

А. Д. Меньшикова¹, Г. В. Симонова¹*

Повышение точности обработки спектрограмм многокомпонентных газовых смесей на основе нейросетевых моделей

¹ Сибирский государственный университет геосистем и технологий, г. Новосибирск,
Российская Федерация
* e-mail: shtork00@inbox.ru

Аннотация. На сегодняшний день измерительные системы для определения качественного и количественного состава малых газовых примесей имеют важное значение в различных областях деятельности человека. Для повышения точности обработки спектров и их классификации используются нейронные сети, которые позволяют сочетать локальное выделение признаков и их глобальное пространственное расположение. В статье исследуются алгоритмы на основе нейросетевых моделей, которые позволят получить наибольшую точность обработки данных спектрограмм многокомпонентных газовых смесей. Экспериментальная проверка показала, что оптимальным решением для достижения поставленной цели является использование нейросети ResNet-34. Глубина такой нейронной сети позволяет учесть взаимовлияние многих признаков, найденных с помощью окон свертки малых размеров. С помощью предложенной методики обработки результатов спектров экспериментально была получена высокая точность по метрике «accu-gas», которая составила 88,8 %.

Ключевые слова: спектрограмма, газовый анализ, спектр, центральная нервная система, газоанализатор «HEALTHMONITOR», нейронная сеть

A. D. Menshikova¹, G. V. Simonova¹*

Improving the accuracy of spectrogram processing of multicomponent gas mixtures on the basis of neural network models

¹ Siberian State University of Geosystems and Technologies, Novosibirsk, Russian Federation
* e-mail: shtork00@inbox.ru

Abstract. To date, measurement systems for determining the qualitative and quantitative composition of small gas impurities are important in various fields of human activity. To improve the accuracy of spectra processing and classification, neural networks used, which allow combining local feature extraction and their global spatial location. The paper investigates algorithms based on neural network models that will allow obtain the highest accuracy of data processing of spectrograms of multicomponent gas mixtures. Experimental verification has shown that the optimal solution to achieve the set goal is the use of the ResNet-34 neural network. The depth of such a neural network allows taking into account the mutual influence of many features found using convolution windows of small sizes. Using the proposed method for processing spectra results, high accuracy in terms of the “accuracy” metric experimentally obtained, which amounted to 88.8 %.

Keywords: spectrogram, gas analysis, spectrum, central nervous system, HEALTHMONITOR gas analyzer, neural network

Введение

В настоящее время системы онлайн-скрининга газоздушных смесей и определение качественного и количественного состава малых газовых примесей в воздухе имеют важное значение в самых различных областях деятельности человека: медицине, спортивной диагностике, экологии, охране окружающей среды, производственном контроле.

Для повышения точности обработки спектров и их классификации могут применяться нейронные сети. Данное решение дает возможность сочетать локальное выделение признаков и их глобальное пространственное расположение на всем спектре. Спектроскопический метод включает в себя различные технологии, результаты которых могут быть обработаны с использованием нейронных сетей. Эти технологии включают лазерно-искровую эмиссионную спектроскопию, атомно-эмиссионную спектроскопию с индуктивно связанной плазмой, светоразрядную оптическую эмиссионную спектроскопию, инфракрасную спектроскопию.

Целью данной работы является повышение точности и скорости обработки результатов анализа газовой смеси на основе исследования сигнала покомпонентного разделения спектров газовой пробы с интеграцией нейросетевых технологий в процесс обработки на примере газоанализатора HEALTHMONITOR.

Задачей данной работы является подбор наиболее эффективного алгоритма для проведения спектрального анализа.

Использование предлагаемых технологий обеспечит возможность определения качественного и количественного состава малых газовых примесей в воздухе в режиме реального времени, позволит производить анализ газовой пробы с высокой точностью и чувствительностью измерения и непрерывно фиксировать показатели.

Перспективность использования нейросетевой обработки результатов газоанализа заключается в способности нейронных сетей к самостоятельному обучению, управлению технологическими процессами и определению признаков сходства, недоступных человеческому глазу. Предлагаемая в данной работе технология позволит добиться наилучших результатов в покомпонентном спектральном анализе, расширить область применения газоанализа, а также сделать процесс более простым и достоверным.

