



LOMONOSOV MOSCOW
STATE UNIVERSITY



Using Adaptive Window Wavelet Neural Network to Solve a Spectroscopy Inverse Problem

Ефиторов А. О., Широкий В.Р., Доленко С.А.
НИИ ядерной физики имени Д. В. Скобельцына
a.efitorov@sinp.msu.ru

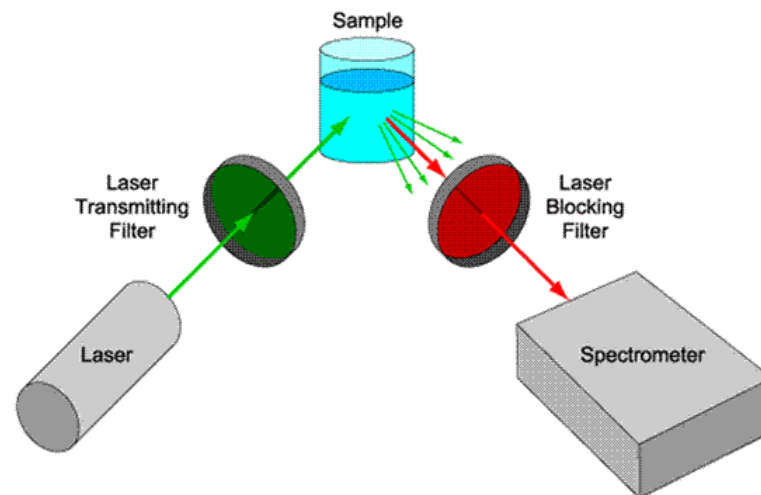
Обратная задача спектроскопии

Задача:

Определить концентрации 10 растворенных в воде ионов неорганических солей;

Метод измерений:

Спектроскопия комбинационного рассеяния;



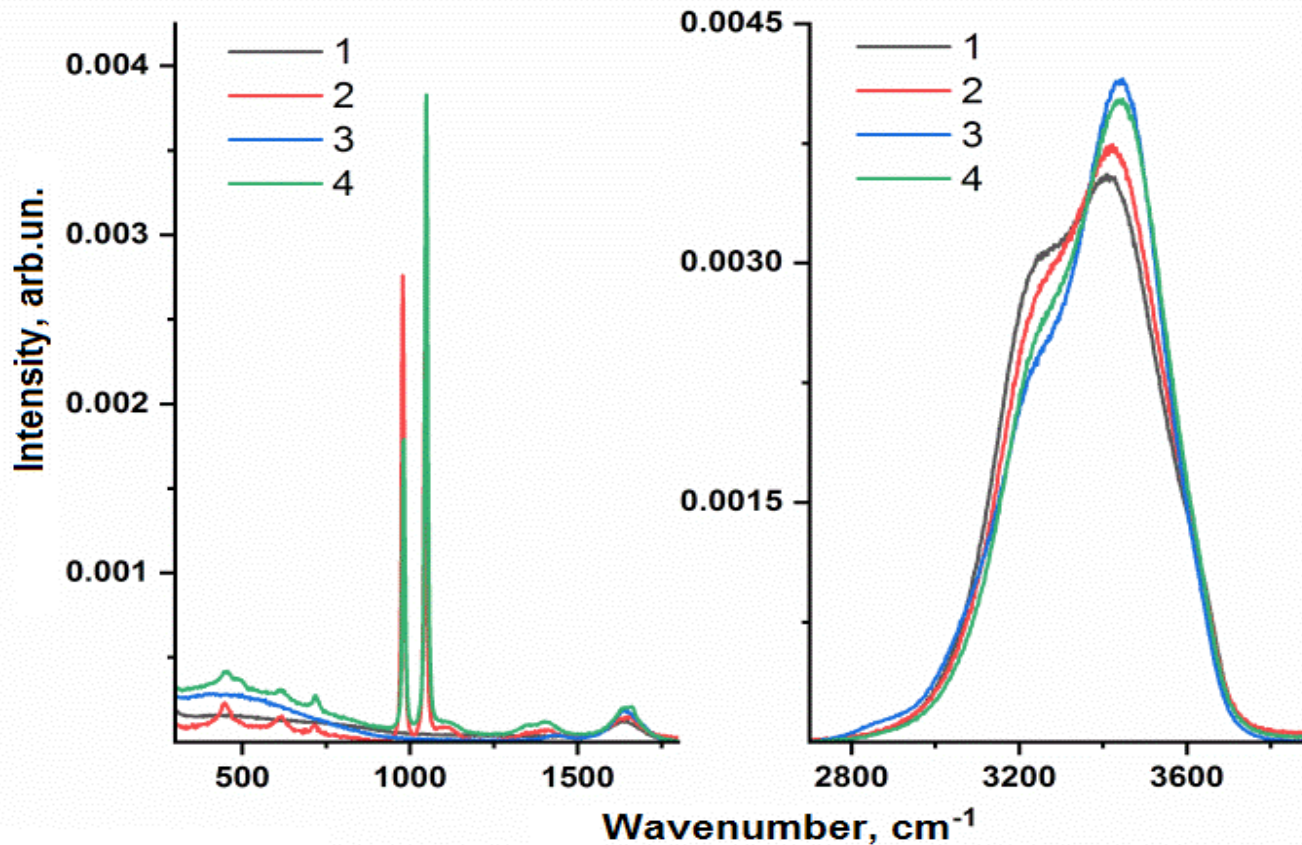
Массив данных:

