

УДК 378:004+53.05

**Степан Величко**

доктор педагогічних наук, професор, професор кафедри фізики та інтегративних технологій навчання  
Уманський державний педагогічний університет імені Павла Тичини, м. Умань, Україна  
ORCID ID 0000-0002-1692-9741  
*spvelychko@gmail.com*

**Ігор Величко**

інженер-програміст  
Data Art, м. Київ, Україна  
ORCID ID 0000-0003-0785-4538  
*igor.s.velychko@gmail.com*

**Сергій Ковальов**

кандидат педагогічних наук, викладач кафедри вищої математики та фізики  
Центральноукраїнський національний технічний університет, м. Кропивницький, Україна  
ORCID ID 0009-0002-3922-8697  
*kovalyovserggr@ukr.net*

**Юрій Ковальов**

кандидат технічних наук, доцент, доцент кафедри фізико-математичних дисциплін та застосування  
інформаційних технологій в авіаційних системах  
Льотна академія Національного авіаційного університету, м. Кропивницький, Україна  
ORCID ID 0000-0002-1729-2033  
*yukovalyov@ukr.net*

## ВИКОРИСТАННЯ НЕЙРОННИХ МЕРЕЖ ДЛЯ РОЗПІЗНАВАННЯ ОПТИЧНИХ СПЕКТРІВ У НАВЧАЛЬНОМУ ПРАКТИКУМІ З ОСНОВ СПЕКТРАЛЬНОГО АНАЛІЗУ

**Анотація.** У статті аналізується ідея застосування штучного інтелекту у вигляді моделі штучної нейронної мережі для автоматичного розпізнавання оптичних спектрів, які реєструються традиційним спектральним обладнанням. У викладеному матеріалі особлива увага приділяється логіці побудови структури нейронних мереж, які орієнтовані на виділення ознак диференціації оптичних спектрів різних хімічних елементів. Розглянутий матеріал передбачає дослідження ефективності запропонованих структур нейронних мереж на основі реалізації їх навчання методом градієнтного спуску. Автори розглядають особливості застосування нейронних мереж для розпізнавання оптичних спектрів і в методичній площині, а саме для створення відповідного відділення чи центру в закладах вищої освіти України, де виконуються дослідницькі роботи і лабораторний практикум зі спектрального аналізу і спектроскопії. Створений у такий спосіб практикум передбачає ознайомлення студентів з основами спектроскопії, виконання серії важливих робіт у цій галузі діяльності людини та з таким потужним сучасним дослідницьким інструментом, яким є штучний інтелект у вигляді штучної нейронної мережі з елементами програмування на основі Python, та їх впровадженням у навчальний фізичний експеримент. Аналізується робота з лабораторного практикуму на основі використання моделі штучної нейронної мережі, який дає студентам елементарні уявлення про будову і дію цієї моделі та можливості реалізації її в ході дослідження спектроскопічних закономірностей оптичного діапазону, а також можливості створення на їх основі відділення чи центру для вивчення основ спектрального аналізу і спектроскопії в умовах закладу вищої освіти України. Запропоновано лабораторну роботу, яка передбачає вивчення методів автоматичної класифікації експериментальних даних на прикладі розпізнавання оптичних спектрів гелію та неону.

**Ключові слова:** штучна нейронна мережа; будова і робота; навчання; оптичні спектри; розпізнавання; робота з фізичного практикуму.

### 1. ВСТУП

**Постановка проблеми.** У першій чверті XXI століття серед науковців і практиків інформатизації і цифровізації всіх сфер соціального життя суттєво зріс інтерес до штучного інтелекту, що викликано бажаннями людини впродовж тисячоліть розгадати таємниці роботи мозку і створити пристрої, які можуть мислити, а, головне, побудувати подібні автоматизовані машини й механізми з метою використання їх у створенні сприятливих і комфортних умов проживання і суспільного розвитку.

Питання, пов'язані зі штучним інтелектом та штучними нейронними мережами (ШНМ), на сьогодні є досить новими і актуальними для створення фізичного практикуму в закладах вищої освіти (ЗВО) і для пропозиції студентам цікавих дослідницьких завдань з природничих наук із запровадженням штучного інтелекту. Тому вони викликають значне зацікавлення як з боку науковців, викладачів, так і з боку методистів. Область практичного застосування ШНМ та ті нові можливості, які відкриваються завдяки впровадженню нейромереж [1] – [3], підкреслює той факт, що дослідження ШНМ та їх вдосконалення має високий рівень актуальності і потребує значної дослідницької зацікавленості для можливостей їх впровадження в освітній процес, особливо в педагогічних закладах вищої освіти України.

**Аналіз останніх досліджень і публікацій.** Сучасні досягнення у сфері штучного інтелекту, машинного навчання (МН) та нейронних мереж демонструють широкі можливості для оптимізації, обробки й аналізу даних, що активно використовуються в наукових дослідженнях. Огляд використання ШНМ у спектральному аналізі, що наведений у [4], демонструє підвищений інтерес до цієї технології. У роботі [5] наголошується на тому, що більшість спектрів мають стандартну структуру: масив інтенсивностей і відповідний масив індексів, як то енергія або довжина хвилі, що робить їх ідеальними для автоматизації за допомогою ШНМ.

Так спектроскопія комбінаційного розсіювання стала прикладом, де класичні методи аналізу не справляються з великими обсягами даних, що сприяло впровадженню машинного навчання, зокрема згорткових нейронних мереж (ЗНМ) [6] – [10]. З 2017 року застосування ЗНМ у раманівській спектроскопії, згідно з [6], дозволило створювати моделі для автоматичного розпізнавання хімічних сполук за спектрами. Важливі інновації були запропоновані в [7], де було узагальнено попередні методи та показано використання методів МН на основі мультиспектральних даних, а також у [8], де було ознайомлено з новим підходом під назвою ідентифікація компонентів на основі глибокого навчання. Впровадження нових методів трансферного навчання у [9] підвищило точність класифікації органічних речовин.

Алгоритми МН широко використовувались для наборів даних з окремих методів спектроскопії, таких як вібраційне комбінаційне розсіювання [11], відбивання у видимій та в ближній інфрачервоній області [12] і лазерно-індукована спектроскопія пробою [13]. У роботі [14] запропоновано метод глибокого навчання для автоматичного розділення даних газової хромато-мас-спектрометрії, а в [15] – огляд застосування МН у мас-спектрометрії та спектроскопії ядерного магнітного резонансу. У [16] детально описується використання МН при рентгенівській дифракції та інфрачервоній спектроскопії з Фур'є-перетворенням. У [17] авторами наведено алгоритм аналізу перехідних спектрів при наявності шуму за допомогою нейронних мереж.