Методы и материалы

Для решения поставленной задачи необходимо обосновать выбор оборудования, для получения экспериментальных данных Аппарат HEALTHMONITOR отвечает таким требованиям, поскольку позволяет снимать спектры чистой плазмы до начала анализа газовой пробы, исключая ее влияние [1]. Так как плазма сама по себе нестабильна, то одной из рабочих гипотез было использование спектра анализируемой пробы, поделенной на спектр чистой плазмы в аппарате. Теоретически это позволяет подстроиться под меняющуюся среду в анализаторе. Практически же это приводит к нивелированию некоторых газовых спектров, в результате точность ди-

агностики падает на 15 %. Поэтому для эффективного использования результатов газового анализа, исследования для данной работы выполнялись на спектрах анализируемой пробы оптимального насыщения [2].

Для достижения поставленной цели было сформировано классовое пространство идентификационных признаков для каждого компонента. Материалом для обоснования такого выбора служила известная корреляционная матрица между идентификационными пиками спектра, относящимися к разным газовым компонентам смеси (табл. 1). Очень высокий коэффициент корреляции (обозначен серым) не позволяет линейно разделить эти классы с помощью гиперплоскости. Это возможно только в нелинейном исполнении, но сопряжено с трудностями построения признакового пространства. Поэтому было принято решение для обоснования предлагаемой методики идентификации спектров разных веществ ограничиться вариантом бинарной классификации с разделением идентификационных пиков с тоннельным ограничением и опорной привязкой к результатам, полученным с газового хроматографа [3].

Таблица 1

Фрагмент матрицы корреляций спектров разных классов

M1984	1							
M2052	0,814287	1						
M2059	0,789757	0,997676						
M2064	0,790576	0,997726	1					
M2084	0,785099	0,996441	0,999803	1				
M2088	0,802337	0,998779	0,999226	0,998862	1			
M2091	0,83484	0,996962	0,993964	0,992754	0,99608	1		
M2096	0,80103	0,998222	0,999551	0,99921	0,999477	0,996319	1	
M2101	0,790216	0,997209	0,999902	0,999892	0,999181	0,993972	0,999563	1

Еще одним фактором, влияющим на точность покомпонентного разделения, является влияние методики перманентного снятия пробы, без перерывов на очистку газоразрядной ячейки, что в свою очередь влияет на интенсивность свечения летучих органических соединений (ЛОС). Этот фактор был учтен при выборе топологии нейронной сети для классификации. Также разрабатываемая методика идентификации веществ должна позволять учесть разницу между номинальной и реальной функцией преобразования, выражающейся в смещении пиков на спектрограмме в пределах ± 5 пикселей [4].

Таким образом, проведенный предварительный анализ данных позволил сформулировать следующие требования для постановки измерительного эксперимента и последующей обработки данных:

- для получения достоверных экспериментальных данных необходимо использовать спектры проб оптимального насыщения, получаемых в момент, когда большинство ЛОК, являющихся компонентами смеси, будут иметь высокую интенсивность;

– линейная неразделимость классов и очень высокие коэффициенты корреляции между разными классами требуют использования признаков классификаторов. На данном этапе исследования предлагаемой методики разделения компонент газовых смесей с применением нейронной сети производится только разделение идентификационных пиков с тоннельным ограничением и опорной привязкой к результатам, полученным с газового хроматографа;

– влияние перманентного снятия пробы без перерывов на очистку газоразрядной ячейки и смещение пиков также требует использования признакового классификатора и накладывает ограничения на построение признакового пространства.

Архитектура нейронной сети

В настоящее время только один тип признаков классификаторов позволяет учесть обозначенные выше особенности – это нейронные сети. Одним из способов учесть особенности покомпонентного разделения газов и избежать обозначенной проблемы является нестандартная процедура формирования входа нейронной сети. Всегда на вход нейросети классификации спектров подается числовой ряд, т.е. сам спектр. Предлагается подавать на вход нейросети изображение спектра. В этом случае, колебания по оси y , на рис. 1, с одной стороны сглаживаются, с другой позволяют более точно расположить окно свертки для выявления признака, колебания по оси x на рис. 1 можно учесть за счет применения операции пулинга [5, 6].

