УДК 004.942:519.6

Обучение нейронной сети для параметрического восстановления спектра пучка электронов

А. Ю. Баев

Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина, Украина

В работе рассматриваются методы искусственного интеллекта для решения задачи восстановления спектра пучка электронов по измеренному глубинному распределению поглощенного заряда. Ранее было показано, что для решения указанной задачи могут быть использованы методы, основанные на нейронных сетях. Существенным является выбор вида сети, ее параметров и обучающего множества. Работа посвящена исследованию зависимости между точностью восстановления спектра методом, использующим обобщенно-регрессионную нейронную сети, и шириной активационной функции нейронов этой сети. В результате выполнения вычислительного эксперимента выделены диапазоны значений ширины активационной функции, для которых точность восстановления спектра пучка электронов максимальна.

Ключевые слова: *Обратные задачи спектроскопии, радиационные технологии, компьютерное моделирование, РБФ нейронные сети, активационная функция.*

В роботі розглядаються методи штучного інтелекту для вирішення задачі відновлення спектру пучка електронів за виміряним глибинним розподіленням поглиненого заряду. Раніше було показано, що для вирішення вказаної задачі можуть використовуватися методи, які базуються на нейронних мережах. Суттєвим є вибір види мережі, параметрів її нейронів та множини для навчання. Робота присвячена дослідженню залежності між точністю відновлення спектру методом, що використовує загально-регресійну нейронну мережу, та шириною активаційної функції її нейронів цієї мережі. За результатами виконаного обчислювального експерименту виявлені діапазони значень ширини активаційної функції, для яких точність відновлення спектру пучка електронів максимальна.

Ключові слова: *Обернені задачі спектроскопії, радіаційні технології, комп'ютерне моделювання, РБФ нейронні мережі, активаційна функція.*

In the work considered methods of artificial intelligence for solving problem of electron spectrum reconstruction by measured distribution of charge deposition. Previously shown that based on neural networks methods can be used to resolve this problem. Accuracy of reconstruction depends on networks type, their parameters and form of neurons activation function. The aim of this work is an investigation of dependency between inaccuracy of spectrum reconstruction based on general regression neural network and neurons smoothness. The results of computational experiment allowed to find points of the dependency under investigation which correspond to maximum accuracy of reconstruction of electron beam spectrum.

Keywords: *Inverse problems, radiation technology, computer simulation, RBF neural network, activation function.*

1. Общая постановка задачи

Решение обратных задач спектроскопии, в том числе восстановление спектра пучка электронов по измеренному глубинному распределению поглощенной дозы или заряда, связанно с рядом проблем вызванных неустойчивостью решения интегрального уравнения Фредгольма I рода, описывающего процесс косвенного измерения [1]:

$$\int_{E_L}^{E_R} Q(x,E)y(E)dE = f(x). \qquad (1)$$

В дискретном случае – измерение соответствующих величин методом поглотителей – интеграл (1) приближается системой уравнений вида:

$$Ay = f\ , \qquad (2)$$

где элементы матрицы A определяются на основе зависимости $Q(x,E)$, а также дискретизации спектра электронов $y(E_j)$ (шаг ΔE выбирается при решении обратной задачи) и свойств дискретного набора $f(x_i)$ (шаг Δx задается характеристиками измерительного прибора). Очевидно, что в процессе измерения к значениям $f(x_i)$ добавляется погрешность, обусловленная несовершенством методов измерения и различными внешними факторами. Далее через f будем обозначать набор истинных значений функции $f(x)$, а через $\tilde{f}$ – значения функции $f(x)$, дополненные нормально распределенной погрешностью.

Некорректные обратные задачи спектроскопии могут быть рассмотрены как задачи многомерной аппроксимации, т.е. сводятся к поиску функции $\tilde{y} = \ddot{}\,(\tilde{f})$ такой, что $Err(\tilde{f}, A\tilde{y}) \to \min$. В работах [2, 3] для их решения рассматриваются методы, основанные на нейронных сетях (НС) [4, 5]. Обучение и тестирование в предложенном подходе основаны на использовании наборов данных, соответствующих реальным входным спектрам и результатам измерений, которые получены на базе существующих компьютерных моделей физических процессов.