**Мета дослідження** – на основі аналізу сучасних досягнень у галузі штучного інтелекту і штучних нейронних мереж обґрунтувати і розробити модель використання відкритої електронної науково-освітньої системи для виконання фізичного практикуму з основ спектрального аналізу у ЗВО, що одночасно слугуватиме основою створення центру (чи відділення) зі спектроскопії і розкриватиме студентам сутність будови і роботи ШНМ

## 2. РЕЗУЛЬТАТИ ДОСЛІДЖЕННЯ

Початок розгляду ідеї застосування моделі ШНМ для розпізнавання оптичних спектрів, що реєструються традиційним спектральним обладнанням, ми пропонуємо з короткого розгляду самої моделі ШНМ. На нашу думку, така послідовність розгляду матеріалу є логічною і забезпечує краще його розуміння, особливо для випадку, коли мова йде про впровадження цієї нової науково-методичної ідеї навчання в педагогічних закладах вищої освіти, де студентів необхідно однаково чітко і усвідомлено розуміти і саму наукову сутність принципу роботи основного елемента приладу, зокрема моделі ШНМ, і практичної сутності його впровадження, тобто принципу навчання цієї моделі і її використання в ході виконання спектроскопічних досліджень.

Спершу проаналізуємо детальніше модель ШНМ. Нейронні мережі мають вхід, на який можна подати вектор фіксованої розмірності  $X(x_1, x_2, \dots, x_n)$ , а також вихід, з якого можна зчитати вектор певної розмірності  $Y(y_1, y_2, \dots, y_n)$ . Основною функцією ШНМ є можливість розпізнавати з множини вхідних векторів підмножину тих векторів, у яких присутня конкретна шукана ознака. Для того, щоб ШНМ вдало реалізовувала процес розпізнавання, її попередньо слід «навчити» розпізнавати конкретну шукану ознаку і виокремлювати її та зберігати.

Хоча й на сьогодні відомо, що структури ШНМ можуть відрізнятися залежно від задач, які вони виконують [18], але існують класичні уявлення про штучний нейрон (персиптрон), про структуру нейронної мережі [19], [20], а всі інші складніші випадки утворюються на їх основі. Ми розглядатимемо саме загальну структуру моделі ШНМ, щоб розкрити ідею застосування її для розпізнавання оптичних спектрів.

Усі нейронні мережі складаються з нейронів. Нейрон має певну кількість входів і лише один вихід. Структура нейрона показана на рис 1. [19], [20].

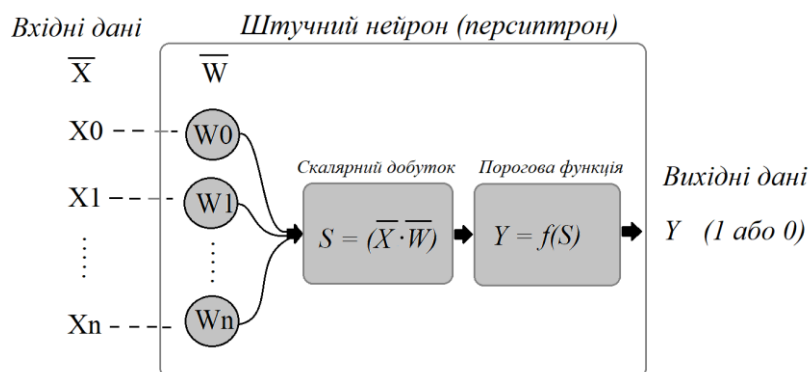


Рис. 1. Структура штучного нейрона

Із рисунка 1 видно, що розмірність вектора  $X$ , який подається на відповідні входи нейрона, відповідає кількості цих входів. Кожен вхід нейрона має свою вагу  $W_i$ , що представлена дійсним числом. Усі ваги входів нейронна утворюють разом вектор вагів  $W$ . При потраплянні на вхід вектора  $X$  нейрон виконує операцію скалярного добутку вектора  $X$  та  $W$ . Отримане числове значення скалярного добутку в якості аргументу передається до порогової функції  $f(s)$ , яка визначає, чи достатнє це значення для переведення виходу нейрона в збуджений стан, що відповідає логічному «1», або навпаки – вихід буде в незбудженому стані і відповідатиме логічному «0». Порогова функція  $f(s)$  може мати різний вигляд і аналітичне представлення. Дуже часто в якості порогової функції використовується сигмоїда [20], яка має ознаки бар'єра в області значень по відношенню до області визначення.

Коли входи нейронів з'єднані паралельно, то кажуть, що таке об'єднання утворює нейронний шар. У нейронному шарі є вхід, який визначається входами об'єднаних нейронів, і вихід, що визначається відповідно виходами цих нейронів. У випадку, коли вихід одного нейронного шару приєднується до входу іншого і таке з'єднання виконується послідовно для низки шарів, то утворену в такий спосіб структуру називають штучною нейронною мережею. Кількість шарів у нейронній мережі може бути різною, від одного і до тисячі шарів. Незважаючи на такі різні значення кількості нейронних шарів у ШНМ, основна логіка побудови її структури, а саме послідовного об'єднання виходів і входів нейронних шарів є незмінною для всієї ШНМ. На рисунку 2 показано вигляд структури ШНМ, до складу якої входять три шари, у яких відповідно містяться дев'ять, п'ять та два нейрони [18], [19], [20].

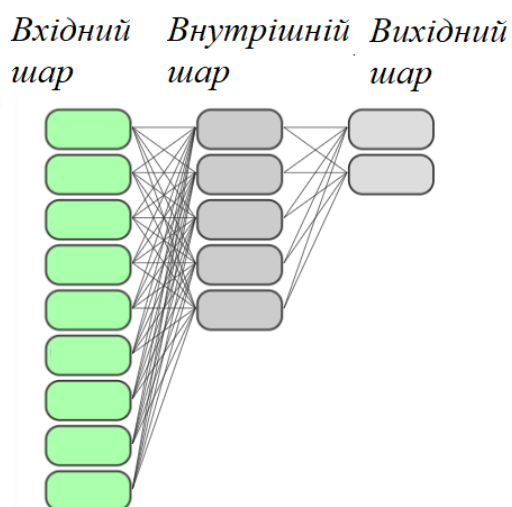


Рис. 2. Графічне зображення структури тришарової моделі ШНМ

Як уже зазначалося, щоб ШНМ могла розпізнавати спільні ознаки вхідних векторів, її спочатку навчають. Після створення ШНМ у кожному її шарі нейронні координати вектора  $W$  (або ваги) мають довільне значення, а мережа в такому стані не здатна виконувати дії з розпізнавання певних ознак. Для навчання мережі застосовують спеціальний алгоритм корекції координат векторів  $W$  у всіх нейронах, що входять до складу ШНМ. Такий процес цілеспрямованого коригування значень ваг у нейронах мережі називається процесом її навчання. Найбільш розповсюдженим алгоритмом, який використовується для навчання ШНМ, є навчання методом градієнтного спуску [19]. Зазначений алгоритм покликаний зменшити похибку з розпізнавання і застосовується до ШНМ циклічно впродовж певної кількості дій, що поступово зменшує похибку в процесі її функціонування.

