



Использование вейвлет-нейронных сетей для решения обратных задач спектроскопии многокомпонентных растворов

С.А.Доленко*, А.О.Ефиторов,
Т.А.Доленко, К.А.Лаптинский, С.А.Буриков

НИИ ядерной физики имени Д.В.Скобельцына
МГУ имени М.В.Ломоносова

Обратная задача спектроскопии

Задача:

Определить концентрации 5 растворенных в воде неорганических солей;

Метод измерений:

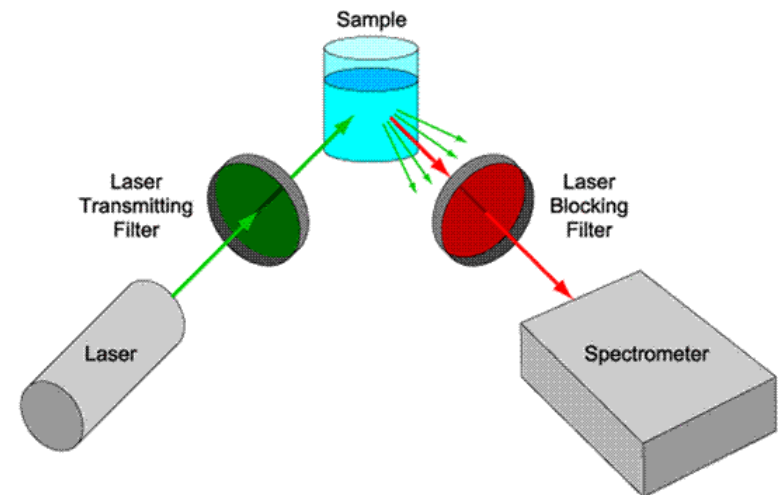
Спектроскопия комбинационного рассеяния;

Массив данных:

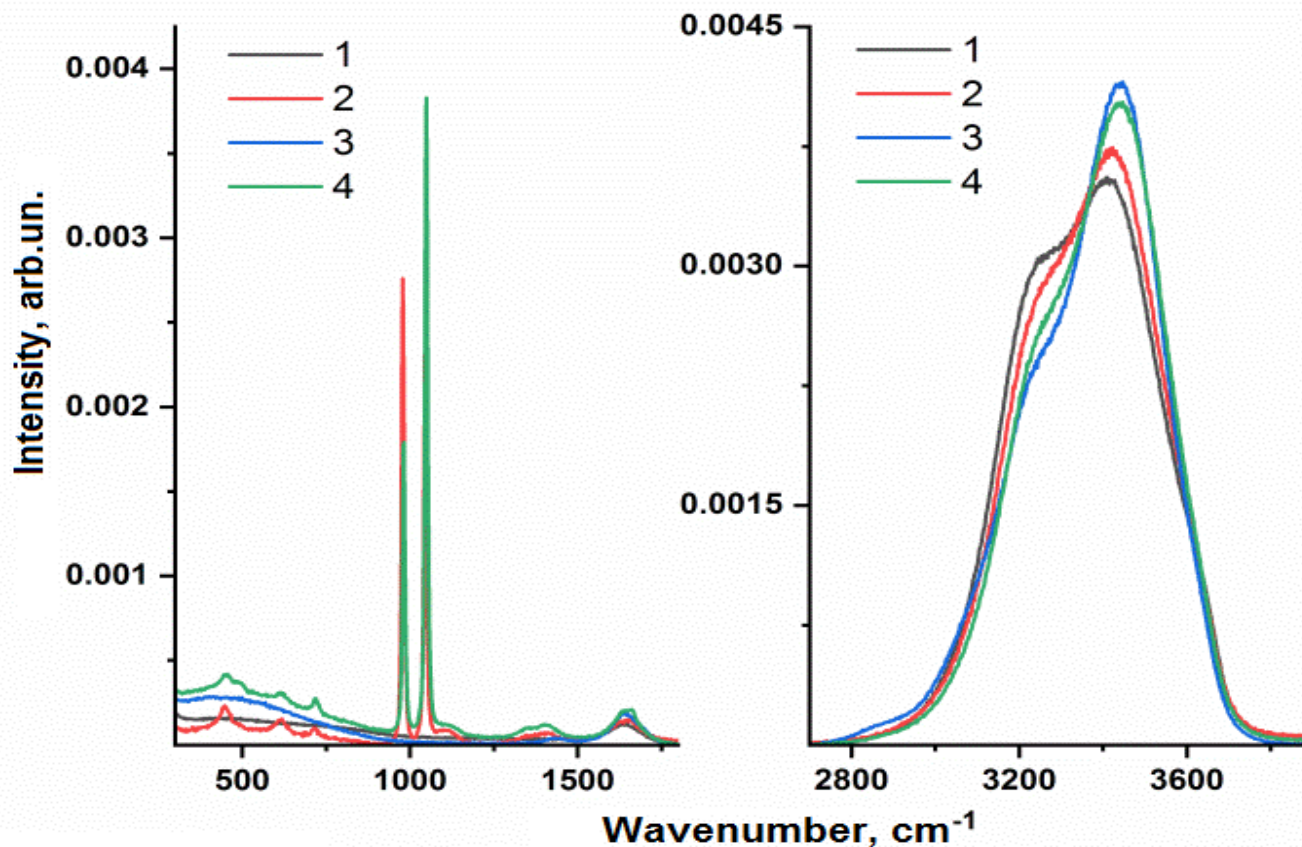
- 9144 спектра реальных измерений;
- В водных растворах присутствуют от 1 до 5 солей одновременно + дистиллированная вода;
- Диапазон измерения концентраций: 0 - 4.5 Моль/Л, шаг сетки: 0.2 Моль/Л;
- Входные признаки: интенсивности каналов спектров, 1535 каналов;
- Тренировочный, валидационный, тестовый наборы в соотношении 70:20:10;

