

“Использование методов на основе глубоких нейронных сетей для идентификации и декомпозиции гамма-излучающих нуклидов в сложносоставных спектрах”

В последние годы наблюдается тенденция на использование методов машинного и глубокого обучения для самых различных задач науки и техники.

При этом, в ряде областей эти методы, несмотря на все возложенные на них ожидания, показывают весьма скромный результат.

В данной работе мы оцениваем применимость методов машинного обучения в приложении к задачам идентификации гамма-излучающих нуклидов и обработке сложносоставных спектров. Цель работы – показать, что напротив, методы на основе ИИ весьма успешно дополняют "классические" подходы и справляются с их ограничениями.

Предположение, что методы глубокого обучения смогут внести существенный вклад в решение задач идентификации в этой области, основывается на нескольких факторах:

- По своей сути методы глубокого обучения пытаются имитировать работу человека и головного мозга (нейроны, нейронные связи, обучение и поиск паттернов). Поэтому эти методы особенно хорошо работают там, где в решаемой задаче помимо понятной расчетно-алгоритмической части (например, при решении ОДУ или уравнений в частных производных), имеется математически плохо формализованный поиск паттернов.
Как оказалось, при использовании специалистами по спектрометрии классического подхода идентификации, помимо формального алгоритмизованного процесса выделения пиков, применяется шаг сопоставления найденных пиков с имеющимися библиотеками нуклидов. При этом, для получения финального списка гамма-нуклидов, входящих в состав анализируемой смеси, специалистами используется достаточно большое количество эвристик [1]. Соответственно, у методов глубокого обучения есть потенциал для того, чтобы успешно научить машину этим эвристикам. Это в итоге продвинет нас к большей автоматизации процесса разбора гамма-спектров.
- Методы глубокого обучения требуют очень большого объема данных для обучения (data-hungry). Однако, в области гамма-спектроскопии имеется большое количество как реально измеренных, так и синтетических данных, полученных из программ моделирования физики процесса Geant4, GADRAS-DRF и пр. Немаловажно, что эти данные размечены: построено сопоставление “результат измерения – нуклид”. Это позволяет успешно собрать репрезентативные данные для обучения моделей.
- В области гамма-спектроскопии имеется потенциальная возможность с помощью машинного обучения построить человеко-ориентированные классификаторы и методы декомпозиции спектров. Даже если в этой области не будет достигнута 100% автоматизация, где машина полностью заменит человека, построение таких классификаторов уже будет существенным упрощением задачи. Функция машины – выполнить достаточное количество предварительной работы по выделению характеристик, по которым либо она сама, либо человек сможет сделать разбор и анализ спектра. Особенно это актуально для разбора сложносоставных спектров, с 4-мя и более нуклидами).

В нашей работе мы показываем текущие результаты применения глубокого обучения на свёрточных архитектурах (CNN) и на архитектурах 1D U-Net. Мы анализируем, насколько эти архитектуры помогли

продвинуться вперед в решении задач разбора спектров, а также делаем вывод, как можно улучшить текущий подход и архитектуры в соответствии с задачей построения интерпретируемых человеком классификаторов, как описано выше.

[1] Kamuda, M., Zhao, J., & Huff, K. (2020). A comparison of machine learning methods for automated gamma-ray spectroscopy. In Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment (Vol. 954, p. 161385). Elsevier BV. <https://doi.org/10.1016/j.nima.2018.10.063>

[2] G. Marcus, "Deep Learning: A Critical Appraisal." arXiv, 2018. doi: 10.48550/ARXIV.1801.00631.