

09.1;10;03

Возможность распознавания сложных спектральных характеристик оптического пробоя с использованием нейронных сетей

© А.В. Буланов

Тихоокеанский океанологический институт им. В.И. Ильичева ДВО РАН, Владивосток, Россия
E-mail: a_bulanov@me.com

Поступило в Редакцию 20 сентября 2023 г.

В окончательной редакции 17 октября 2023 г.

Принято к публикации 17 октября 2023 г.

Предложен метод анализа сигналов лазерно-искровой спектроскопии пробоя с использованием искусственных нейронных сетей. Показана возможность использования искусственных нейронных сетей для распознавания сложных спектральных характеристик в задачах лазерно-искровой спектроскопии морских акваторий *in situ* на примере оценки вклада растворенного органического и неорганического углерода в карбоновом полигоне.

Ключевые слова: оптический пробой, лазерно-искровая спектроскопия, спектральные линии, оптоакустические эффекты, ультразвук, метод главных компонент, нейросети.

DOI: 10.61011/PJTF.2024.02.56976.19733

Лазерно-искровая спектроскопия, или спектроскопия лазерно-индуцированного пробоя (ЛИС, англ. LIBS), представляет собой разновидность атомно-эмиссионной спектроскопии, связанной с генерацией плазмы путем фокусировки лазерного импульса на поверхности конденсированной среды или газа, рассеянное излучение которой регистрируется с помощью высокочувствительного спектрометра [1]. Лазерно-искровая спектроскопия продемонстрировала большой потенциал в качественном и количественном анализе, она также обладает многими преимуществами, связанными с оперативным химическим анализом [1–7]. За последние несколько десятилетий метод ЛИС быстро развивался. Химические элементы могут быть обнаружены в различных агрегатных состояниях образцов, т.е. независимо от того, является образец твердым [1–3], жидким [4,5,7,8] или газообразным [6]. Однако следует отметить, что ЛИС для жидкостей развита слабее, чем для твердых тел. В первую очередь это связано с трудоемкостью обработки спектров пробоя с учетом многочисленных факторов транспортировки излучения через жидкость. Ранее в работах [9,10] было показано, что использование ультразвука для создания зоны сжатия и растяжения жидкости при одноимпульсном лазерном пробое приводит к усилению интенсивности линий. Это является некоторой модификацией стандартной ЛИС, обозначенной здесь как ультразвуковая ЛИС. Атомные спектры химических элементов пробоя внутри жидкости в силу мощного самопоглощения и других сопутствующих механизмов являются, как правило, сильно уширенными, и интенсивность зарегистрированной линии в таком случае сильно затрудняет возможность количественного анализа. В работах [10,11] была предложена методика уменьшения зависимости возрастающего нежелательного эффекта взрывного вскипания и нестабильности поверхности водных растворов от увеличения энергии,

связанная с разделением плазменных фронтов, что частично снимает данную проблему.

Вместе с тем необходимо отметить, что оперативная обработка многочисленных спектров, полученных в результате измерений оптического пробоя, связана с проведением детального анализа и является в значительном числе случаев трудоемкой процедурой. Стремительное развитие актуальных тенденций, связанных с использованием нейросетей и алгоритмов машинного обучения, может прийти на помощь и позволить выполнить более точную классификацию, регрессию, кластеризацию и другие операции с выборками для получения информации о спектре и исследовании вещества [12,13].

В настоящей работе для дальнейшего повышения чувствительности метода ЛИС предложен анализ сигналов пробоя с применением искусственных нейронных сетей (ИНС), который использовался для оценки вклада растворенного органического и неорганического углерода в карбоновом полигоне.

Метод предусматривает обработку данных в несколько последовательных этапов. На первом этапе данные приводятся в определенную форму после предварительной обработки, описанной далее, т.е. исходные данные не используются напрямую без обработки. На втором этапе при обработке ЛИС-сигналов распространенными подходами являются вычитание фона, усреднение и нормализация. Эти комбинации подходов помогают снизить отклонения интенсивности сигнала и уменьшить ошибку ЛИС, вызванную изменениями мощности лазера, временными отклонениями, разницей в фокусном расстоянии и состоянием поверхности образца. Тем не менее простая обработка сигналов не дает спектрам форму, подходящую для использования в качестве входных данных для искусственных нейронных сетей. Для адаптации сигналов к требованиям использования ИНС применены несколько иные подходы обработки сигналов.