- ~4500 спектров реальных лабораторных измерений;
- В водных растворах присутствуют от 1 до 5 солей одновременно + дистиллированная вода;
- Один и тот же ион может присутствовать в нескольких солях;
- Диапазон измерения концентраций: 0 - 4.5Моль/Л, шаг сетки: 0.2Моль/Л;

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;

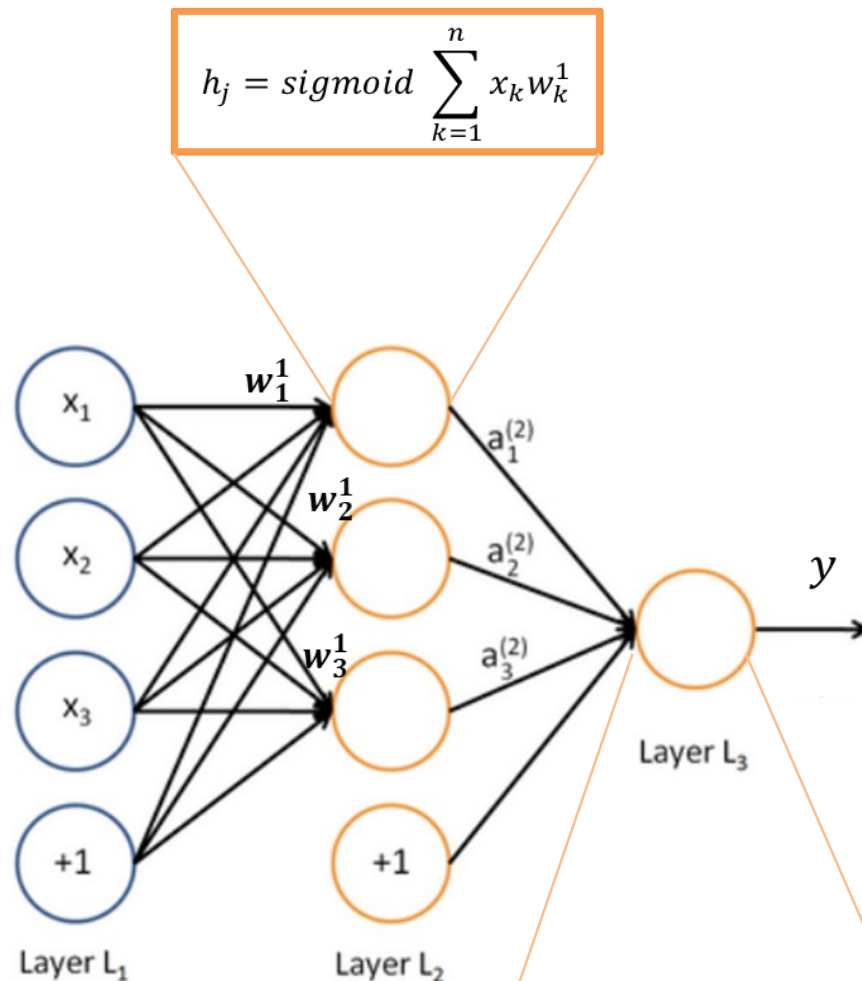
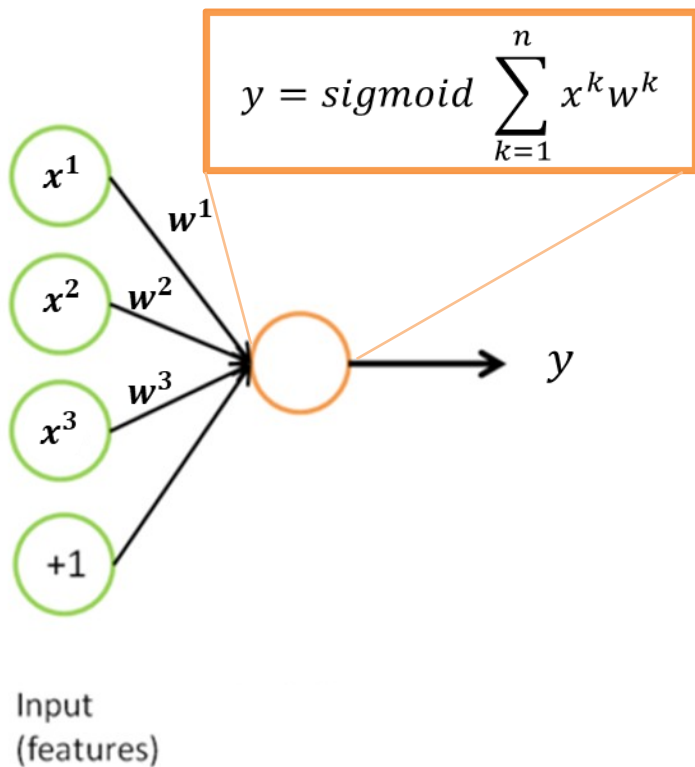
2 – KNO_3 – 0.6M, Li_2SO_4 – 0.75M;

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.