Після вдалого завершення процесу навчання ШНМ набуває необхідних розпізнавальних можливостей, але цей процес не завжди завершується позитивно. Важливою умовою вдалого навчання ШНМ є правильно задана її структура, яка відповідає певній логіці і послідовній реалізації процесу розпізнавання. Створення структури ШНМ залежить від задачі, яку вона має виконувати. Процес формування структури ШНМ передбачає логічне розділення головної задачі на відповідні підзадачі. Для вирішення кожної конкретної підзадачі в структурі ШНМ закладають відповідний шар, причому кількість нейронів у цьому шарі має відповідати логіці розв'язування підзадачі.

Відзначимо, що, задавши велику кількість нейронів та шарів у ШНМ, ми можемо, очевидно, покрити велику кількість задач, яку може реалізовувати подібна структура, але водночас ми отримаємо негативний ефект зі зниження швидкості обчислення такої мережі у порівнянні із ШНМ, які мають значно меншу кількість нейронів. У випадку, коли час розпізнавання не є критичним, то такий підхід при формуванні структури ШНМ може бути прийнятним, але говорячи про процес автоматичного розпізнавання спектрів оптичного випромінювання, можна виділити переваги такого застосування під час реалізації експрес-методу вимірювання, що є критичним з точки зору часу виокремлення і вимірювання.

Надалі ми проаналізуємо створення структури нейромережі з мінімально достатньою кількістю шарів та нейронів у ній, яка матиме найкоротший час роботи з розпізнавання спектрів, а, відповідно, матиме кращі дослідницькі можливості, зокрема й для виконання вимірювань довжин хвиль за короткі проміжки часу в оптичному спектрі.

Для прикладу і кращого розуміння логіки формування оптимальної структури ШНМ розглянемо випадок створення її структури для розпізнавання написаних від руки цифр в області, яку при оцифруванні можна представити як прямокутник розмірами вісім на десять пікселів. У такому випадку використовується ШНМ з трьома шарами. Перший шар містить нейрони, у яких кількість входів рівна кількості пікселів області, де записується цифра, а саме вісімдесят входів, бо ширина області вісім пікселів, а висота десять. Кількість нейронів у першому шарі відповідає кількості елементарних фігур, з яких формується цифра, а це: коло, напівколо, риска та ін. Таких варіантів примітивів елементарних фігур можна виділити близько десяти, тому і кількість нейронів у вхідному шарі має відповідати цій кількості. Другий шар містить таку кількість нейронів, яка рівна кількості варіантів об'єднань примітивів, передбачених у першому шарі для утворення на їх основі цифр. Останній, третій шар вміщує таку кількість нейронів, яка відповідає кількості варіантів усіх цифр, тобто десять. У ході навчання такої ШНМ передбачається, що в кінцевому варіанті її функціонування у вихідному шарі перехід у збуджений стан буде здійснювати лише один нейрон, який відповідає написаній цифрі. Сам факт переходу конкретного нейрону вихідного шару у збуджений стан розцінюється як результат розпізнавання ШНМ відповідної цифри, яка написана в прямокутній області, та інформації, яка подається на вхід цієї нейронної мережі.

Проводячи аналогію з розглянутим вище випадком побудови структури ШНМ залежно від поставленої їй задачі, відзначимо, що для ШНМ, яка призначена для розпізнавання оптичних спектрів, теж має бути проаналізована і підібрана низка тверджень на основі теоретичних викладок для оптичних спектрів та логічних висновків, які визначатимуть ефективну структуру такої нейромережі. Насамперед слід враховувати, що процес розпізнавання оптичного спектру передбачає, що при подаванні на вхід ШНМ інформації про цей спектр, на її виході ми отримаємо вказівку на хімічний елемент чи речовину, яка дає досліджуваний спектр.

Проаналізуємо запропоновані нами дві послідовності підзадач, на які можна розбити головну задачу з розпізнавання оптичних спектрів. Перша послідовність базується на розрахунках за формулою Рідберга для гідрогенно подібних атомів:

$$\frac{1}{\lambda_{vac}} = R \cdot Z^2 \cdot \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right), \quad (1)$$

де  $\lambda_{vac}$  – довжина хвилі світла, що випромінюється у вакуумі;  $R$  – стала Рідберга для даного хімічного елемента;  $Z$  – порядковий номер елемента в періодичній системі хімічних елементів;  $n_1$  та  $n_2$  – це натуральні числа, для яких  $n_1 < n_2$ .

У цьому випадку пропонується тришарова ШНМ, у якої останній вихідний шар адаптується під розпізнавання величини порядкового номера хімічного елемента  $Z$  на основі даних, що надходять з другого шару. Кількість нейронів в останньому шарі рівна семи, що відповідає семибітному числу у двійковій системі. Таке число здатне набувати

128 значень і цим самим вказувати на 128 варіантів хімічних елементів, яким може відповідати досліджуваний оптичний спектр. Другий шар орієнтований вирішити підзадачу з розпізнавання комбінації натуральних чисел  $n_1$  та  $n_2$ , що відповідають формулі Рідберга. Для цих задач з емпіричних уявлень про наявність ліній в оптичному спектрі ми виділили двадцять нейронів у другому шарі. Перший шар розв'язує підзадачу з адаптації вхідних даних, що відповідають наявним довжинам хвиль в оптичному спектрі дослідженого випромінювання. Ми виділили десять нейронів, що, на нашу думку, є достатньою умовою для повного розділення оптичних спектрів у відповідності до хімічного елемента.

Друга ідея передбачає структуру з двох шарів. Перший шар містить таку кількість нейронів, яку можна умовно отримати при розбиванні оптичного спектра на частини. Для роздільної здатності на рівні 4 нм отримуємо кількість, яка рівна ста нейронам. Вихідний шар має таку кількість нейронів, яка рівна кількості хімічних елементів, що потенційно можуть створювати оптичні спектри випромінювання. Ми виділили перші сто елементів з періодичної системи Д. І. Менделєєва, а, відповідно, у вихідному шарі передбачено сто нейронів, кожен з яких перейде у збуджений стан тільки у тому випадку, коли досліджуваний хімічний елемент буде створювати відповідний йому спектр.