В [6] истинные спектры параметризируются, и НС обучается так, что результатом ее работы являются численные значения соответствующих параметров. Обученная НС представляет собой отображение $\Phi : \Re^N \to \Re^M$, где N – количество детектирующих слоев дозиметра, а M – количество параметров спектра, базовые точки $(E_{p_1}, E_{p_2}, ...E_{p_M}, \tilde{f})_l$, т.е. различные спектры и соответствующие им распределения поглощенного заряда, используются для формирования обучающей выборки. Согласно [6] для параметрического восстановления спектра пучка электронов по распределению поглощенного заряда целесообразно использовать разновидность радиально базисной сети – обобщенную регрессионную нейронную сеть [7], результаты работы которой обладают наименьшей дисперсией в сравнении с другими нейронными сетями и классическими методами обработки результатов. Однако для этого вида нейронных сетей выявлена не зависящая от погрешности измерительного прибора систематическая ошибка, выраженная смещением восстановленного спектра вдоль оси абсцисс (см. рис. 1).

Способности к аппроксимации нейронной сети на радиально-базисных функциях в соответствии с [8, 9] зависят от ширины активационной функции (α), а согласно общей постановке задачи аппроксимации функции от выбранных базовых точек.

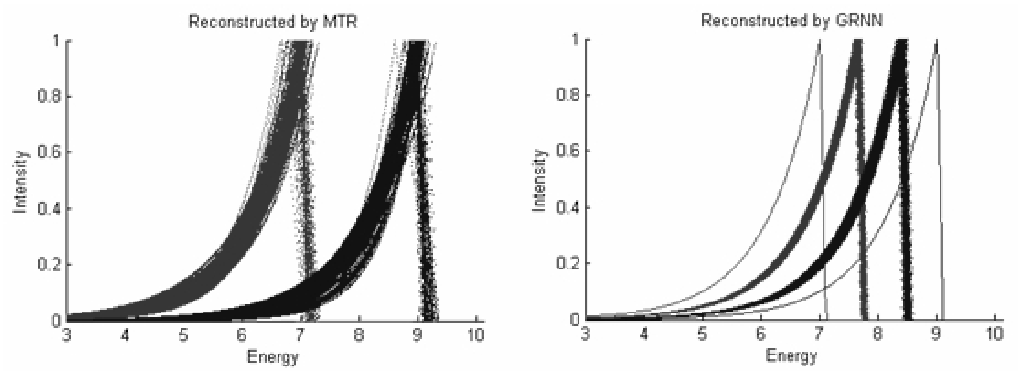

Рис. 1. *Спектры восстановленные методом регуляризации Тихонова и обобщенно регрессионной нейронной сетью.*

В этой связи работа посвящена исследованию вида зависимости величины смещения восстановленного спектра, т.е. точности восстановления спектра электронов нейронной сетью, от α и характеристик множества для обучения.

2. Вычислительный эксперимент

2.1 Общее описание

Исследование влияния параметров НС на точность восстановления спектра электронов в рассматриваемой задаче выполнено согласно статистическому эксперименту, рассмотренному в [10]. На каждой итерации цикла Common (см. рис. 2) генерируются наборы экспериментальных данных для обучения и тестирования НС с использованием модели процесса взаимодействия ионизирующего излучения с веществом и модели процесса измерения глубинного распределения заряда. После обучения НС выполняется восстановление энергетического распределения пучка электронов и оценка отклонения восстановленного спектра от истинного (цикл DataEvaluation) для каждого набора тестовой выборки. В цикле Common варьируется величина α, а дисперсия погрешности измерений остается неизменной. Завершающим этапом эксперимента является расчет статистических характеристик результатов всех итераций: среднего, стандартного отклонения, – и на их основе формирование графиков, отображающих зависимость между величиной отклонения восстановленного спектра от его истинного значения и α.

Прямая задача. Пучок электронов падает на измерительный прибор, состоящий из чередующихся поглотителей и детектирующих слоев. В результате взаимодействия, электроны останавливаются на различной глубине, а детектирующие слои фиксируют дискретный набор пар «глубина-заряд» – $(x_i, \tilde{f}_i)$. Очевидно, что значение измеренного заряда $\tilde{f}_i$ отличается от его истинного значения f_i на величину погрешности измерительного прибора $\pm$.

