

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЭЛЕМЕНТОВ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА ДЛЯ УСОВЕРШЕНСТВОВАНИЯ МЕТОДИКИ РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНОГО АНАЛИЗА

Драчук С.И., Настиченко М.Р., Решетняк М.В.

*Национальный технический университет
«Харьковский политехнический институт»,
г. Харьков*

Аппроксимация профиля каждой аналитической линии является ключевым звеном в решении задачи полнопрофильного анализа рентгеновского спектра. Традиционно при обработке рентгенограмм в качестве модельных использовались колоколообразные функции с распределением близким к нормальному: Гаусса, Коши и др. Хотя аппроксимация одной аналитической функцией привлекает простотой автоматизации процесса подгонки спектра, она может приводить к нахождению весьма интенсивных "лишних" линий.

Приступая к разработке нейросетевого решения, как правило, сталкиваются с проблемой выбора оптимальной архитектуры нейронной сети. Так как области применения наиболее известных парадигм пересекаются, то для решения конкретной задачи можно использовать различные нейронные сети, и при этом результаты могут оказаться одинаковыми. Будет ли та или иная сеть лучше и практичнее, зависит в большинстве случаев от конкретных условий. Мы рассмотрели решение задачи аппроксимации экспериментальных данных с помощью искусственных нейронных сетей (ИНС) следующих типов: многослойного персептрона, сетей радиально-базисными функциями (RBF), вероятностных сетей, обобщенно-регрессионных сетей (GRNN) и нечетких нейронных сетей.

В качестве критерия правильности аппроксимации используется величина средней остаточной невязки. Она рассчитывается по формуле:

$$\bar{\varepsilon} = \frac{\left(\sum_{j=1}^N [y_i - I(x_i)]^2 \right)}{\sum_{j=1}^N [y_i]^2} \times 100\% ,$$

где y_i - экспериментальный массив величин интенсивности, x_i - массив углов, N - число точек рентгеновского профиля; $I(x_i)$ - величины интенсивности для углов x_i , полученные с помощью модельного расчета по выбранной аппроксимирующей функции.

В ходе работы было разработано программное обеспечение средствами математического пакета MATLAB и в среде программирования Delphi 7 с использованием библиотеки FANN.

Аппроксимация формы одиночных спектральных линий с помощью ИНС позволяет уменьшить невязку до 1–2% и менее. Дополнительным преимуществом применения ИНС для аппроксимации аналитических линий является возможность таким образом построить и обучить нейронную сеть по имеющимся эталонам, чтобы в последующем моделировать не только эти линии, но и те, которые не были использованы для обучения.