Проаналізуємо алгоритм для формування вхідного вектора, який має відображати повну інформацію про оптичний спектр. Розмірність вхідного вектора має залежати від розмірності входу ШНМ і має бути рівна кількості входів у нейрона у вхідному шарі. Очевидно, що формування вхідного вектора залежить від структури самої ШНМ, а конкретніше від розмірності входів нейронів у першому шарі. У першому варіанті розглядуваної нами структури ШНМ ми пропонуємо алгоритм, що визначається вимірюванням відносності положення кожної видимої лінії оптичного спектра відносно його початку. Реалізація алгоритму передбачає наступні дії – від значення положення першої видимої лінії у нм віднімається значення початку спектра, тобто – 350 нм і ділиться на ширину повного спектра до 750 нм, а саме на 400 нм. Розраховане в такому алгоритмі значення буде вказувати відносність розміщення видимої лінії у спектрі: перша координата вхідного вектора визначає відносне положення першої лінії, друга – відповідно другої лінії і т.д. У випадку, коли оптичний спектр має менше видимих оптичних ліній ніж десять, як того вимагає запропонована структура, то незаповнені координати вхідного вектора ініціюються нулями. Якщо кількість ліній більша за розмірність вхідного вектора, то із спектра виділяються тільки перші десять ліній і вважається, що їх має бути достатньо для ідентифікування спектральних ліній в оптичному діапазоні вимірювання довжин хвиль досліджуваного випромінювання.

Алгоритм формування вхідного вектора для другої запропонованої структури передбачає, що вхідний вектор має розмірність, рівну кількості рівношироких частин спектра, на яку його розділяють. Перша координата вхідного вектора рівна одиниці, якщо в першому фрагменті спектра наявне випромінювання вище похибки вимірювання. У випадку, якщо в першому фрагменті спектра випромінювання відсутнє, то і координата вхідного вектора рівна нулю. Для другої координати розглядається другий фрагмент спектра і т.д.

Для реалізації процесу навчання ШНМ і перевірки ефективності запропонованих її структур, які орієнтовані на оптичні спектри, ми розробили спеціальний Webдодаток, який дозволяє програмно виконати процес навчання ШНМ заданої структури на основі методу градієнтного спуску. Вигляд структури ШНМ, що відповідає обом ідеям розпізнавання оптичних спектрів, показано на рис. 3 і рис. 4.

Запропонований додаток має можливість оцінювати значення похибки розпізнавання ШНМ для довільного вхідного вектора за наявними ознаками.

Використовуючи спектральний прилад «Спектрометр 01М» [21] – [22], ми отримали експериментальну множину спектрограм гідрогенно подібних атомів для забезпечення даними процес навчання ШНМ з використанням розробленого вебдодатка.

Похибка, оцінена вебдодатком із розпізнавання спектрів атомів, подібних до гідрогену, на основі ШНМ з першою запропонованою структурою, знаходиться на рівні 7%, а з другою – на рівні 3%, що, на нашу думку, є прийнятним в обох випадках для забезпечення автоматичного експрес-аналізу оптичних спектрів.

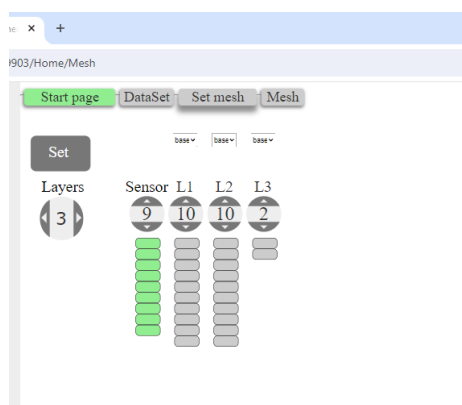


Рис. 3. Структура ШНМ, що відповідає першій ідеї розпізнавання оптичних спектрів

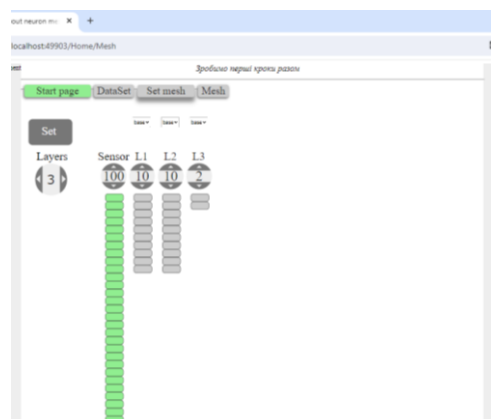


Рис. 4. Структура ШНМ, що відповідає другій ідеї розпізнавання оптичних спектрів

З метою формування у здобувачів освітньої кваліфікації «бакалавр» наукових уявлень під час ознайомлення студентів з основами спектрального аналізу в процесі вивчення фізики у ЗВО ми розробили лабораторну роботу, яка орієнтована на вивчення нових сучасних підходів у фізичному практикумі на основі штучного інтелекту із застосуванням моделі ШНМ.

Запропонована лабораторна робота передбачає **«Вивчення методів автоматичної класифікації експериментальних даних на прикладі розпізнавання оптичних спектрів гелію та неону»**. Для виконання роботи ми передбачили використання такого спектрального обладнання, як «Спектрометр 01М» [21], а також програмного додатка до нього «Спектрометр 01М.exe» та вебдодатка «Mesh Calculator», який реалізує процес навчання ШНМ методом градієнтного спуску. Програмне забезпечення «Спектрометр 01М.exe» разом із спектральним приладом «Спектрометр 01М» дозволяє виконати вимірювання довжин хвиль оптичних спектрів, а також здійснити їх розпізнавання на основі існуючої ШНМ, що під'єднується до додатка «Спектрометр 01М.exe» у вигляді файла з розширенням «.msh». Створити такий файл користувач може використовуючи вебдодаток «Mesh Calculator», що на даний момент розгортається на локальному сервері комп'ютера, на якому функціонує «Спектрометр 01М.exe». Вебдодаток «Mesh Calculator» дозволяє створити ШНМ необхідної йому структури, а також виконати процес її навчання на множині даних, що під'єднуються до додатка у вигляді текстового файлу певної структури. Після навчання ШНМ її структура та стан нейронів зберігається у вигляді файлу з розширенням «.msh». Під'єднання файлу «.msh» до додатка «Спектрометр 01М.exe» дозволяє здійснювати розпізнавання оптичних спектрів, що вимірюються, згідно тієї ШНМ, яка відображена в «.msh» файлі (рис. 5 – рис. 10).

На цих рисунках зображено динаміку процесу навчання ШНМ. Відзначимо, що на початковому етапі (рис. 5; рис. 6) результати розпізнавання спектрів неону та гелію

відображаються разом і з великою похибкою. На рис. 7 та рис. 8 відображено моменти, коли ШНМ навчилася розділяти спектри неону та гелію, хоча похибка розпізнавання залишилась великою. На рис. 9 та рис. 10 показано завершальний етап навчання ШНМ, у цьому випадку процес розпізнавання є коректним, завершеним і з малою похибкою.