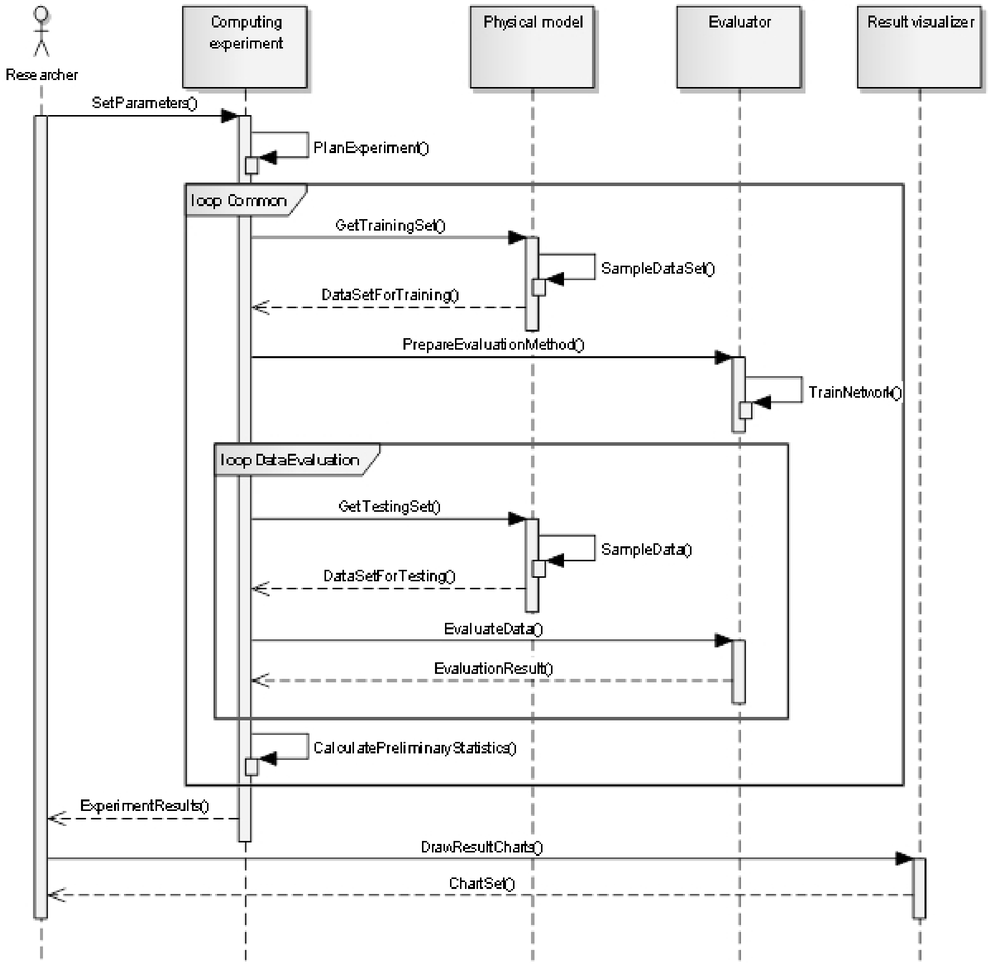

Рис. 2. *Диаграмма последовательности вычислительного эксперимента*

Описанный процесс взаимодействия моделируется с использованием эмпирико-теоретических компьютерных моделей [11], а процесс измерения – нормально распределенной погрешностью со стандартным отклонением от 0% до 15%. В работе распределение пучка электронов задается согласно уравнениям:

$$y(E,\overline{E}) = \begin{cases} e^{«(E-E_{prob})}, 0 < E <= E_{prob} \\ k_1 E + k_2, \quad E_{prob} < E <= E_{\max}, \\ 0, \quad E > E_{\max} \end{cases} , \quad (2)$$

$$« = \frac{\ln(0.1)}{E_{slope} - E_{prob}}, k_1 = \frac{1}{E_{prob} - E_{\max}}, k_2 = \frac{E_{\max}}{E_{\max} - E_{prob}}$$

где $\overline{E} = (E_{slope}, E_{prob}, E_{\max})$, E_{slope} – энергия электронов, для которых интенсивность по левому склону спектра в 10 раз меньше интенсивности электронов с наиболее вероятной энергией, E_{prob} – наиболее вероятная энергия спектра, $E_{\max}$ – максимальная энергия электронов в спектре.