Предобработка:

- Удаление горизонтального пьедестала;
- Нормировка на площадь валентной полосы воды;
- Шкалирование каналов по тренировочному массиву в интервал 0 – 1.



КР-спектры неорганических солей



Сравнение спектров комбинационного рассеяния для низкочастотной области (слева) и валентной полосы воды (справа) для разных солей

1 – дистиллированная вода;

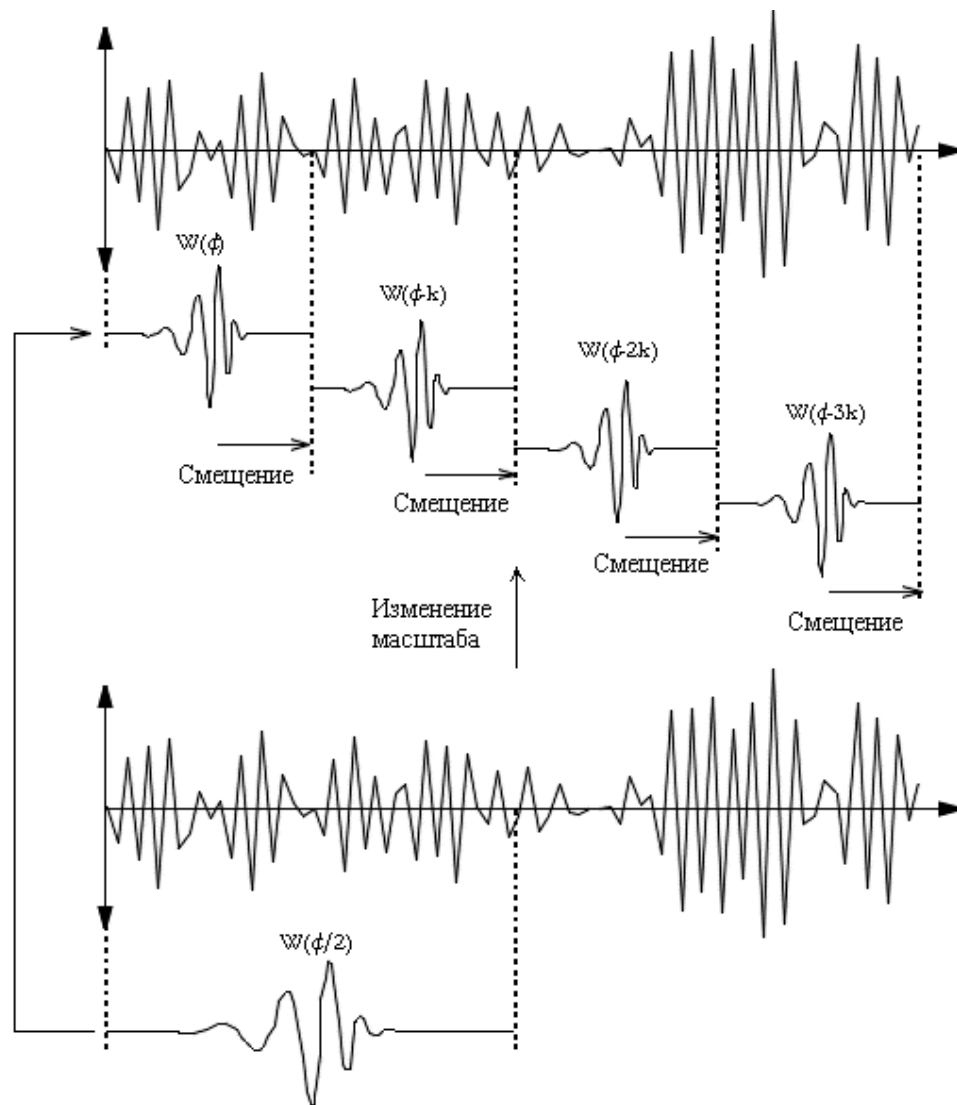
2 – KNO_3 – 0.6M, Li_2SO_4 – 0.75M;