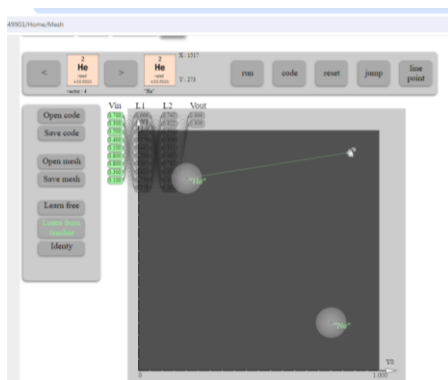


Рис. 5. Момент 1

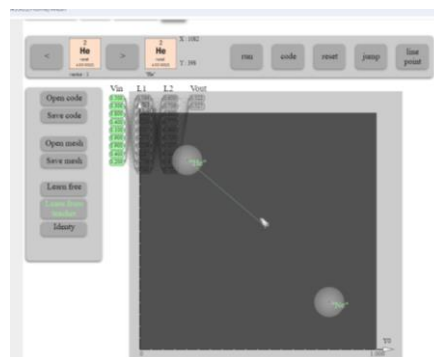


Рис. 6. Момент 2

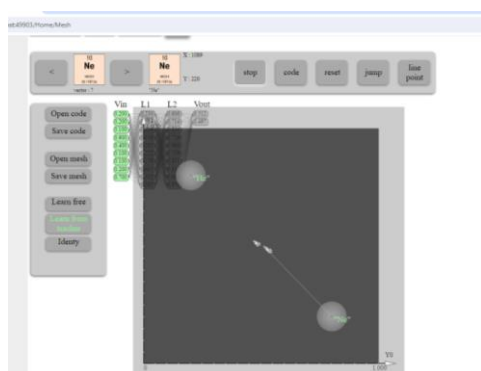


Рис. 7. Момент 3

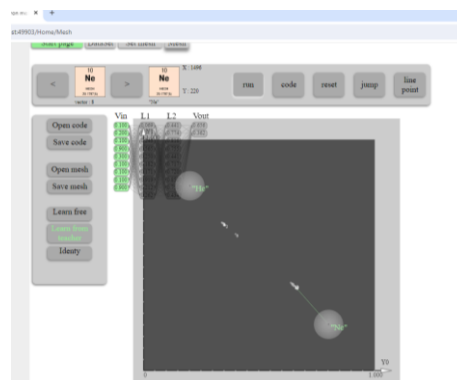


Рис. 8. Момент 4

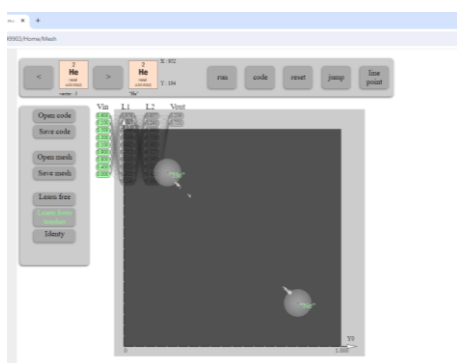


Рис. 9. Момент 5

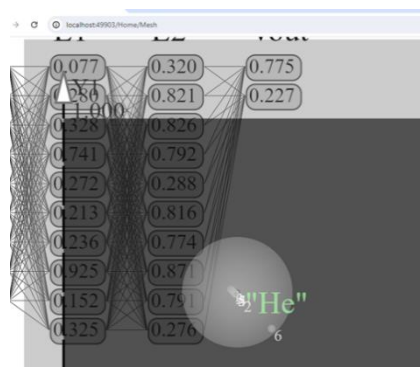


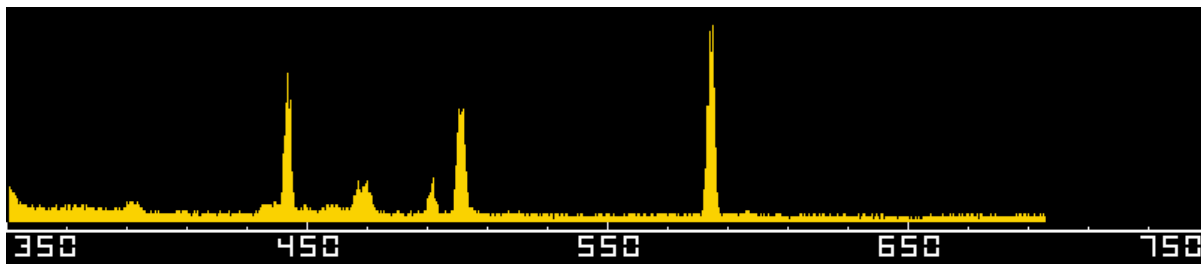
Рис. 10. Момент 6

**Порядок виконання запропонованої роботи практикуму** передбачає:

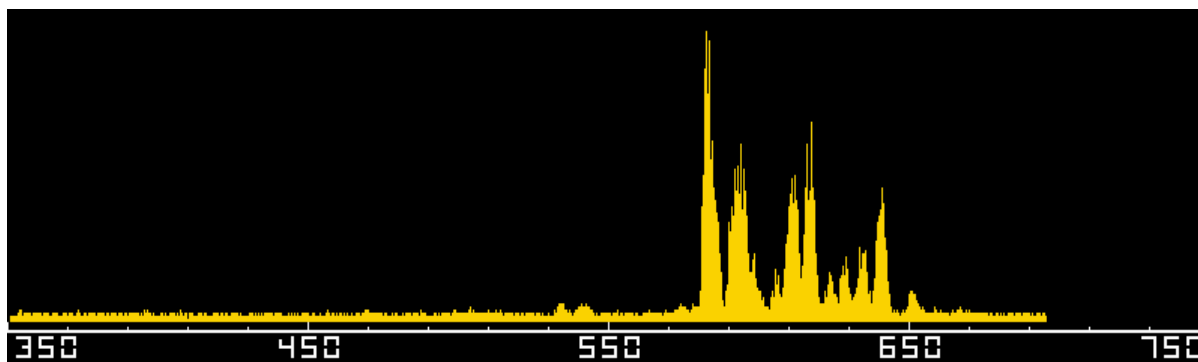
1. Виконати вимірювання оптичного спектра гелію та неону за допомогою спектрального приладу «Спектрометр 01М». Для вимірювання повного спектра слід виконати ці дії не менше п'яти разів для кожного хімічного елемента. Дані треба зберегти у відповідних «.src» файлах на жорсткому диску комп'ютера. Тоді ми одержуємо



