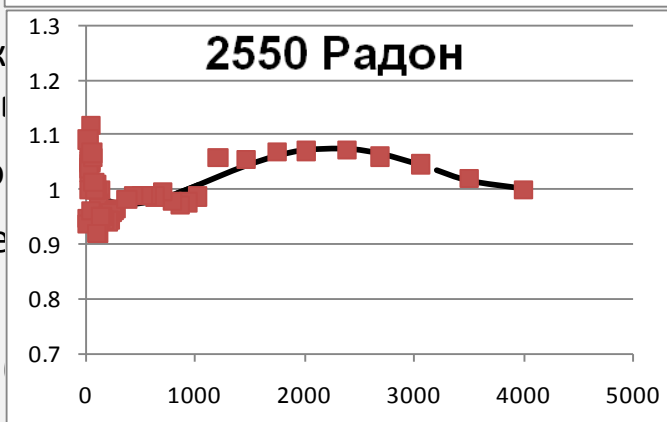
## Метод:

- определе
- эффекти
- постро
- приборс
- коррек



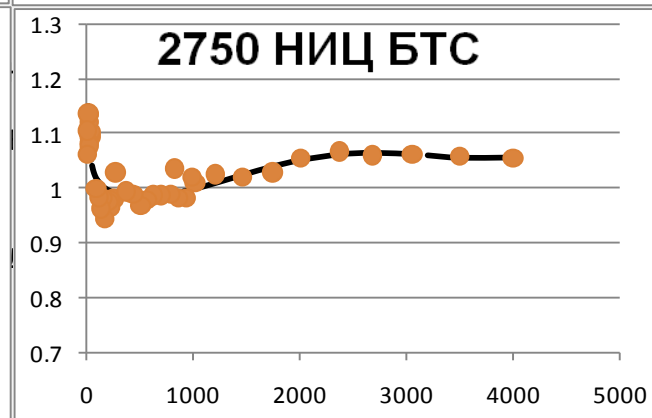
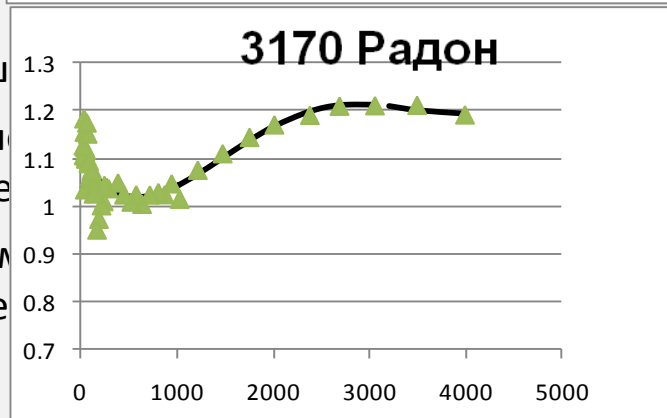
ЫХ

- Энергетическ
- бета-спектро
- эффективно
- разрешение



ргии

**+** - это ра



актеристик

- - больш
- сложн
- от номе
- невозм
- характе

мися

....