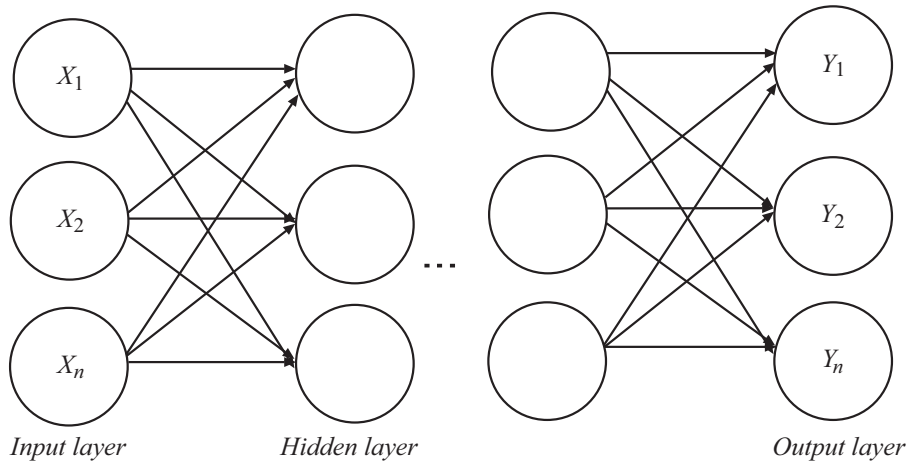


Рис. 1. Искусственная нейронная сеть, использованная в настоящей работе.

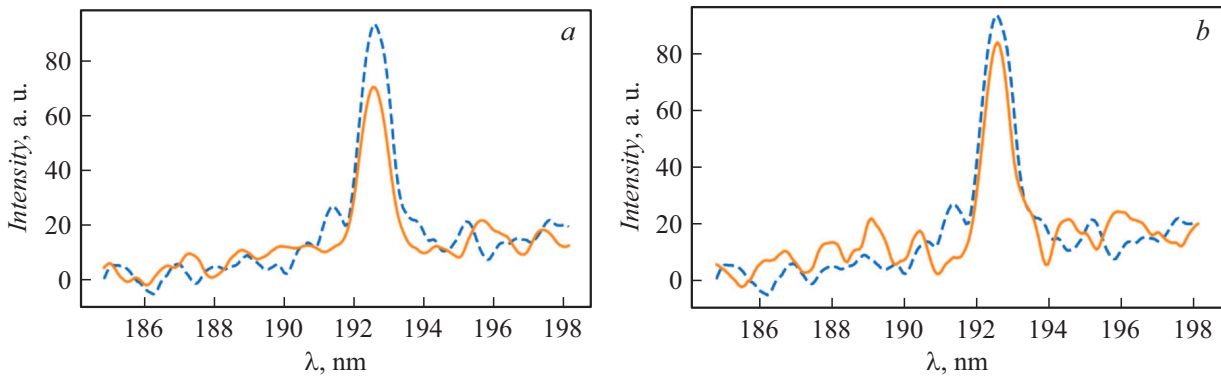


Рис. 2. Использование ИНС для повышения чувствительности метода ЛИС при регистрации интенсивности атомарной линии углерода СІ на длине волны 193 nm.

Первый подход предусматривает, что для успешного обучения ИНС должно использоваться возможно большее накопление данных, чтобы избежать их чрезмерной подгонки. На практике накопление большой выборки данных проводилось с применением проточного искрового спектрометра, который был успешно использован в двух экспедициях в Японском море и Татарском проливе в период рейса № 81 НИС „Профессор Гагаринский“ в августе 2022 г. и в Атлантическом океане в период рейса № 52 НИС „Академик Борис Петров“ в октябре-декабре 2022 г.