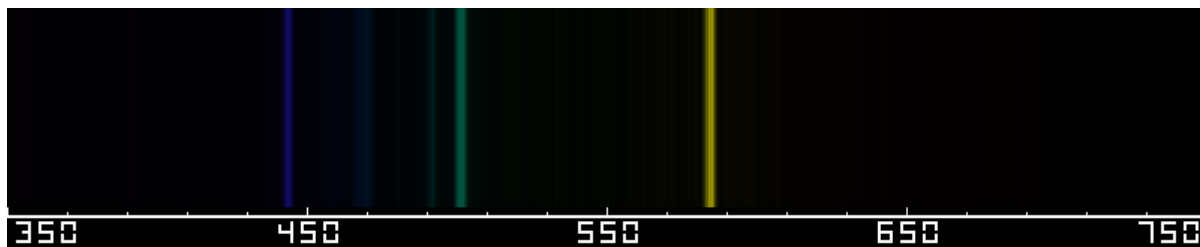
спектри гелію і неону у вигляді залежності інтенсивності світла від довжини хвилі: рис. 11 та рис. 12, а також їх візуальне представлення: рис. 13 та рис. 14 відповідно.



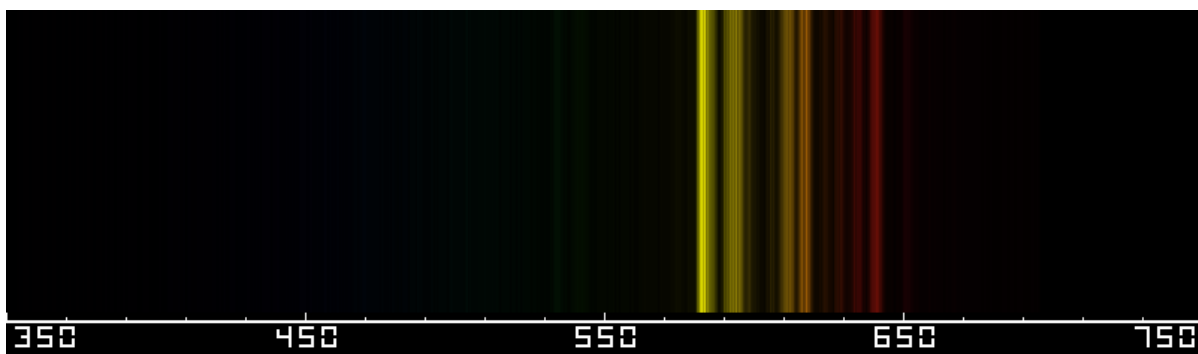
*Рис. 11. Спектрограма гелію (у вигляді залежності)*



*Рис. 12. Спектрограма неону (у вигляді залежності)*



*Рис. 13. Спектрограма гелію (візуальне представлення)*



*Рис. 14. Спектрограма неону (візуальне представлення)*

2. Використовуючи додаток «Mesh Calculator», створити файл нейронної мережі із структурою, що запропонована в теоретичних викладах до лабораторної роботи (структура ШНМ 9/10/10/2) (рис. 3), отриманий файл «.msh» зберегти на жорсткому диску комп'ютера.

3. Виконати розпізнавання оптичних спектрів, які були отримані в першому завданні за допомогою «ненавченої» ШНМ, що отримана в ході виконання пункту 2. Зробити висновки про похибку вимірювання.

4. Використовуючи спектрограми, що отримані в першому пункті, підготувати файл з емпіричними даними для навчання нейронної мережі зі структурою – 9/10/10/2 за допомогою додатка «Mesh Calculator», як це описано в теоретичних відомостях до лабораторної роботи.

5. Запустити процес навчання нейронної мережі і дочекатись, коли процес розпізнавання оптичних спектрів матиме похибку меншу 5% (рис. 10). Зберегти отриману ШНМ і помістити її в окремих «.msh» файл.

6. Під'єднати ШНМ, що отримана в пункті 5, до додатка «Спектрометр 01M.exe».

7. Виконати вимірювання спектра *неону* та його розпізнавання.

8. Дії пункту 7 повторити для спектра *гелію*.

9. Виконані у пунктах 4 – 8 дії повторити для структури ШНМ 100/10/10/2 (рис. 4).

10. Зробити висновки про можливості та похибку застосування ШНМ для автоматичної класифікації експериментальних даних з вимірювання оптичних спектрів у всіх експериментах з використанням «навченої» ШНМ.

Отже, виконуючи роботу фізичного практикуму з розпізнавання спектрів випромінювання неону і гелію на основі ШНМ, студент усвідомлено розуміє будову і роботу штучної нейронної мережі, сутність її навчання в процесі розпізнавання спектрів у видимій оптичній ділянці спектру та їх класифікацію, а також чітко розуміє фізичні основи спектрального аналізу та приклади спектроскопічних досліджень різних спектрів випромінювання для якісного і кількісного аналізу. Поряд з цим студенту розкриваються можливості неймовірних досліджень оточуючої природи та природних явищ і процесів для подальшого розширення можливостей їх вивчення і поглиблення розуміння процесу пізнання природи на основі спектрального аналізу та інших наукових методів у разі запровадження штучного інтелекту та ШНМ.

### 3. ВИСНОВКИ ТА ПЕРСПЕКТИВИ ПОДАЛЬШИХ ДОСЛІДЖЕНЬ

У статті розглянуто ідею застосування та можливість реалізації штучного інтелекту, зокрема у вигляді ШНМ, для здійснення автоматичної класифікації оптичних спектрів, що реєструються і фіксуються типовим спектральним обладнанням «Спектрометр 01M». Проаналізовано особливості формування структури ШНМ для випадку розпізнавання оптичних спектрограм хімічних елементів. На основі запропонованого сучасного спектрального обладнання для навчальних цілей та відповідного програмного забезпечення описано нову лабораторну роботу фізичного практикуму з фізики зі спектрального аналізу у ЗВО, яка спрямована на вивчення сучасних методів обробки експериментальних даних на основі ШНМ. У роботі передбачено всі етапи застосування ШНМ для виконання навчального фізичного експерименту з автоматичною класифікацією оптичних спектрів.

Розглянутий приклад запровадження ШНМ переконливо засвідчує досить ефективний розвиток навчального фізичного експерименту завдяки запровадженню штучного інтелекту в процесі розвитку спектроскопії і створенні відділення (або центру) у ЗВО, особливо в педагогічних закладах вищої освіти України, які готують майбутніх

учителів фізики, хімії, біології (чи природничих наук) і формують у них високий рівень експериментаторських і дослідницьких компетентностей.

Перспективним продовженням наукового пошуку на основі розглянутої наукової ідеї є впровадження її у процесі підготовки майбутніх учителів, а також на курсах підвищення їхньої кваліфікації з природничо-математичного циклу.

## СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

- [1] T. S. Francis, H. Y. Edward, and G. Y. Ann, *The art of learning: neural networks and education*. Boca Raton, FL, USA: CRC Press, 2019.
- [2] В. Биков, О. Спірін, та О. Пінчук, “Сучасні завдання цифрової трансформації освіти”, *Вісник Кафедри ЮНЕСКО “Неперервна професійна освіта XXI століття”*, вип. 1, с. 27–36, Трав. 2020. doi: [10.35387/ucj.1\(1\).2020.27-36](https://doi.org/10.35387/ucj.1(1).2020.27-36).
- [3] A. Gupta, V. Aggarwal, V. Sharma and M. Naved, “Framework to Integrate Education 4.0 to Enhance the E-Learning Model for Industry 4.0 and Society 5.0” in *The Role of Sustainability and Artificial Intelligence in Education Improvement*, J. Rosak-Szyrocka, J. Żywiołek, A. Nayyar and M. Naved, Eds., Boca Raton, FL, USA: Chapman and Hall/CRC, 2024, pp. 151–167.
- [4] D. Passos, and P. Mishra, “A tutorial on automatic hyperparameter tuning of deep spectral modelling for regression and classification tasks”, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, vol. 223, Apr. 15, 2022, Art. no. 104520, doi: [10.1016/j.chemolab.2022.104520](https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2022.104520).
- [5] L. Hannemose Rieger, M. Wilson, T. Vegge, and E. Flores, “Understanding the patterns that neural networks learn from chemical spectra”, *Digital Discovery*, no. 2, pp. 1957–1968, Nov. 2023, doi: [10.1039/D3DD00203A](https://doi.org/10.1039/D3DD00203A).
- [6] J. Liu, M. Osadchy, L. Ashton, M. Foster, C. J. Solomone, and S. J. Gibson, “Deep convolutional neural networks for Raman spectrum recognition: a unified solution”, *Analyst*, vol. 142, pp. 4067–4074, Sep. 2017, doi: [10.1039/C7AN01371J](https://doi.org/10.1039/C7AN01371J).
- [7] P. Jahoda, I. Drozdovskiy, S. J. Payler, L. Turchi, L. Bessone, and F. Sauro, “Machine learning for recognizing minerals from multispectral data”, *Analyst*, vol. 146, pp. 184–195, Oct. 2021, doi: [10.1039/D0AN01483D](https://doi.org/10.1039/D0AN01483D).
- [8] X. Fan, W. Ming, H. Zeng, Z. Zhang, and H. Lu, “Deep learning-based component identification for the Raman spectra of mixtures”, *Analyst*, vol. 144, pp. 1789–1798, Jan. 2019, doi: [10.1039/C8AN02212G](https://doi.org/10.1039/C8AN02212G).
- [9] R. Zhang *et al.*, “Transfer-learning-based Raman spectra identification”, *J. Raman Spectrosc.*, vol. 51, pp. 176–186, Nov. 2020, doi: [10.1002/jrs.5750](https://doi.org/10.1002/jrs.5750).
- [10] W. Zhou, Y. Tang, Z. Qian, J. Wang, and H. Guo, “Deeply-recursive convolutional neural network for Raman spectra identification”, *RSC Advances*, Vol. 12, pp. 5053–5061, Feb. 2022, doi [10.1039/D1RA08804A](https://doi.org/10.1039/D1RA08804A).
- [11] J. Acquarelli, T. van Laarhoven, J. Gerretzen, T. N. Tran, Lutgarde M. C. Buydens, and E. Marchiori, “Convolutional neural networks for vibrational spectroscopic data analysis”, *Analytica Chimica Acta*, vol. 954, pp. 22–31, Feb. 2017, doi: <https://doi.org/10.1016/j.aca.2016.12.010>.
- [12] D. J. Brown, K. D. Shepherd, M. G. Walsh, M. D. Mays, and T. G. Reinsch, “Global soil characterization with VNIR diffuse reflectance spectroscopy”, *Geoderma*, vol. 132, no. 3–4, pp. 273–290, Jun. 2006, doi: [10.1016/j.geoderma.2005.04.025](https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2005.04.025).
- [13] D. Prochazka, P. Porizka, J. Hruska, K. Novotny, A. Hrdlicka, and J. Kaiser, “Machine learning in laser-induced breakdown spectroscopy as a novel approach towards experimental parameter optimization”, *J. Analytical Atomic Spectrometry*, vol. 37, pp. 603–612, Feb. 2022, doi: [10.1039/D1JA00389E](https://doi.org/10.1039/D1JA00389E).
- [14] Y. Fan *et al.*, “Deep learning-based method for automatic resolution of gas chromatography-mass spectrometry data from complex samples”, *Journal of Chromatography A*, vol. 1690, Feb. 8, 2023, Art. no. 463768, doi: [10.1016/j.chroma.2022.463768](https://doi.org/10.1016/j.chroma.2022.463768).
- [15] G. Huab, and M. Qiu, “Machine learning-assisted structure annotation of natural products based on MS and NMR data”, *Nat. Prod. Rep.*, vol. 40, pp. 1735–1753, Jul. 2023, doi: [10.1039/D3NP00025G](https://doi.org/10.1039/D3NP00025G).
- [16] Z. Chen, Y. Xie, Y. Wu, Y. Lin, S. Tomiya, and J. Lin, “An interpretable and transferrable vision transformer model for rapid materials spectra classification”, *Digital Discovery*, no. 3, pp. 369–380, 2024, doi: [10.1039/D3DD00198A](https://doi.org/10.1039/D3DD00198A).
- [17] R. Zhao, D. Wu, J. Wen, Q. Zhang, G. Zhang, and J. Li, “Robustness and accuracy improvement of data processing with 2D neural networks for transient absorption dynamics”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 23, pp. 16998–17008, Jul. 2021, doi: [10.1039/D1CP02521J](https://doi.org/10.1039/D1CP02521J).
- [18] С. О. Суботін, *Нейронні мережі: теорія та практика: навчальний посібник*. Житомир, Україна: Вид. О. О. Євенок, 2020.

- [19] S. Haykin, *Neural Networks. A Comprehensive Foundations*. Avrora, N.Y., USA: McMillan College Publ. Co., 1994.
- [20] T. Rashid, *Make Your Own Neural Network*. Charleston, SC, USA: CreateSpace Independent Publishing Platform, 2016.
- [21] С. П. Величко, І. С. Величко, С. Г. Ковальов, та В. В. Миколайко, “Створення сучасного комплексу для вивчення оптичного випромінювання у практикумі з фізики в закладах вищої освіти”, у *MODERNÍ ASPEKTY VĚDY: Svazek XXVIII mezinárodní kolektivní monografie*, Есеніце, Чеська Республіка: Mezinárodní Ekonomický Institut s.r.o., 2023, С. 170–271.
- [22] С. Величко, І. Величко, та С. Ковальов, «Створення сучасного спектрального приладу для навчальних цілей», *Актуальні питання у сучасній науці*, № 1(7), С. 338–351, Jan. 2023. doi: 10.52058/2786-6300-2023-1(7)-338-351.