Искусственные нейронные сети

Логистическая регрессия

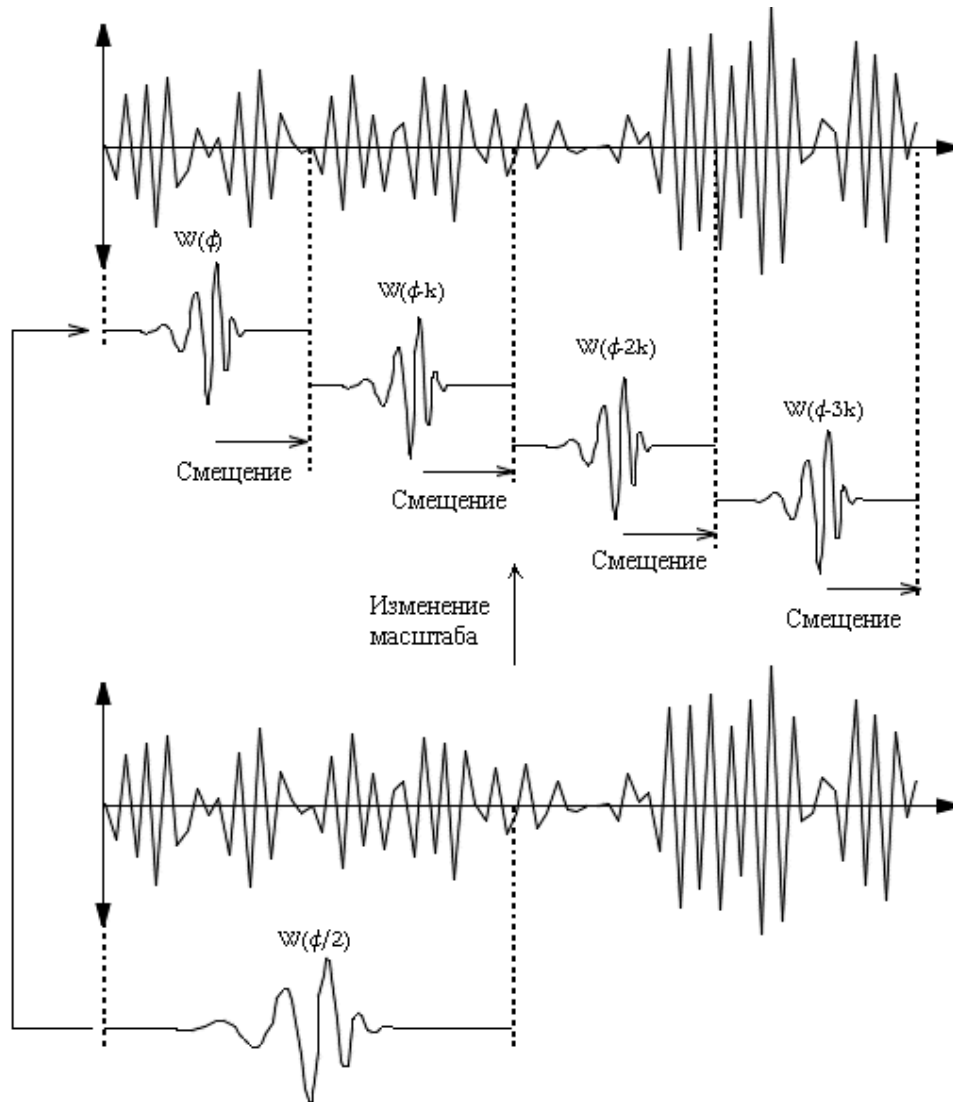


персептрон с одним скрытым
слоем на сигмоидальных функциях

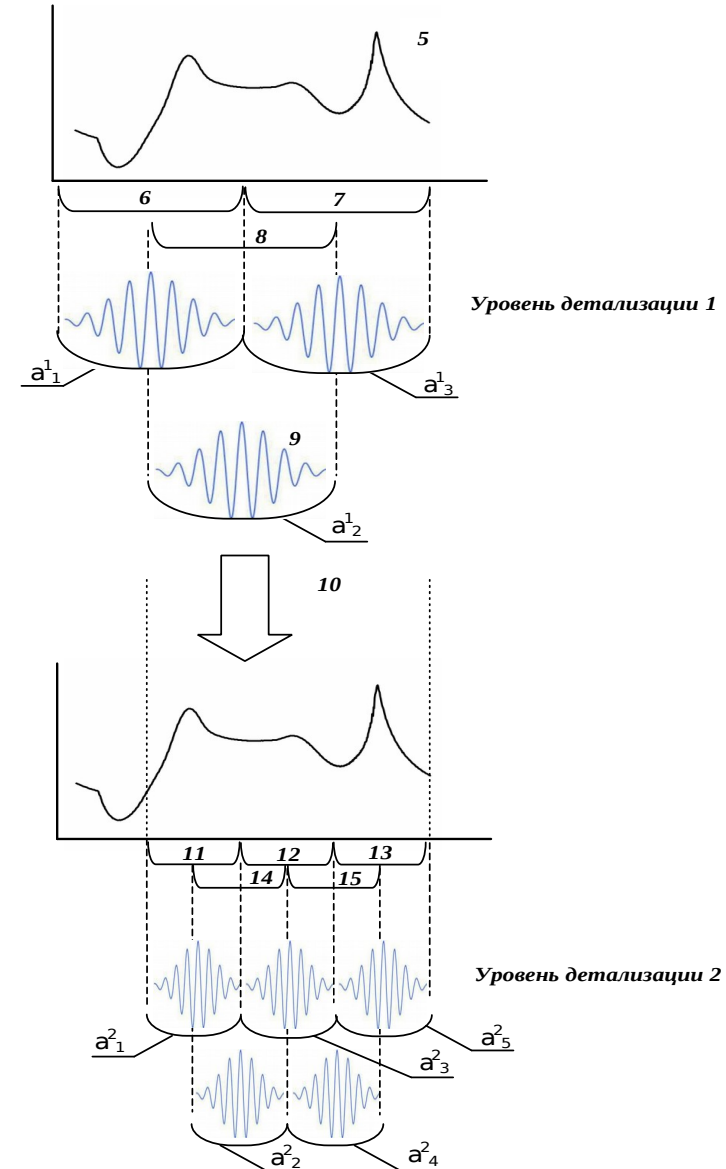
$$y = \text{sigmoid} \sum_{j=1}^n a_j h_j$$