Второй подход заключался в применении нормализации по суммарной интенсивности всего спектра. При вычитании фона на ранней стадии образования плазмы наблюдается сильный сплошной спектр из-за высокой плотности плазмы в жидкости. Для коррекции базовой линии каждый спектр был разделен на несколько секций в зависимости от наблюдаемого спектрального диапазона.

Третий подход, успешно продемонстрированный рядом авторов [6–10], заключается в использовании логарифмического распределения интенсивности пиков после предыдущего шага. Отметим, что нелинейные эффекты, обусловленные самопоглощением спектральных

линий, по-прежнему вносят мощные искажения, и методы коррекции самопоглощения ЛИС-спектров очень важны для количественных и качественных оценок при использовании лазерно-искровой спектроскопии.

Модель искусственной нейронной сети, которая демонстрируется в настоящей работе, представляет собой ИНС, включающую многослойный персептрон из трех типов слоев: входного слоя, нескольких скрытых слоев и выходного слоя (рис. 1). Отметим, что количество нейронов во входном слое равно размеру входного сигнала, а количество нейронов в выходном слое равно количеству выборок для идентификации. Количество слоев и нейронов для каждого скрытого слоя настраивалось с учетом характеристик базы данных регистрируемых элементов.

Модель была реализована на языке Python с использованием TensorFlow™ [14], а веса и смещения этой модели были оптимизированы с помощью алгоритма обратного распространения. Далее приведены примеры использования ИНС с применением данной модели.

На рис. 2 штриховой линией показаны однократные регистрации интенсивности атомарной линии углерода СІ на длине волны 193 nm, полученной *in situ* в двух экспедициях в Японском море и Татарском проливе

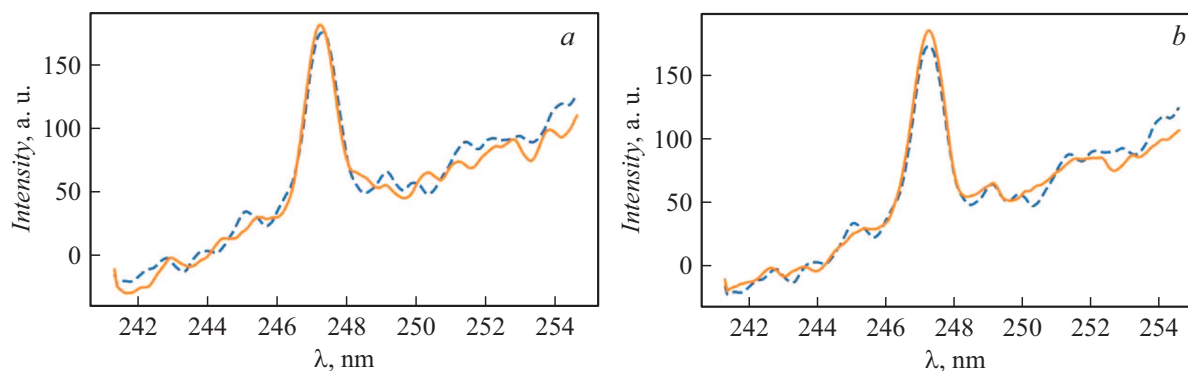


Рис. 3. Использование ИНС для повышения чувствительности метода ЛИС при регистрации интенсивности атомарной линии углерода СІ на длине волны 248 nm.

в период рейса № 81 НИС „Профессор Гагаринский“ в августе 2022 г. и в Атлантическом океане в период рейса № 52 НИС „Академик Борис Петров“ в октябре-декабре 2022 г.

На рис. 2, *a* сплошной линией показан результат усреднения по 30 реализациям (по 30 выстрелам лазера), полученным в одной и той же географической координате. На рис. 2, *b* показан результат обработки сигнала искусственной нейронной сетью. Как видно из рис. 2, *a*, накопление данных с использованием проточного спектрометра увеличивает эффективность обнаружения углерода, однако дополнительное использование ИНС, показанное на рис. 2, *b*, повышает чувствительность метода ЛИС.

На рис. 3, *a* и *b* показаны аналогичные результаты использования ИНС для повышения чувствительности метода ЛИС при регистрации интенсивности атомарной линии углерода СІ на длине волны 248 nm в указанных выше экспедициях.