2.2 Наборы данных для обучения и тестирования НС

Результатом работы алгоритма, реализующего описанную прямую задачу, является вектор s, состоящий из значений $\tilde{f}_i$ и параметров $E_{slope}, E_{prob}, E_{\max}$, на основе которых рассчитываются ошибки методов обработки:

$$s_k = (\tilde{f}, \overline{E})_k = (\tilde{f}_1, \tilde{f}_2, ..., \tilde{f}_N, E_{10}, E_{prob}, E_{\max})_k . \quad (3)$$

Обе выборки для тестирования и обучения получаются с использованием набора спектров, для каждого из которых генерируются несколько результатов измерений так, что в результате выборки выглядят следующим образом:

$$\begin{array}{l} L = \left(\tilde{f}, \overline{E}_{l_1}\right)_1, \left(\tilde{f}, \overline{E}_{l_1}\right)_2, ..., \left(\tilde{f}, \overline{E}_{l_i}\right)_k, \left(\tilde{f}, \overline{E}_{l_i}\right)_{k+1}, ... \\ T = \left(\tilde{f}, \overline{E}_{t_1}\right)_1, \left(\tilde{f}, \overline{E}_{t_1}\right)_2, ..., \left(\tilde{f}, \overline{E}_{t_j}\right)_k, \left(\tilde{f}, \overline{E}_{t_j}\right)_{k+1}, ... \end{array}, \quad (4)$$

где $\overline{E}_{l_i}$ – параметры *i*-ого спектра для обучения (далее базовые спектры), $\overline{E}_{t_j}$ – параметры *j*-ого спектра для тестирования, k – индекс вектора (3) в соответствующей выборке.

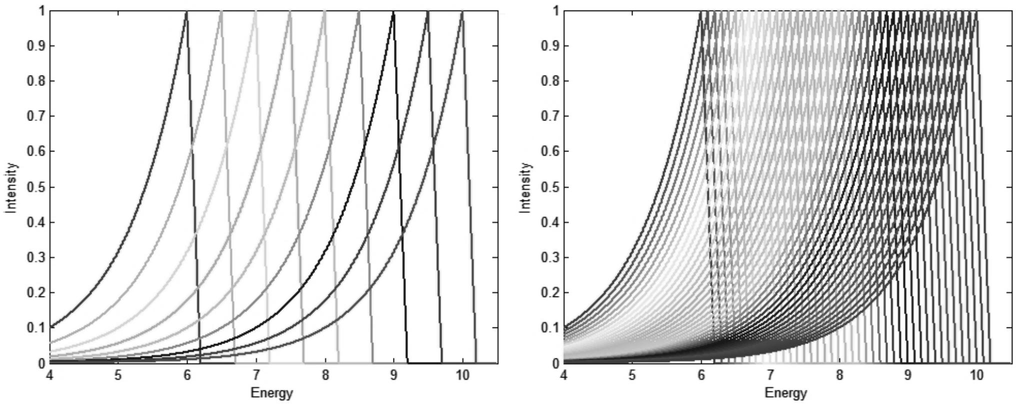

Рис. 3. *Спектры для а) обучения (базовые) и б) тестирования НС.*

На рис. 3 показан пример использованных спектров. Видно, что число базовых спектров меньше числа спектров используемых для обучения. Их совокупность задает диапазон возможных при тестировании значений параметров E_{slope}, E_{prob}, $E_{\max}$ и определяет базовые точки, необходимые для построения аппроксимирующей поверхности. Стоит отметить, что множество L может быть разбито на подмножества для непосредственно обучения и валидации процесса обучения в зависимости от используемого алгоритма.

При выборе спектров допускаются следующие предположения:

1. неопределенность ¢* истинного энергетического распределения электронов считается много меньше, чем неопределенность процедуры измерения,

2. значения компонент различных $\overline{E}$ дискретизированы таким образом, что различия в наборах истинных спектров много больше $¢^{*}$.

Все $s_k \in T \cup L$ предназначенные для обработки НС предварительно нормируются согласно отображению

$$[0; \max_L E_{\max}] \to [0;1] \quad (5)$$

и после обработки соответственно масштабируются.

2.3 Графическое представление результатов эксперимента

Как было упомянуто выше, для каждого восстановленного спектра пучка электронов, т.е. набора $\tilde{E}_{slope}$, $\tilde{E}_{prob}$, $\tilde{E}_{\max}$, рассчитывается его отклонение от истинного значения E_{slope}, E_{prob}, $E_{\max}$, т.е. $°_{slope} = E_{slope} - \tilde{E}_{slope}$ и аналогично для других параметров.