Входное изображение спектра имеет размеры 2048×1929 пикселей, выполненное линией одинарной толщины. На рис. 1 приведен пример такого изображения (по вертикали определяется интенсивность свечения спектра, по горизонтали длина волны), зафиксированного на газоанализаторе HEALTHMONITOR.

Такое построение входа позволяет применить хорошо исследованные нейронные сети классификации изображений [7, 8].



Рис. 1. Пример спектра анализируемой пробы

При классификации спектров с помощью трехслойного персептрона возникает высокий риск к переобучению нейронной сети, когда сеть не обобщает при-

меры и не выделяет специфические признаки. Это подтверждается отсутствием сходимости ошибки на обучающей (верхняя кривая) и тестовой (нижняя кривая) выборке (рис. 2).

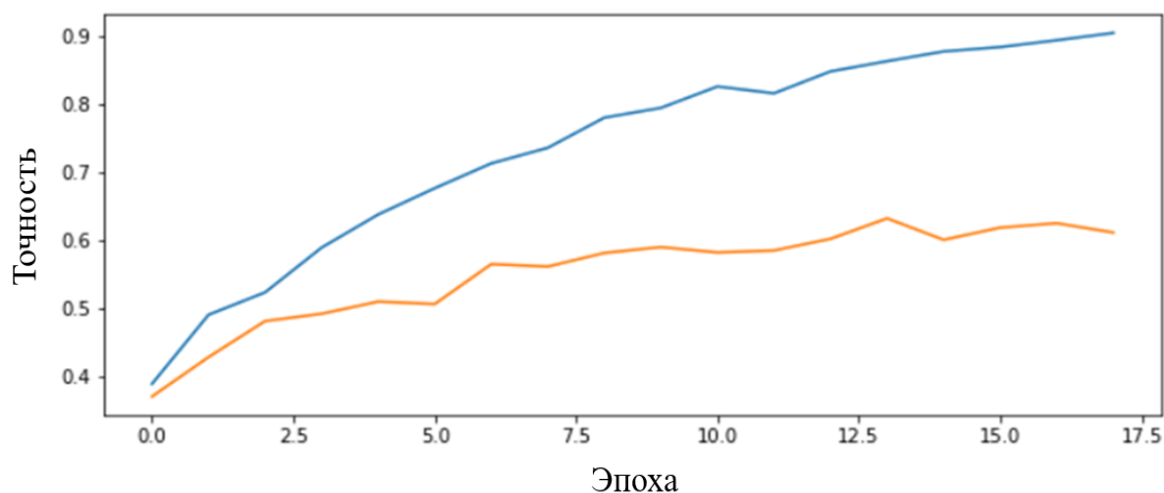


Рис. 2. Графики ошибок обучения на обучающей и тестовой выборках

На основании данного графика можно сделать вывод, что класс многослойных персептронов не удовлетворяет требованиям эксперимента.

Вследствие проведенного анализа оптимальной архитектурой для классификации изображений спектров можно считать ResNet-34 по ряду причин:

- глубина такой нейронной сети позволяет учесть взаимовлияние многих признаков, найденных с помощью окон свертки малых размеров;
- наличие связей через каждые 2 слоя позволяет избежать проблемы затухающих градиентов, что положительно сказывается на сходимости модели. Это позволяет гарантировать обучение нейронной сети на разделение классов характеристических линий каждого компонента анализируемой газовой смеси и ускорить этот процесс;
- вышеназванные факторы позволяют учесть действительно уникальные признаки каждого класса при высоком многообразии обучающих примеров [9, 10].

Методика эксперимента

Для подтверждения правильности предлагаемого метода был проведен ряд экспериментов, в которых использовалось два прибора хроматограф «Хромопласт» и «Рубин 2 – И», которые формировали массив экспериментальных данных спектров исследуемых смесей.