Вейвлет-преобразование

Дискретное

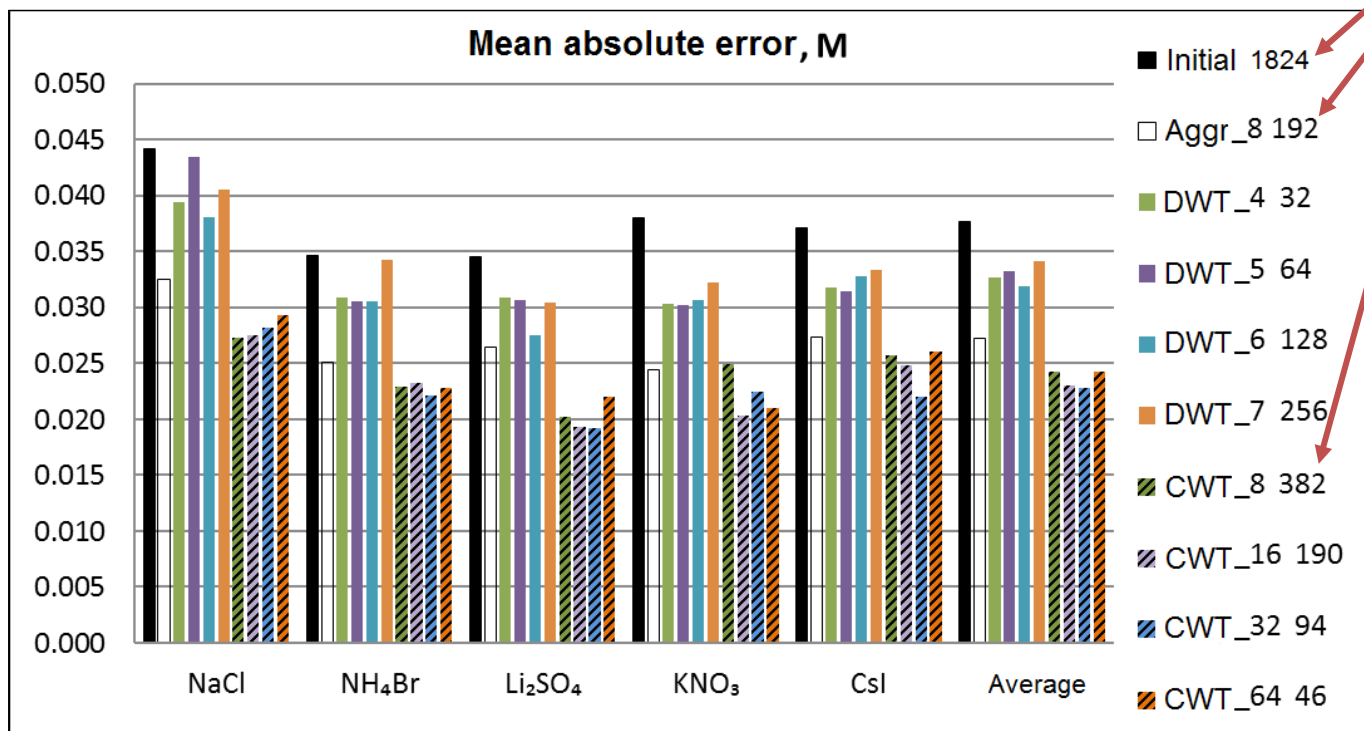


Непрерывное



Результаты решения задачи на вейвлет коэффициентах

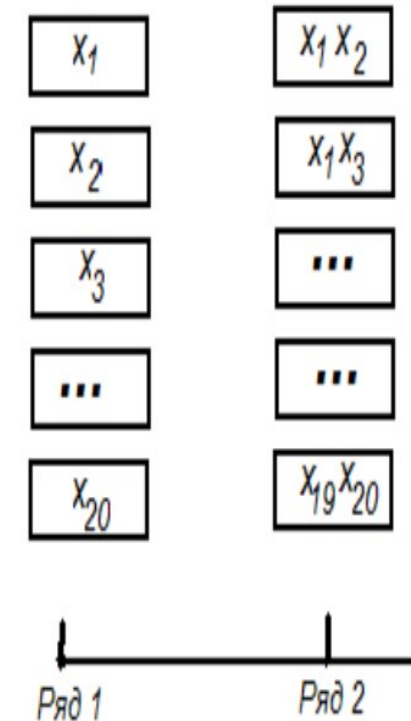
Число признаков



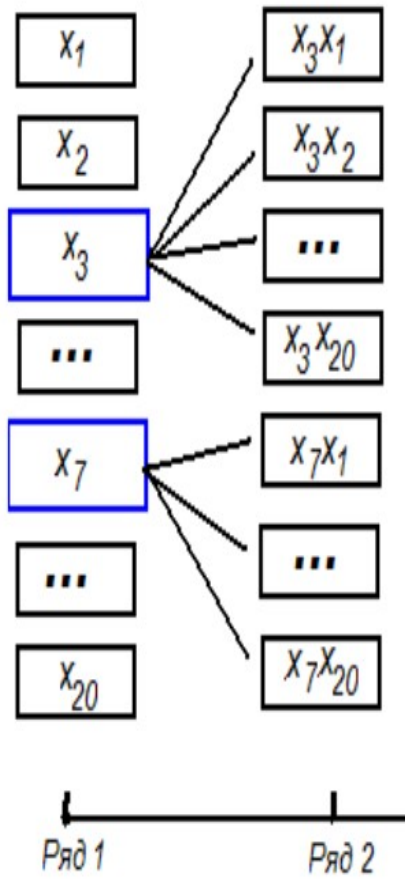
Средняя абсолютная ошибка решения задачи нейронной сетью на входных данных: **Initial** – исходные спектры, **Aggr** – агрегированные (усреднение) данные, **DWT** – дискретное вейвлет-преобразование, **CWT** – непрерывное вейвлет-преобразование.

МГУА* (метод группового учета аргумента)