Величина ошибки $°$ и найденные параметры сохраняются для всех итераций вычислительного эксперимента, после чего рассчитываются среднее ($M[°_{\overline{E}_{t_j},~}]$) и стандартное отклонение ($±(°_{\overline{E}_{t_j},~})$). Таким образом, статистические характеристики вычисляются для наборов спектров, которые восстановлены НС с фиксированным α на основе распределений заряда соответствующих фиксированному истинному спектру $\overline{E}_{t_j}$.

Полученные зависимости $M[°_{\overline{E}_{t_j},~}]$ и $±(°_{\overline{E}_{t_j},~})$ отражают результаты эксперимента и на их основе строятся графики. По оси Ox откладываются значения α, по оси Oy – истинные значения параметра, нормированные согласно:

$$[0; \max_L E_p] \to [0;1], \quad (6)$$

где E_p – один из параметров E_{slope}, E_{prob}, $E_{\max}$ для которого строится график. По оси Oz откладываются значения $M[°]$ или $±(°)$.

3. Результаты и обсуждение

Программная реализация модели прямой задачи, методов обработки результатов измерений и алгоритмов обработки результатов вычислительного эксперимента выполнена в среде MATLAB. Реализации НС – функция newgrnn. Общие параметры вычислительного эксперимента представлены в табл. 1.

Табл. 1. Параметры вычислительного эксперимента

Параметр (1)	Значение (2)	Параметр (3)	Значение (4)
Базовые спектры	Левый спектр: $[E_{slope}; E_{prob}; E_{\max}] = [4;6;6.2]$ Правый спектр: $[E_{slope}; E_{prob}; E_{\max}] = [8;10;10.2]$ Число спектров: 3,4,…,9	Измеряемая хар-ка	Распред. заряда

(1)	(2)	(3)	(4)
Спектры (тестирование)	Левый спектр: $[E_{10}; E_{prob}; E_{\max}] = [4;6;6.2]$ Правый спектр: $[E_{10}; E_{prob}; E_{\max}] = [8;10;10.2]$ Число спектров: 41	Сетка дискретизации по x	$[0;6], \Delta x = 1$
Сетка дискретизации по E	$E \in [3;10.2], \Delta E = 0.1$	Материал поглотителей	Al: (A = 27, Z = 13)
Мощность L (набор для обучения)	$3..9 \times 1000$	Погрешность измерений (d)	5%
Мощность T (набор для тестирования)	41×1000	Число измерителей	7
α	0.01..1 с шагом 0.01		

На рис. 4-6 показаны графики-зависимости ошибки определения соответствующих параметров спектра электронов. На верхних трех графиках каждого рисунка ось *Oz* соответствует систематической ошибке $M[\circ]$ восстановления, а на нижних – статистической $\pm(\circ)$. Стоит отметить, что графики идентичны для различных параметров спектра. В этой связи на рис. 7 показаны регрессионные зависимости только для параметра E_{slope} с учетом, что для E_{prob} и $E_{\max}$ графики будут аналогичны.