3 – NaCl -0.5M, NH_4Br – 1.75M, CsI – 0.25M;

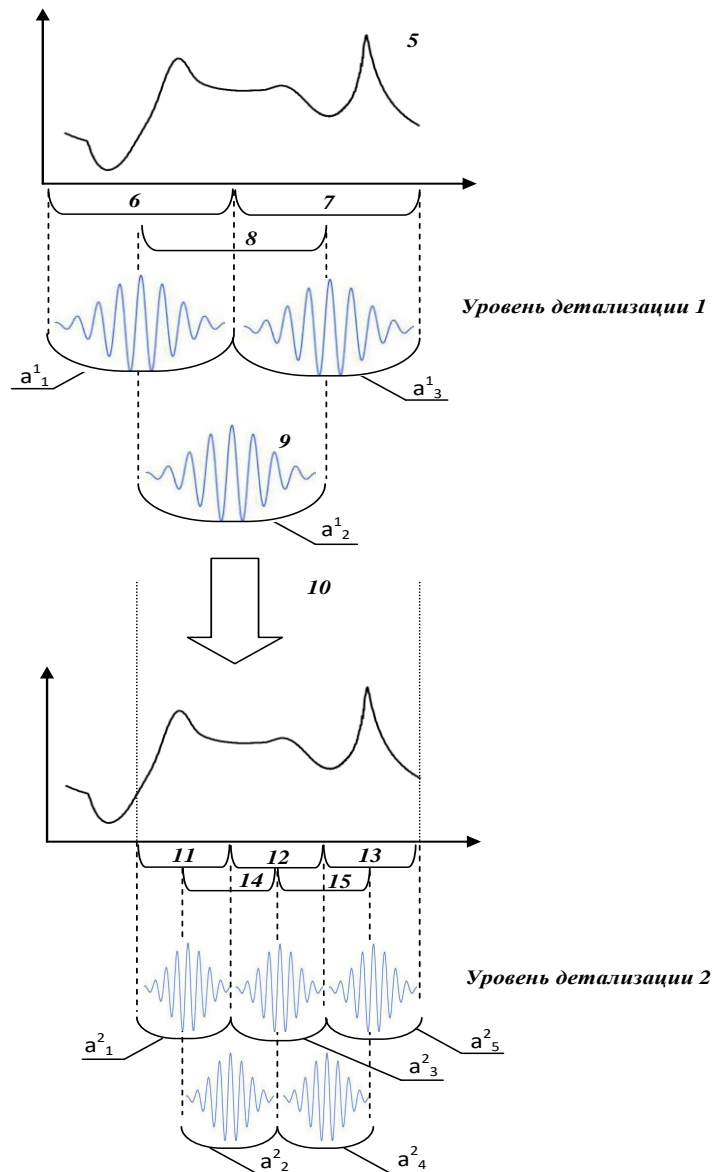
4 – NaCl – 0.2M, NH_4Br – 0.2M, Li_2SO_4 – 0.4M, KNO_3 – 1M, CsI – 0.6M.