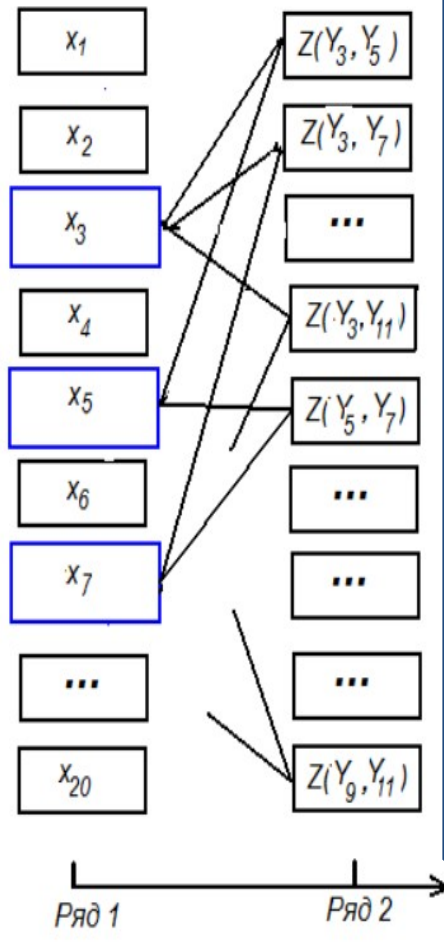
Комбинаторный



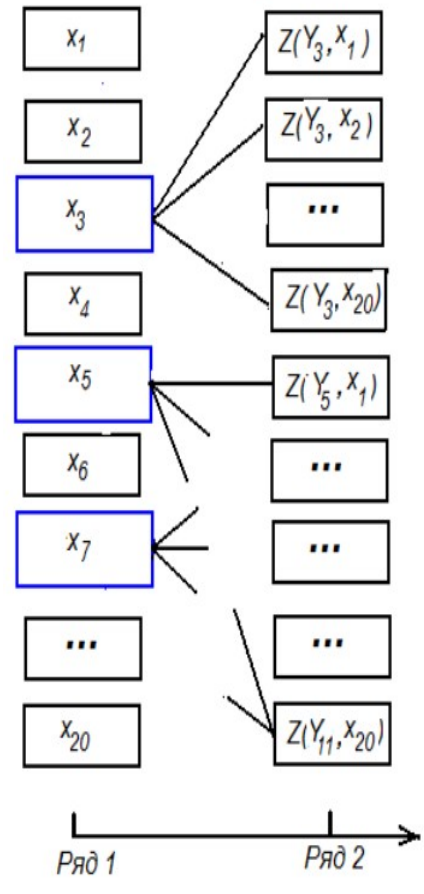
Комбинаторно-селективный



Многорядный итеративный

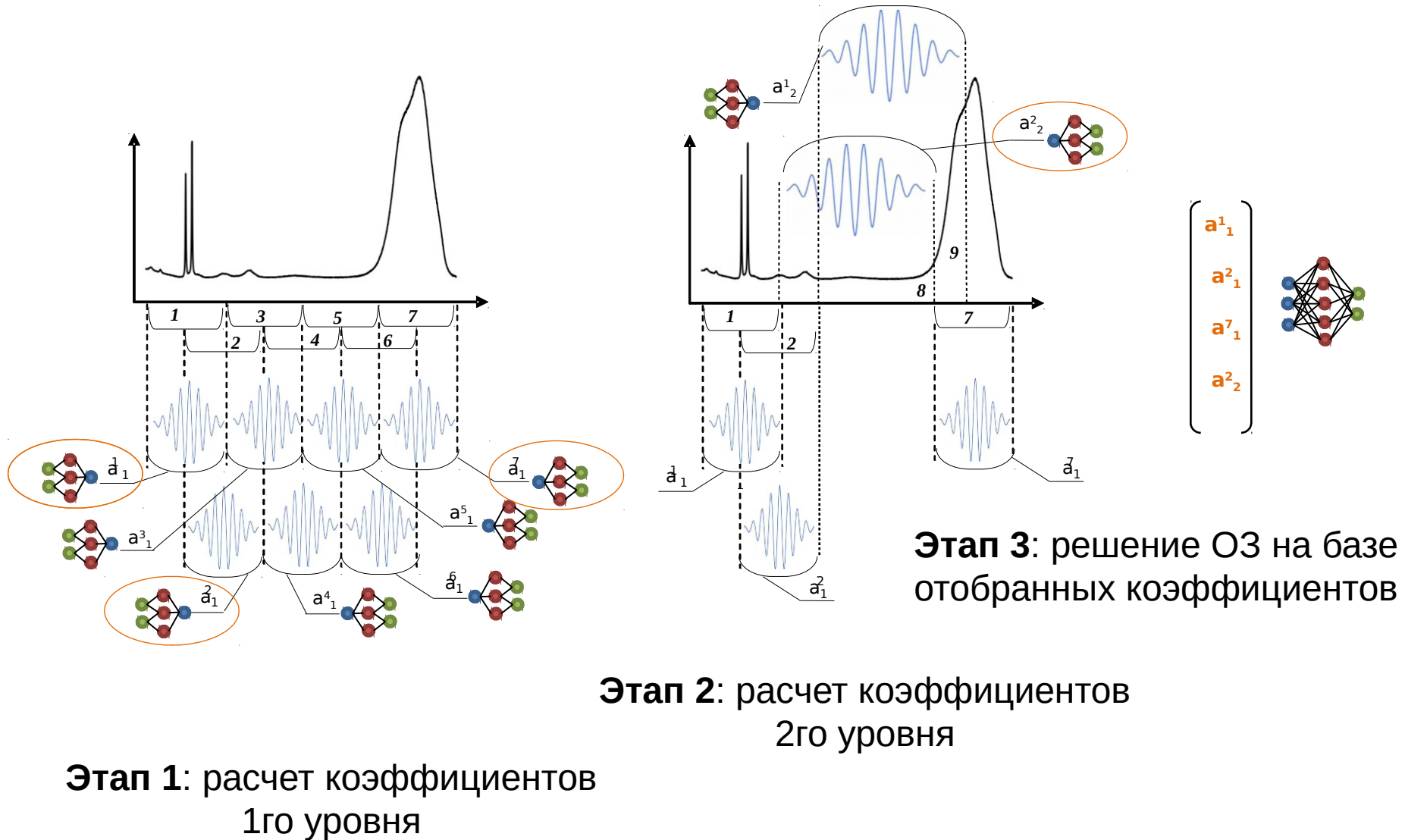