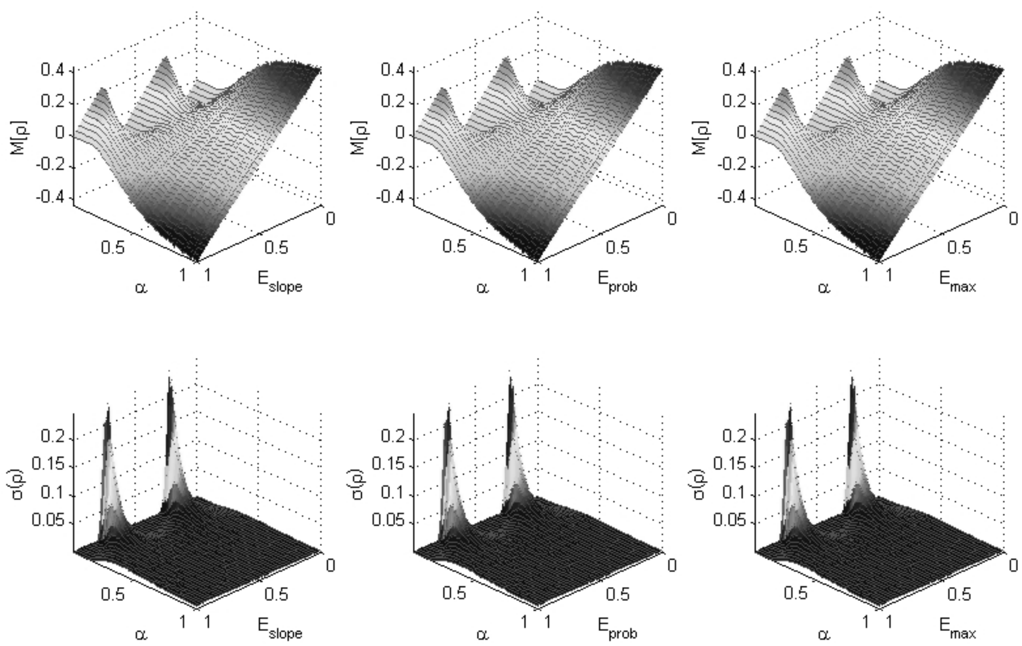

Рис. 4. *Зависимость ошибок восстановления параметров спектров от α для 3 базовых спектров.*

На рис. 4-6 видно, что с увеличением значения α возникают значительные систематические ошибки, а при значениях менее 0.05 увеличивается дисперсия результатов. В результате при больших α результаты НС стремятся к середине задаваемого базовыми спектрами интервала, а при малых α стремятся к собственно базовым спектрам, что видно на графиках регрессионных зависимостях (см. рис. 7). Учитывая, что ось *Oz* соответствует величине ошибки, очевидно, что оптимальным значением α будет такая, при которой изменение функций $M[\circ]$ и $\pm(\circ)$, описывающей перпендикулярное *Ox* сечение графика, будет стремиться к 0.

Сопоставление графиков на рис. 4-6 показывает, что с увеличением числа базовых спектров выделяется область, в которой изменение $M[\circ]$ и $\pm(\circ)$ минимально. Графики на рис. 4, 5 и 6 соответствуют экспериментам, в которых использованы 3, 5 и 9 базовых спектра. Видно, что увеличение числа последних приводит к минимизации изменений $M[\circ]$ и $\pm(\circ)$ при малых значениях параметра α. В тоже время на зависимости $\pm(\circ)$ уменьшается высота пиков соответствующих базовым спектрам, но значения функции около основания пиков изменяется слабо. Таким образом, можно предположить существование максимального числа базовых спектров такого, что дальнейшее его увеличение не приводит к улучшению качества восстановления.

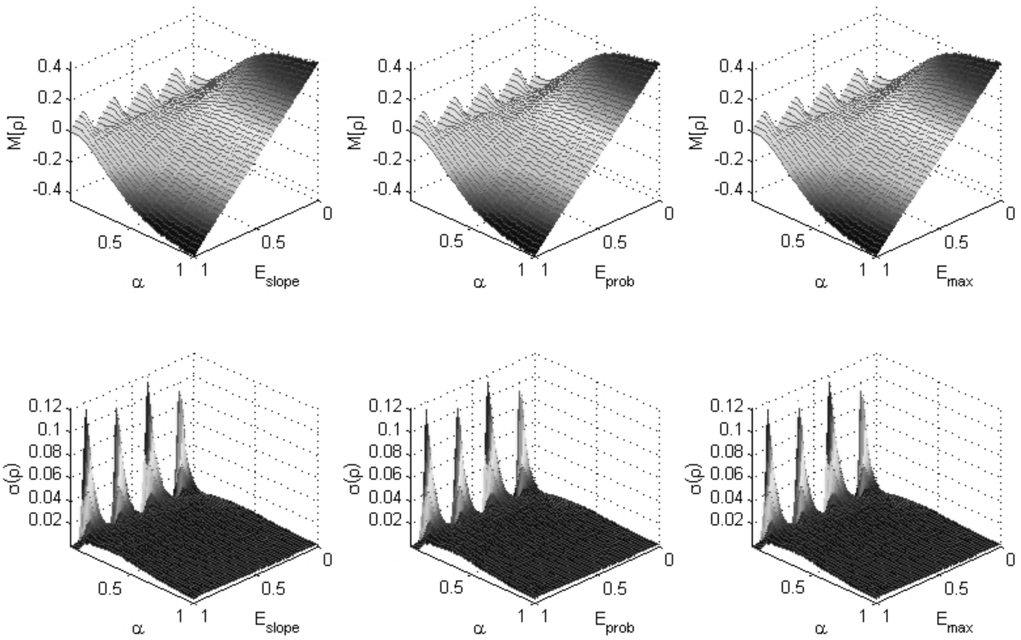

Рис. 5. *Зависимость ошибок восстановления параметров спектров от α для 5 базовых спектров.*