Вейвлет-преобразование

Дискретное

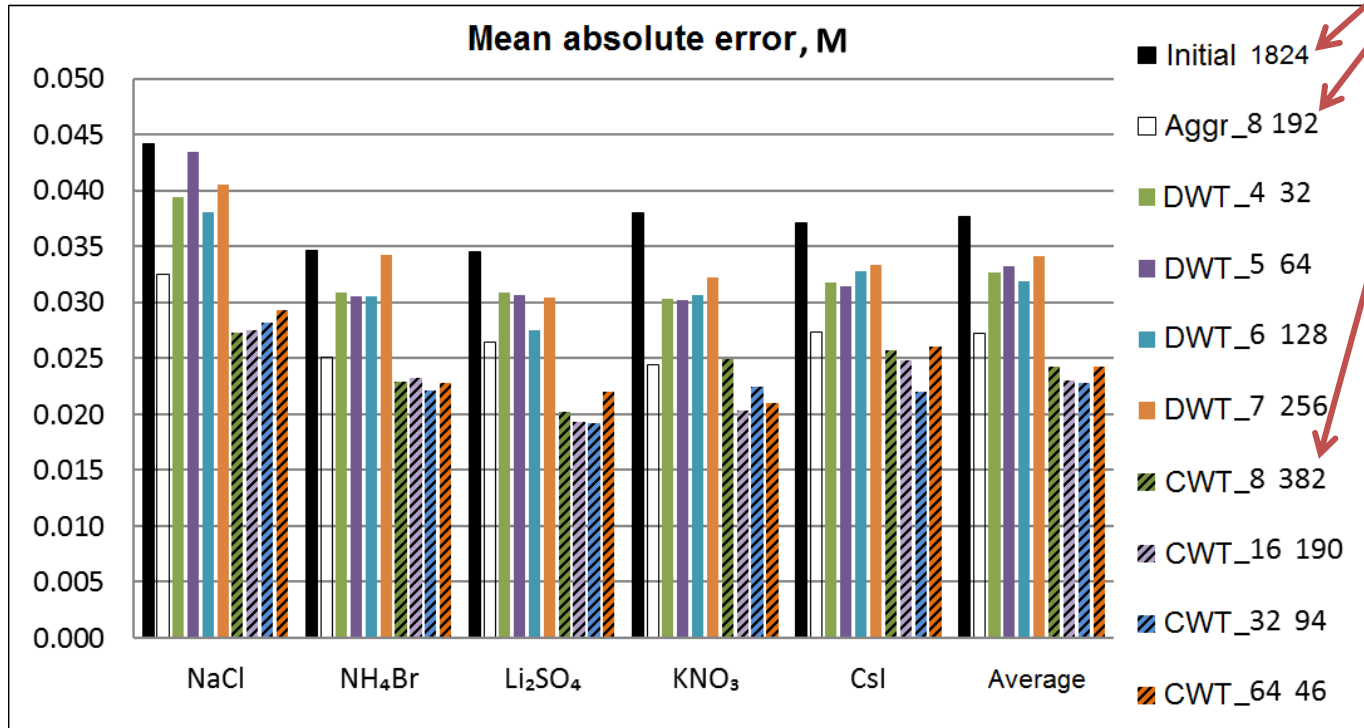


Непрерывное



Результаты

число признаков



Средняя абсолютная ошибка решения задачи нейронной сетью на входных данных: **Initial** – исходные спектры, **Aggr** – агрегированные (усреднение) данные, **DWT** – дискретное вейвлет-преобразование, **CWT** – непрерывное вейвлет-преобразование.

Универсальная аппроксимация (УА)

(Колмогоров, 1957)

Любая непрерывная функция n аргументов на единичном n -мерном кубе представима в виде суперпозиции непрерывных функций одного аргумента и операции сложения:

$$a(x^1, x^2, \dots, x^n) = \sum_{k=1}^{2n+1} h_k \left(\sum_{i=1}^n \varphi_{ik}(x^i) \right)$$

- УА на сигмоидальных функциях (Цыбенко, 1989)
- Нейронная сеть – универсальный аппроксиматор, независимо от выбора передаточной функции (Kurt Hornik, 1991)
- УА на вейвлет-функциях (Zhang, 1992)
- УА представлен нечеткой логической моделью (Zhang, 1992)

Вейвлет-нейронные сети (Zhang 1992)