Релаксационно итеративный

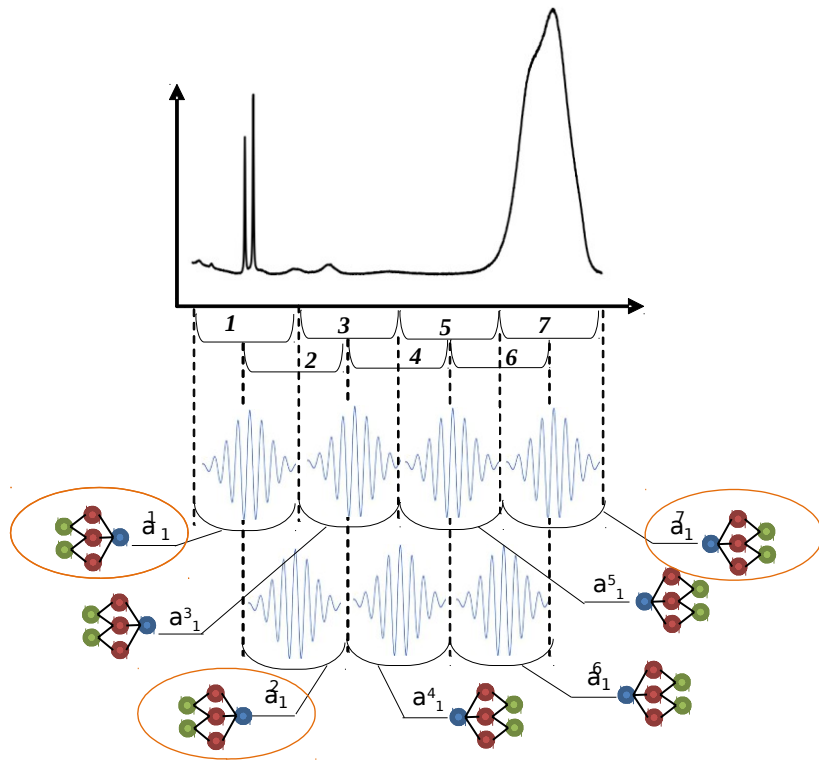


*G. Onwubolu et.al. b. GMDH-Methodology and Implementation in C. Publisher: World Scientific Publishing Company ISBN: 978-1-84816-610 (2014).