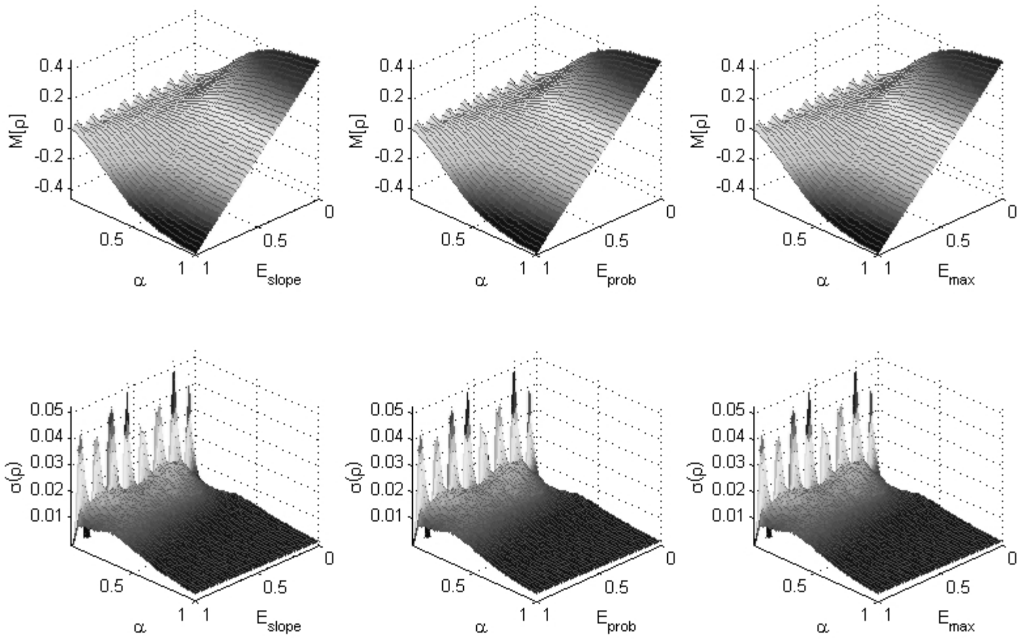

Рис. 6. *Зависимость ошибок восстановления параметров спектров от α для 9 базовых спектров.*

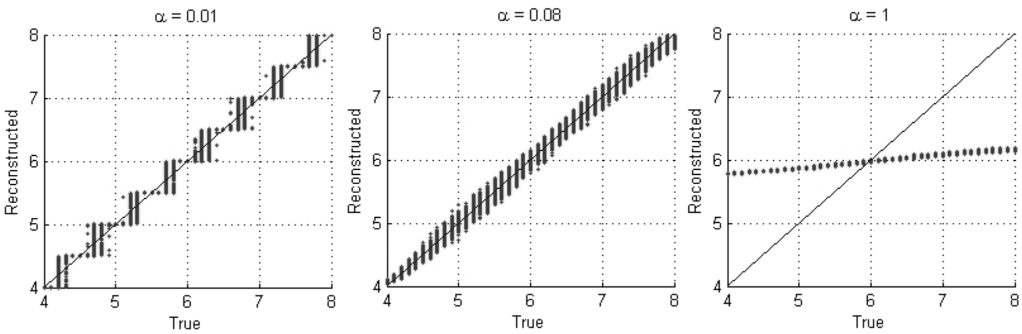

Рис. 7. *Регрессионные зависимости для параметра E_{slope} и 9 базовых спектров.*

В этой связи оптимальным является выбор наибольшего в данном эксперименте количества базовых спектров, т.е. 9, и значения α близким к 0.1. Используя найденные оптимальные, согласно описанным критериям, значения α и числа базовых спектров выполнен эксперимент, аналогичный описанному во введении (результаты см. рис. 1). В результате были получены графики, представленные на рис. 8, на которых видно, что с помощью НС возможно получать приемлемые решения задачи восстановления спектра пучка электронов на основе глубинного распределения заряда.