Важным этапом экспериментов являлось подтверждение или опровержение варианта рандомизированного получения верного ответа нейросетью классов идентификационных пиков без выявления закономерности. Это показывают ROC-кривые: чем ближе кривая к верхнему левому углу, тем более закономерным является поведение классификатора. Если кривая колеблется около пунк-

тирной линии, то это означает случайное угадывание. Как видно на рис. 4, обученная нейронная сеть может выявлять закономерности в различении классов для разных модельных смесей (сплошные линии).

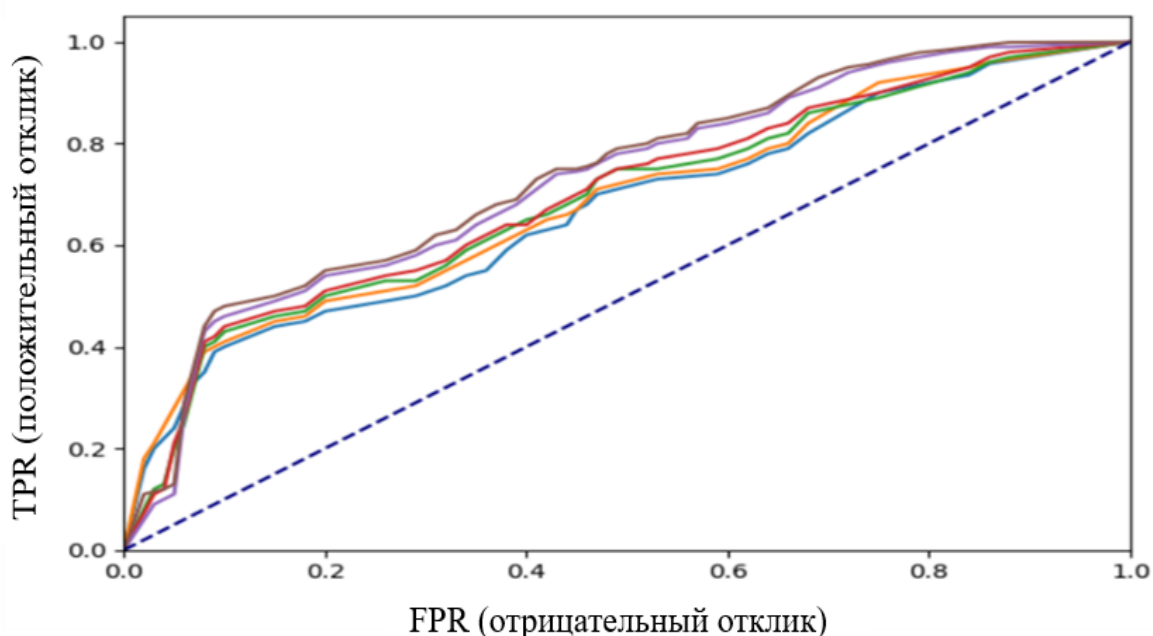


Рис. 3. ROC-кривые для спектров газовой смеси разного состава

Анализируя спектры выдоха человека, нейросеть оценивает весь спектр, выбирая все ЛОС, находящиеся в доступности для детектирования на газоанализаторе. Нейросеть охватывает не только интенсивность вклада каждого пика, но и их соотношение и общий рисунок спектра. Таким образом, мы создаем именно ту архитектуру нейросети, которая будет отвечать заданным при обучении параметрам:

- отличать группы органических соединений;
- нивелировать спектральные отличия внутри группы, идентифицировать каждый газ отдельно.

Результаты

Для непосредственной проверки точности возможности покомпонентного разделения идентификационных пиков было проведено десять экспериментов (второй и третий проводились на одном аппарате с разницей в несколько недель, четвертый – на трех разных аппаратах).

Результаты экспериментов приведены в табл. 2.

Результаты проверки точности возможности покомпонентного разделения газовой смеси

Аппараты для получения спектров	Количество снятых спектров многокомпонентной газовой смеси	Точность классификации, %
эталон	1064	85,37
1	1171	86,00
1	2103	87,14
2	1171	86,30
2	2103	87,56
3	1171	85,45
3	2103	86,73
1,2,3	3812	88,80

Результаты снятия спектров газовых проб трех газоанализаторов сравнивались с предварительно обученным и прошедшим поверку аппаратом. В табл. 2 приведены средние значения точности классификации спектров по каждому из десяти экспериментов.