Многоуровневый алгоритм выбора вейвлет-функций



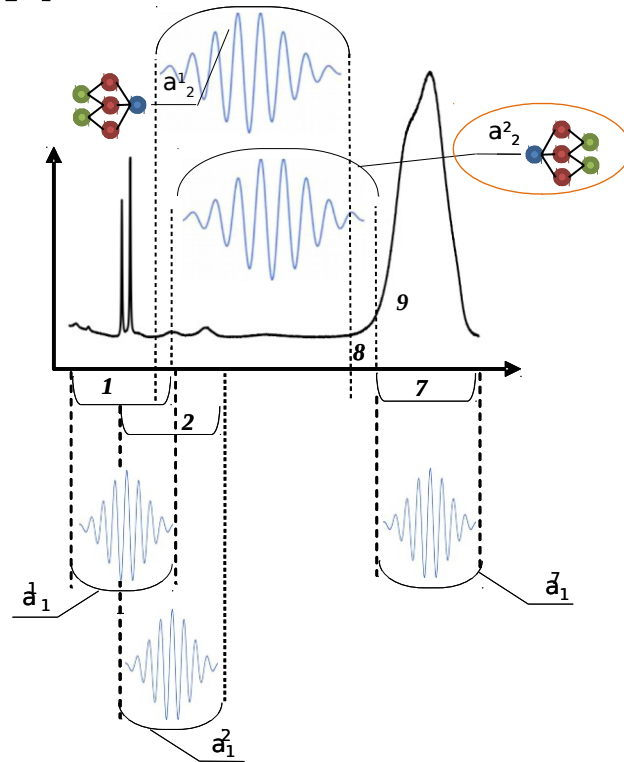
Многорядный алгоритм выбора вейвлет-функций



- Решение физической ОЗ собственной моделью для каждой переменной по отдельности;
- Старт расчетов с минимальной ширины окна вейвлет-функции;
- На первом уровне вычисляются все вейвлет-коэффициенты;
- Выбор фиксированного числа лучших моделей;
- Для переменных лучших моделей дальнейшее изменение масштаба не предполагается – их следует отложить до окончания работы алгоритма выбора вейвлет-окон

Многоуровневый алгоритм выбора вейвлет-функций

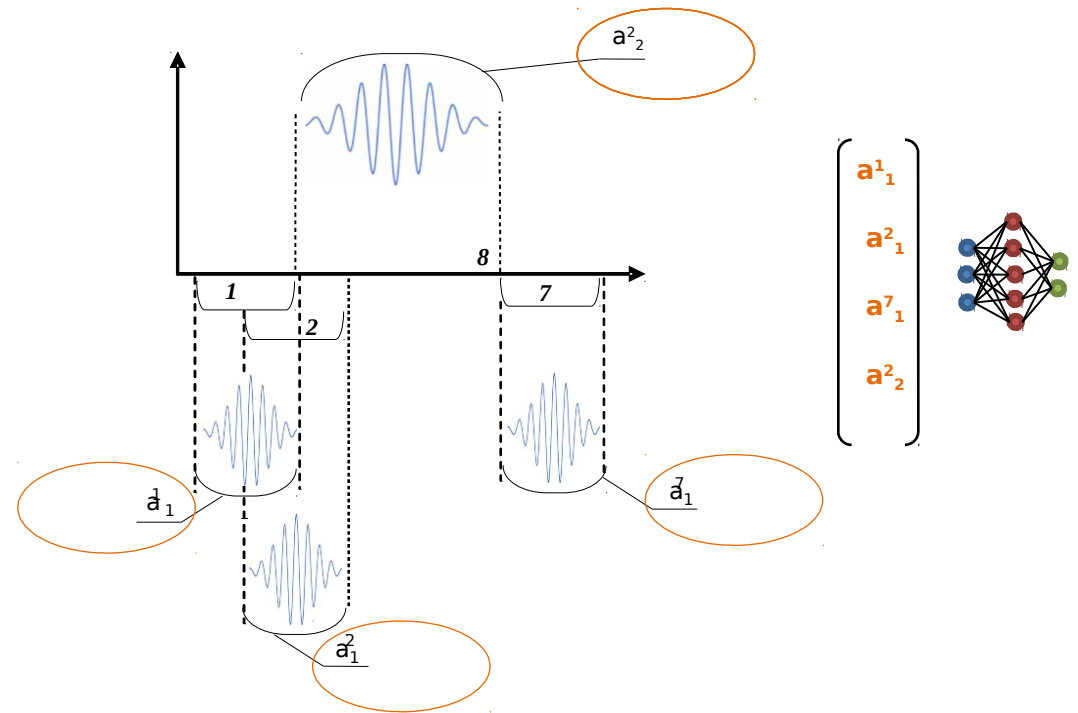
Уровень 2: коэффициенты ширины $\times 2$



Уровень 1: “отложенные” коэффициенты

- На следующий уровень попадают области, продемонстрировавшие низкое качество решения задачи;
- Соседствующие области сливаются в вейвлеты следующего уровня (двукратное увеличение масштаба);
- На каждом из полученных вейвлет-коэффициентов нового уровня решается физическая задача;
- Выбор вейвлет коэффициентов, продемонстрировавших лучшие результаты решения ОЗ.