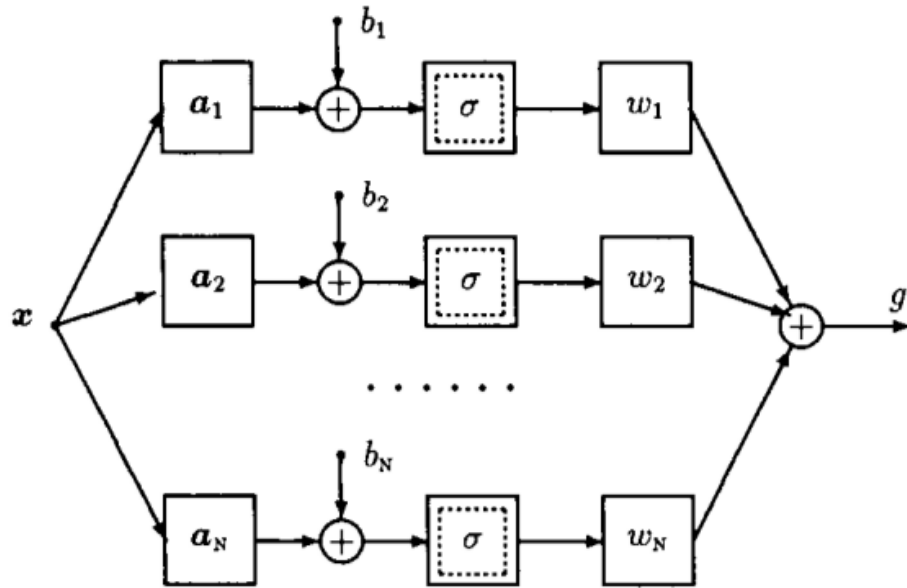


Схема обработки данных классической нейронной сети

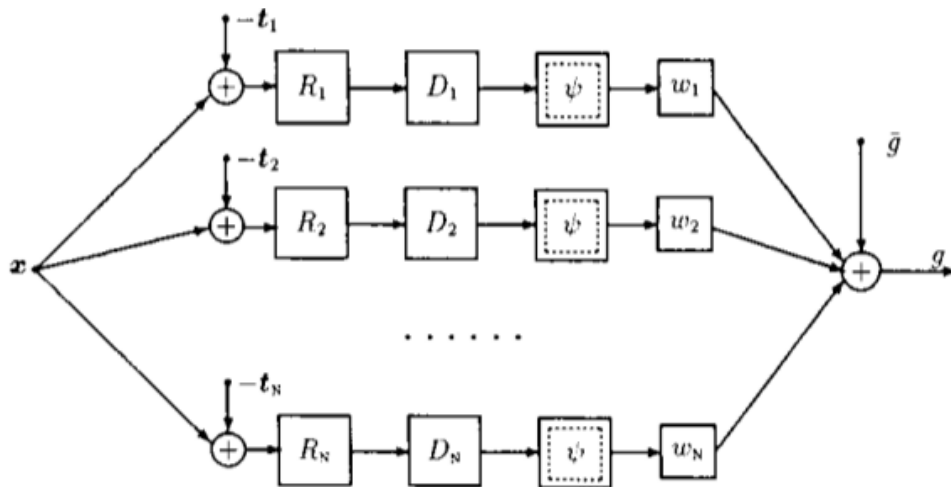
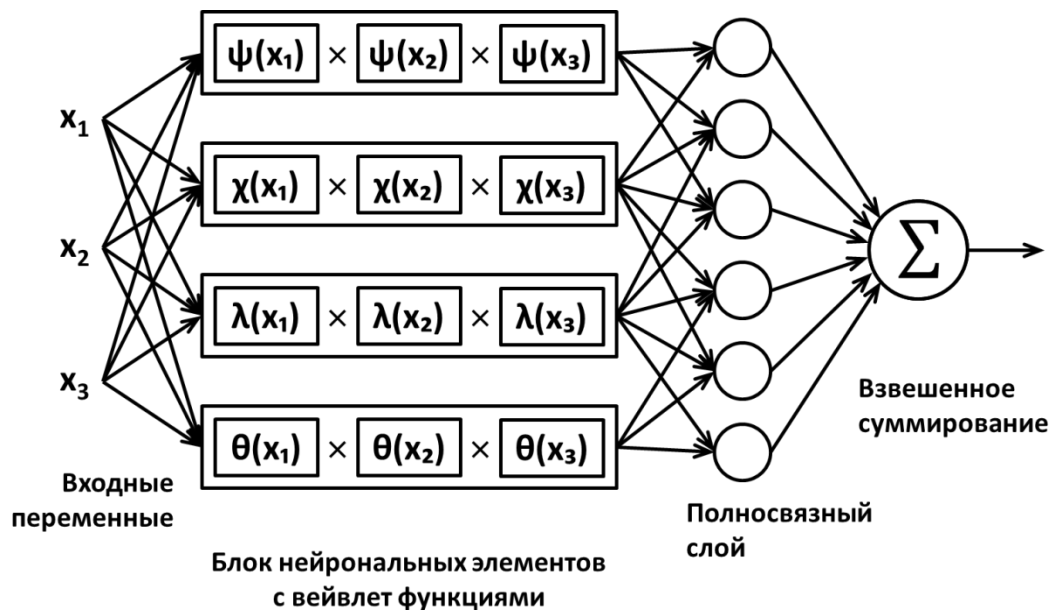