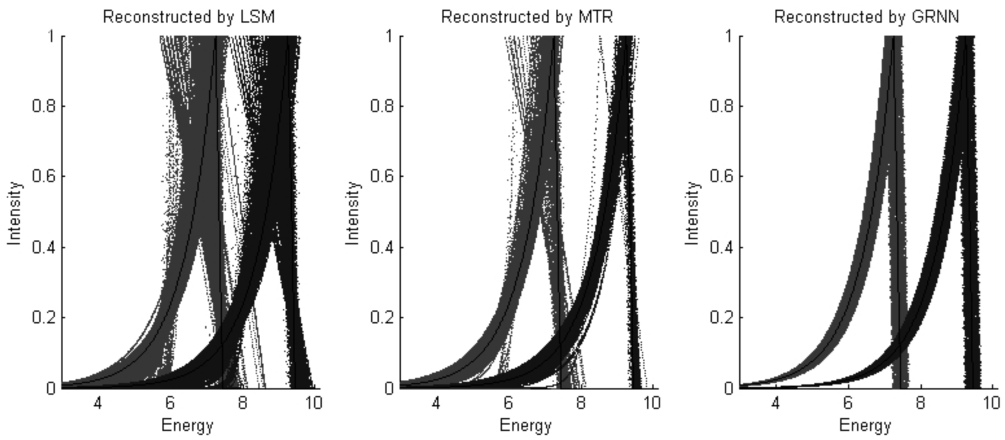

Рис. 8. *Спектры, восстановленные методом наименьших квадратов, регуляризации Тихонова и обобщенно регрессионной нейронной сетью с α 0.1 и 9 базовыми спектрами.*

4. Выводы

Определены значения ширины активационной функции обобщенно-регрессионной нейронной сети, для которых максимальна точность решения задачи восстановления спектра пучка электронов по измеренному распределению поглощенного заряда. Компьютерный эксперимент показал, что для значений $\sim = 0.1 \pm 0.03$ и 9 базовых спектров систематическая и статистическая ошибки минимальны.

Результаты исследования влияния числа базовых спектров на результаты восстановления показали, что увеличение числа последних приводит к уменьшению ошибки решения и позволили предположить, что существует максимальное число базовых спектров, увеличение которого не приводит к росту точности восстановления. Таким образом, дальнейшие исследования связаны с доказательством существования и решением задачи оптимизации.

ЛИТЕРАТУРА

1. Сизиков В.С. Математические методы обработки результатов измерений: Учебник для вузов. – СПб: Политехника, 2001. – 240с.
2. Michael M. Li, William Guo, Brijesh Verma, Kevin Tickle, John O’Connor Intelligent methods for solving inverse problems of backscattering spectra with noise: a comparison between neural networks and simulated annealing // Neural Computing & Applications. – 2009. – vol. 18. – pp. 423-430.
3. Баев А.Ю., Лазурик В.Т. Регуляризация процедуры определения энергии фотонов методами искусственного интеллекта // Вестник Харьковского национального университета. Сер. «Математическое моделирование. Информационные технологии. Автоматизированные системы управления». – 2010. – №890., вып. 13. – с.5-11.
4. Bishop Christopher M. Neural networks for pattern recognition. – New York: Oxford University Press Inc., 1996. – 482 p.

5. Haykin S. Simon Neural networks and learning machines. – New Jersey: Prentice Hall, 2009. – 936 p
6. Баев А.Ю., Лазурик В.Т. Нейросетевая регуляризация определения спектра электронов по распределению заряда // Труды Компьютерные науки для информационного общества, Луганск – 2010. – с.137-138
7. Specht Donald F. A General regression neural network // IEEE Transactions on Neural Networks. – 1991. – vol. 2, no. 6. – pp. 568-576.
8. Бодянский Е.В., Руденко О.Г. Искусственные нейронные сети: архитектуры, обучение, применения. – Харьков: ТЕЛЕТЕХ, 2004. – 369 с.
9. Park J., Sandberg I.W. Universal approximation using radial-basis-function networks // Neural Computation. – 1991. – 3. – pp. 246-257
10. Баев А.Ю., Лазурик В.Т., Починок А.В. Статистический подход к сравнению методов обработки экспериментальных данных // Вестник Херсонского национального технического университета, - 2010. – вып. 3(39). – С.53-57.
11. Valentina Lazurik, Tatsuo Tabata, Valentin Lazurik, A database for electron-material interactions // Radiation Physics and Chemistry. – 2001. – vol. 60 issue 3. – p. 161

Надійшла у першій редакції 01.09.2011, в останній – 29.09.2011.