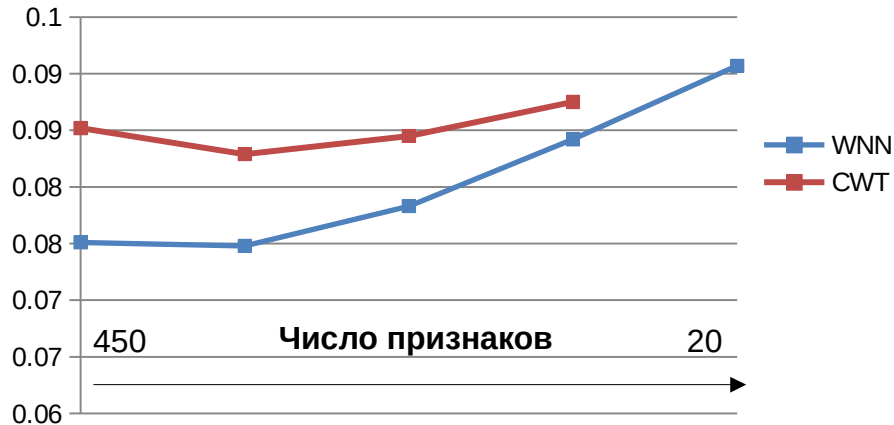
Многорядный алгоритм выбора вейвлет-функций



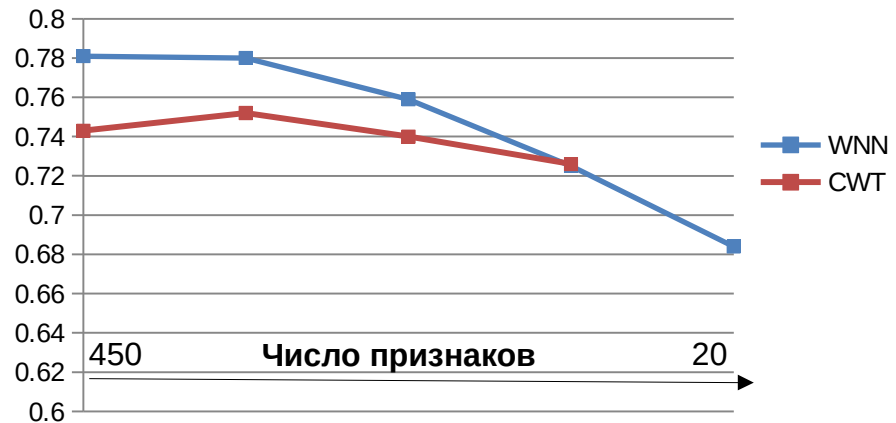
- Решение обратной задачи на основе выбранных коэффициентов с помощью единственной нейронной сети.

Результаты решения ОЗ

Средняя абсолютная ошибка



Коэффициент детерминации



Сравнение значений **средней абсолютной ошибки** и **коэффициента детерминации** решения обратной задачи спектроскопии на базе признаков непрерывного вейвлет-преобразования **без отбора (CWT)** и с **адаптивным отбором ширины окна (WNN)** в зависимости от числа признаков

Публикации по теме

- 2015 Significant Feature Selection in Neural Network Solution of an Inverse Problem in Spectroscopy. Efitorov A., Burikov S., Dolenko T., Laptinskiy K., Dolenko S. в журнале *Procedia computer science*, издательство Elsevier (United States), том 66, с. 93-102;
- 2015 Comparison of the quality of solving the inverse problems of spectroscopy of multi-component solutions with neural network methods and with the method of projection to latent structures. Efitorov A.O., Burikov S.A., Dolenko T.A., Persiantsev I.G., Dolenko S.A. в журнале *Optical Memory and Neural Networks (Information Optics)*, издательство Allerton Press Inc. (United States), том 24, № 2, с. 93-101;
- 2016 Neural Network Solution of an Inverse Problem in Raman Spectroscopy of Multi-component Solutions of Inorganic Salts Efitorov A., Dolenko T., Burikov S., Laptinskiy K., Dolenko S. в журнале *Advances in Intelligent Systems and Computing*, том 449, с. 273-279;
- 2017 Solution of Multi-parameter Inverse Problem by Adaptive Methods: Efficiency of Dividing the Problem Space. Alexander Efitorov, Tatiana Dolenko, Sergey Burikov, Kirill Laptinskiy, Sergey Dolenko. в журнале *Lecture Notes in Computer Science*, том 10614, с. 751-752;
- 2018 A Neural Network of Multiresolution Wavelet Analysis. Efitorov A., Shiroky V., Dolenko S. в журнале *Lecture Notes in Computer Science*, том 11140, с. 567-574;
- *Efitorov A., Dolenko S. A new type of a wavelet neural network // Optical Memory and Neural Networks (Information Optics). — 2018. — Vol. 27, no. 3. — P. 152–160.*
- Use of wavelet neural networks to solve inverse problems in spectroscopy of multi-component solutions / A. Efitorov, S. Dolenko, T. Dolenko et al. // *Studies in Computational Intelligence*. — 2020. — Vol. 856. — P. 285–294