Таким образом, точность по метрике «ассурасу» составила 88,80 %, что говорит о хороших результатах в разделении двух типов классов (по составу газовой смеси).

Заключение

На основании полученных результатов можно сделать вывод, что классификация непосредственно спектров с помощью трехслойного персептрона позволяет достичь точности по метрике «ассурасу» в 52 %, что очень мало для скринингового исследования. Для повышения достоверности результатов анализов спектров, в данной работе использовалась специально обученная нейросеть ResNet-34. С помощью предложенной методики обработки результатов спектров экспериментально была получена высокая точность по метрике «ассурасу», которая составила 88,8 %, что говорит о хороших результатах в разделении двух типов классов (по составу газовой смеси), а также подтверждает правильность выбора нейросетевой модели.

Предложенный в данной работе метод обработки результатов с применением нейросети позволит получить не только быстрый, но и низкий по себестоимости способ определения компонентного состава газа.

В рамках данного исследования планируются дальнейшая работа в направлении использования спектроскопии тлеющего разряда в воздухе в видимом диапазоне спектра для медицинской и спортивной диагностики, а также организация производства газоанализатора.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. HEALTHMONITOR / [Электронный ресурс] // HealthNet: [сайт]. – URL: <https://healthmonitor.pro/ru/> (дата обращения: 13.04.2024).

2. E. Ewusi-Annan, D. M. Delapp, R. C. Wiens, and N. Melikechi. Automatic preprocessing of laser-induced breakdown spectra using partial least squares regression and feed-forward artificial neural network // Applications to Earth and Mars data, Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy. – vol. 171. – p. 105930. doi: 10.1016/j.sab.2020.105930.
3. Гуськова В. П. Хроматографические методы разделения и анализа: учебное пособие / В. П. Гуськова, Л. С. Сизова. – 2-е изд., испр. и доп. – Кемерово : КемГУ, 2015. – 148 с.
4. Краснокутская Е. А. Спектральные методы исследования в органической химии : учебное пособие / Е. А. Краснокутская, В. Д. Филимонов. – Томск : ТПУ, [б. г.]. – Часть II : ЯМР-спектроскопия, масс-спектрометрия – 2013. – 88 с.
5. Гудфеллоу Я. Глубокое обучение / Я. Гудфеллоу, И. Бенджио, А. Курвилль ; перевод с английского А. А. Слинкина. – 2-е изд. – М. : ДМК Пресс, 2018. – 652 с.
6. Гольдберг Й. Нейросетевые методы в обработке естественного языка : руководство / Й. Гольдберг ; перевод с английского А. А. Слинкина. – М. : ДМК Пресс, 2019. – 282 с.
7. Фомичева С. Г. Методы машинного обучения в задачах обеспечения информационной безопасности : учебное пособие / С. Г. Фомичева. – СПб. : ГУАП, 2023. – 136 с.
8. Запечников С. В. Основы интеллектуального анализа данных и машинного обучения: Конспект лекций : учебное пособие / С. В. Запечников. – М. : НИЯУ МИФИ, 2022. – 136 с.
9. Хливненко Л. В. Практика нейросетевого моделирования : учебное пособие для вузов / Л. В. Хливненко, Ф. А. Пятакович. – 4-е изд., стер. – СПб. : Лань, 2024. – 200 с.
10. Соробин А. Б. Сверточные нейронные сети: примеры реализаций : учебно-методическое пособие / А. Б. Соробин. – М. : РТУ МИРЭА, 2020. – 159 с.
11. Алексейчук А. С. Введение в нейронные сети: модели, методы и программные средства : учебное пособие / А. С. Алексейчук. – М. : МАИ, 2023. – 105 с.
12. Ферлитш Э. Шаблоны и практика глубокого обучения / Э. Ферлитш ; перевод с английского А. В. Логунова. – М. : ДМК Пресс, 2022. – 538 с.

© А. Д. Меньшикова, Г. В. Симонова, 2024