Схема обработки данных вейвлет-нейронной сети

Вейвлет нейронная-сеть



- Количество блоков нейрональных элементов задается произвольно;
- Количество вейвлет-функций нейрональных блоков равно числу входных признаков;
- В разных нейрональных-блоках могут использоваться различные вейвлет-функции;

Преимущества и недостатки вейвлет-нейронных сетей

Недостатки:

- Проблемы работы с данными высокой размерности;
- Зависимость от инициализации начальных параметров;
- Проблема подбора параметров обучения для весов разных типов;

Преимущества:

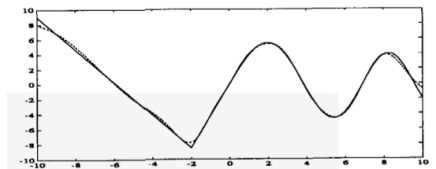
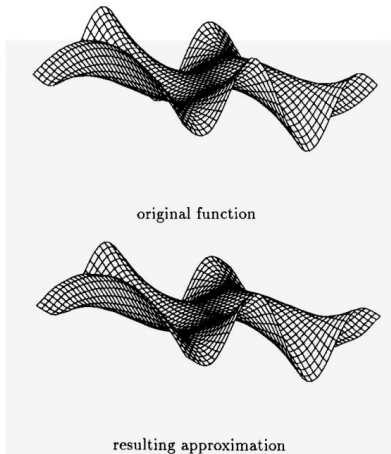
- Лучшая аппроксимация при меньшем числе параметров;
- Аппроксимация **негладкими функциями**;

TABLE I
APPROXIMATION RESULTS OF $f(\mathbf{x}) = (x_1^2 - x_2^2) \sin(0.5x_1)$

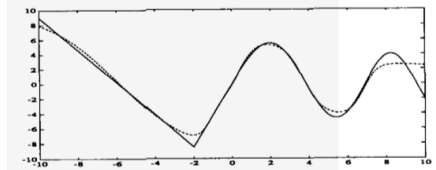
method	number of units	number of parameters	number of iterations	δ
wavelet network	49	442	40000	0.03395
neural network	225	1126	40000	0.29381
wavelet decomposition	961	962	40000	0.14289

TABLE II
APPROXIMATION RESULTS OF $\eta = f(\pi, \omega)$

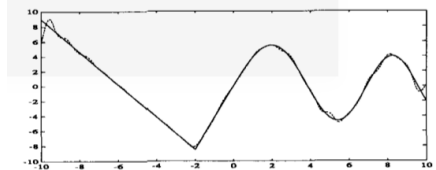
method	number of units	number of parameters	number of iterations	δ
wavelet network	9	82	10^5	0.06041
neural network	16	81	10^5	0.09240
wavelet decomposition	81	82	10^5	0.08311



wavelet network, 7 wavelons, 22 parameters,
10000 learning iterations, $\delta = 0.05057$.



neural network, 7 neurons, 22 parameters,
10000 learning iterations, $\delta = 0.13286$