Таким образом, на реальном примере углеродного анализа морской среды продемонстрировано успешное применение ИНС, которое позволило частично компенсировать матричные эффекты и самопоглощение при анализе искровых спектров и повысить чувствительность метода ЛИС. Предложенный метод использования ИНС для распознавания сложных спектральных характеристик в задачах ЛИС в режиме реального времени позволяет делать оценку экологичности морских акваторий при мониторинге и исследованиях *in situ*.

Финансирование работы

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-22-20075 (<https://rscf.ru/project/22-22-20075/>).

Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] D.A. Cremers, L.J. Radziemski, *Handbook of laser-induced breakdown spectroscopy*, 2nd ed. (John Wiley & Sons, Chichester, 2013).
- [2] S. Musazzi, U. Perini, *Laser-induced breakdown spectroscopy*. Springer Ser. in Optical Sciences (Springer-Verlag, Berlin–Heidelberg, 2014), vol. 182. DOI: 10.1007/978-3-642-45085-3
- [3] R. Noll, *Laser-induced breakdown spectroscopy: fundamentals and applications* (Springer, Berlin, 2012). DOI: 10.1002/0470093013
- [4] A. De Giacomo, M. Dell’Aglia, R. Gaudiuso, S. Amoroso, O. De Pascale, *Spectrochim. Acta B*, **78**, 1 (2012). DOI: 10.1016/j.sab.2012.10.003
- [5] B.Y. Xue, Y. Tian, Y. Lu, Y. Li, R.E. Zheng, *Spectrochim. Acta B*, **151**, 20 (2019). DOI: 10.1016/j.sab.2018.11.005
- [6] B.Y. Xue, N. Li, Y. Lu, Y.D. Li, R.E. Zheng, *Appl. Phys. Lett.*, **110**, 101102 (2017). DOI: 10.1063/1.4977893
- [7] A.A. Il’in, O.A. Bukin, A.V. Bulanov, I.G. Nagornyi, S.S. Golik, E.N. Baulo, *Atmos. Ocean. Opt.*, **22**, 551 (2009). DOI: 10.1134/S102485600905008X
- [8] O.A. Bukin, P.A. Salyuk, A.Yu. Maior, S.S. Golik, A.A. Il’in, A.V. Bulanov, E.N. Baulo, D.A. Akmaikin, *Atmos. Ocean. Opt.*, **23**, 328 (2010). DOI: 10.1134/S1024856010040135
- [9] А.В. Буланов, И.Г. Нагорный, Е.В. Соседко, Письма в ЖТФ, **43** (16), 55 (2017). DOI: 10.21883/PJTF.2017.16.44933.16650 [A.V. Bulanov, I.G. Nagorny, E.V. Sosedko, *Tech. Phys. Lett.*, **43** (8), 753 (2017). DOI: 10.1134/S1063785017080156].
- [10] А.В. Буланов, И.Г. Нагорный, Е.В. Соседко, Письма в ЖТФ, **45** (23), 34 (2019). DOI: 10.21883/PJTF.2019.23.48717.17586 [A.V. Bulanov, I.G. Nagorny, E.V. Sosedko, *Tech. Phys. Lett.*, **45** (12), 1200 (2019). DOI: 10.1134/S1063785019120034].
- [11] А.В. Буланов, Е.В. Соседко, Докл. РАН, **491** (1), 92 (2020). DOI: 10.31857/S2686739720030020 [A.V. Bulanov, E.V. Sosedko, *Dokl. Earth Sci.*, **491** (1), 183 (2020). DOI: 10.1134/S1028334X20030022].
- [12] А.В. Буланов, И.Г. Нагорный, Е.В. Соседко, Письма в ЖТФ, **47** (5), 12 (2021). DOI: 10.21883/PJTF.2021.05.50669.18598 [A.V. Bulanov, I.G. Nagornyi, E.V. Sosedko, *Tech. Phys. Lett.*, **47**, 227 (2021). DOI: 10.1134/S1063785021030068].
- [13] *Atomic Spectra Database*. DOI: 10.18434/T4W30F
- [14] *Keras* [Электронный ресурс]. <https://keras.io>