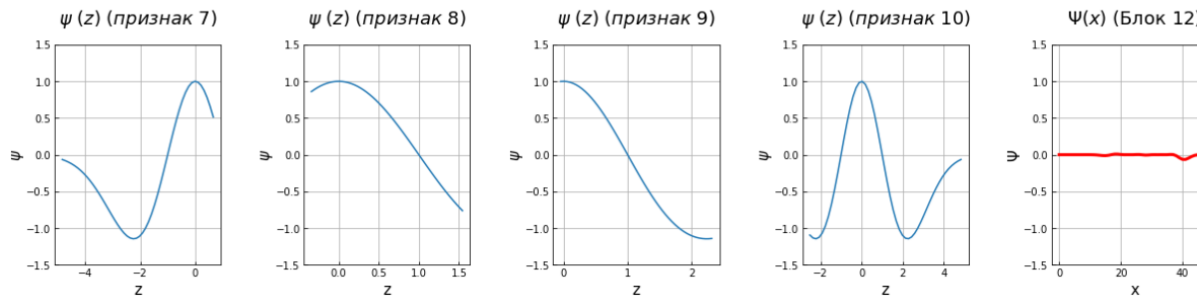
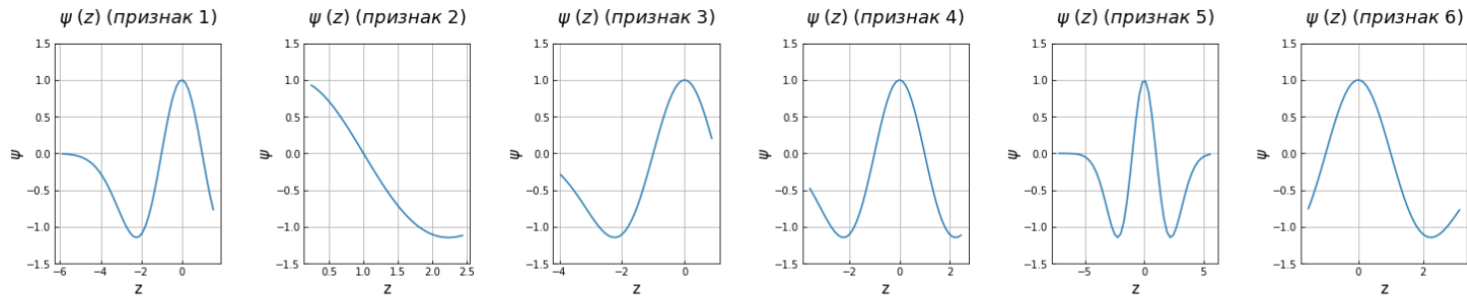
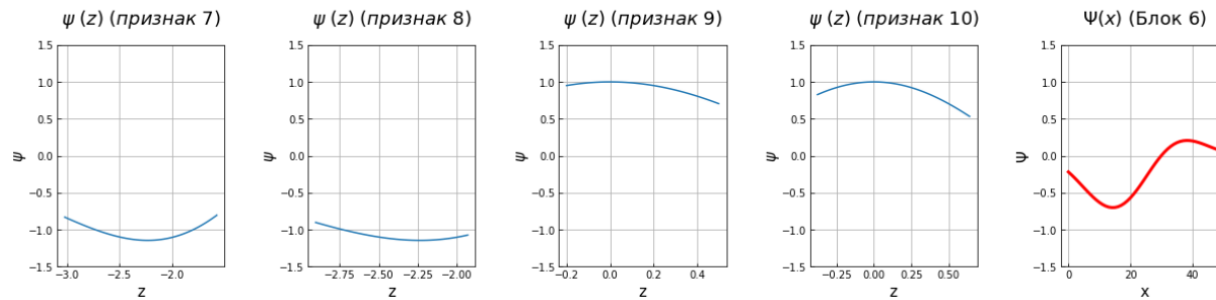
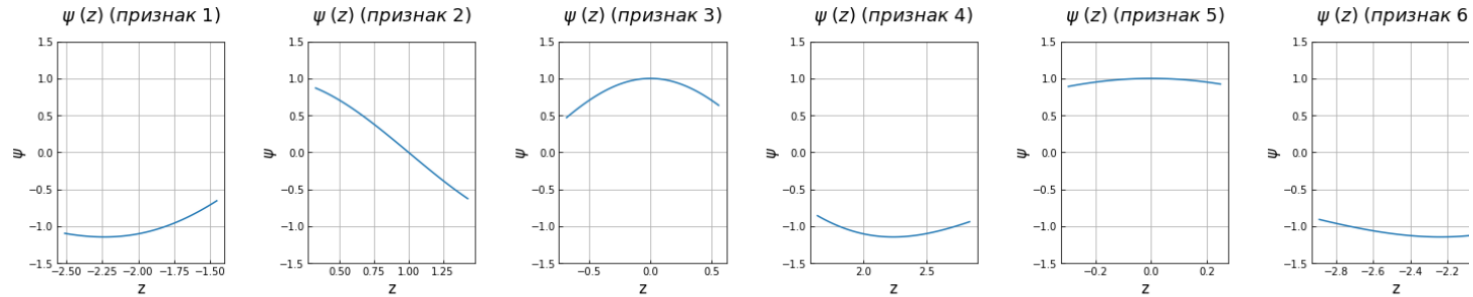


wavelet decomposition, 31 wavelons, 32 parameters,
10000 learning iterations, $\delta = 0.06350$

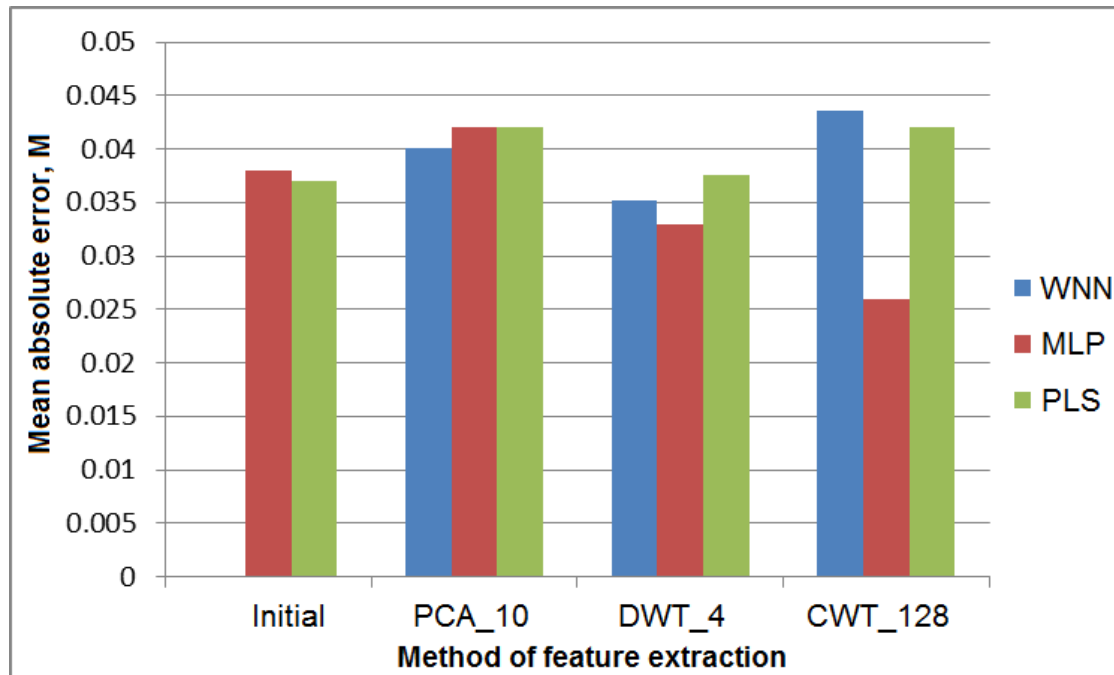


Fig. 5. Approximation of the function $f(\mathbf{x}) = (x_1^2 - x_2^2) \sin(0.5x_1)$ by a wavelet network over $\mathcal{D} = [-10, 10] \times [-10, 10]$.

Визуализация ответов блоков нейросети



Результаты решения ВНС



Средняя абсолютная ошибка решения задачи нейронными сетями (WNN – вейвлет нейронная сеть, MLP – персептрон, PLS – метод частичных наименьших квадратов) сетью на входных данных: **Initial** – исходные спектры, **PCA** – метод главных компонент (10 признаков), **DWT** – дискретное вейвлет-преобразование (32 признака), **CWT** – непрерывное вейвлет-преобразование (22 признака).

Выводы

1. Произведено сравнение техник сжатия КР-спектров методами дискретного и непрерывного вейвлет-преобразования при решении обратной задачи нейронной сетью.

Вывод: обе техники влияют позитивно на точность решения, эффект использования непрерывного вейвлет-преобразования значительнее.

2. Реализация и тестирование вейвлет-нейронной сети на обратной задаче спектроскопии:

Выводы:

- a) Результаты работы сравнимы с нейронной сетью;
- b) Проблемы обучения на данных высокой размерности;
- c) Высокая зависимость от начальной инициализации параметров вейвлет-функций;
- d) Требуется контроль параметров масштаба\сдвига вейвлет-функций на каждой итерации обучения;