*Матеріал надійшов до редакції 14.05.2024 р.*

## THE USE OF NEURAL NETWORKS FOR THE RECOGNITION OF OPTICAL SPECTRA IN THE EDUCATIONAL PRACTICE ON THE FUNDAMENTALS OF SPECTRAL ANALYSIS

### **Stepan Velychko**

Doctor of Pedagogical Sciences, Professor, Professor at the Department of Physics and Integrative Technologies of Teaching

Pavlo Tychyna Uman State Pedagogical University, Uman, Ukraine

ORCID ID 0000-0002-1692-9741

*spvelychko@gmail.com*

### **Ihor Velychko**

Software engineer, «Data Art», Kyiv, Ukraine

ORCID ID 0000-0003-0785-4538

*igor.s.velychko@gmail.com*

### **Serhii Kovalov**

PhD in Pedagogical Sciences, Lecturer at the Department of Higher Mathematics and Physics

Central Ukrainian National Technical University, Kropyvnytskyi, Ukraine

ORCID ID 0009-0002-3922-8697

*kovalyovserggr@ukr.net*

### **Yurii Kovalov**

PhD in Technical Sciences, Associate Professor, Associate Professor at the Department of Physical and Mathematical Disciplines and Application of Information Technologies in Aviation Systems

Flight Academy of the National Aviation University, Kropyvnytskyi, Ukraine

ORCID ID 0000-0002-1729-2033

*yukovalyov@ukr.net*

**Abstract.** The article analyzes the idea of applying artificial intelligence in the form of an artificial neural network model for automatic recognition of optical spectra registered by traditional spectral equipment. The material presented pays special attention to the logic of constructing the structure of neural networks aimed at extracting features for differentiating optical spectra of various chemical elements. The discussed material involves studying the effectiveness of the proposed neural network structures based on implementing their training using the gradient descent method. The authors consider the peculiarities of applying neural networks for recognizing optical spectra both in methodological terms and in the creation of a corresponding department or center in higher education institutions of Ukraine, where research work and laboratory practice in spectral analysis and spectroscopy are conducted. The workshop created this way involves familiarizing students with the basics of spectroscopy, carrying out a series of important works in this field of human activity, and introducing them to such a powerful modern research tool as artificial intelligence in the form of an artificial neural network with programming elements based on Python in the course of educational physical experiments. The operation of the laboratory practice based on the use of an artificial neural network model is analyzed, providing students with elementary understanding of the structure and functioning of this model and the possibilities of implementing it in the study of spectroscopic regularities in the optical range, as well as the possibility of establishing a department

or center for studying the basics of spectral analysis spectroscopy within the higher education institution in Ukraine. A laboratory work has been proposed, which involves the study of methods for automatic classification of experimental data using the example of recognizing the optical spectra of helium and neon.

**Keywords:** artificial neural network; structure and operation; studying; optical spectra; recognition; physical laboratory work.

## REFERENCES (TRANSLATED AND TRANSLITERATED)

- [1] T. S. Francis, H. Y. Edward and G. Y. Ann, *The art of learning: neural networks and education*. Boca Raton, FL, USA: CRC Press, 2019. (in English).
- [2] V. Bykov, O. Spirin, and O. Pinchuk, «Modern tasks of digital transformation of education», UNESCO Chair Journal Lifelong Professional Education in the XXI Century, no. 1, pp. 27-36, May 2020. doi:10.35387/ucj.1(1).2020.27-36. (in Ukrainian).
- [3] A. Gupta, V. Aggarwal, V. Sharma and M. Naved, «Framework to Integrate Education 4.0 to Enhance the E-Learning Model for Industry 4.0 and Society 5.0» in *The Role of Sustainability and Artificial Intelligence in Education Improvement*, J. Rosak-Szyrocka, J. Żywiołek, A. Nayyar and M. Naved, Eds., Boca Raton, FL, USA: Chapman and Hall/CRC, 2024, pp. 151–167. (in English).
- [4] D. Passos, and P. Mishra, “A tutorial on automatic hyperparameter tuning of deep spectral modelling for regression and classification tasks”, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, vol. 223, Apr. 15, 2022, Art. no. 104520, doi: [10.1016/j.chemolab.2022.104520](https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2022.104520). (in English).
- [5] L. Hannemose Rieger, M. Wilson, T. Vegge, and E. Flores, “Understanding the patterns that neural networks learn from chemical spectra”, *Digital Discovery*, no. 2, pp. 1957–1968, Nov. 2023, doi: [10.1039/D3DD00203A](https://doi.org/10.1039/D3DD00203A). (in English).
- [6] J. Liu, M. Osadchy, L. Ashton, M. Foster, C. J. Solomone, and S. J. Gibson, “Deep convolutional neural networks for Raman spectrum recognition: a unified solution”, *Analyst*, vol. 142, pp. 4067–4074, Sep. 2017, doi: [10.1039/C7AN01371J](https://doi.org/10.1039/C7AN01371J). (in English).
- [7] P. Jahoda, I. Drozdovskiy, S. J. Payler, L. Turchi, L. Bessone, and F. Sauro, “Machine learning for recognizing minerals from multispectral data”, *Analyst*, vol. 146, pp. 184–195, Oct. 2021, doi: [10.1039/D0AN01483D](https://doi.org/10.1039/D0AN01483D). (in English).
- [8] X. Fan, W. Ming, H. Zeng, Z. Zhang, and H. Lu, “Deep learning-based component identification for the Raman spectra of mixtures”, *Analyst*, vol. 144, pp. 1789–1798, Jan. 2019, doi: [10.1039/C8AN02212G](https://doi.org/10.1039/C8AN02212G).
- [9] R. Zhang *et al.*, “Transfer-learning-based Raman spectra identification”, *J. Raman Spectrosc.*, vol. 51, pp. 176–186, Nov. 2020, doi: [10.1002/jrs.5750](https://doi.org/10.1002/jrs.5750). (in English).
- [10] W. Zhou, Y. Tang, Z. Qian, J. Wang, and H. Guo, “Deeply-recursive convolutional neural network for Raman spectra identification”, *RSC Advances*, Vol. 12, pp. 5053–5061, Feb. 2022, doi [10.1039/D1RA08804A](https://doi.org/10.1039/D1RA08804A). (in English).
- [11] J. Acquarelli, T. van Laarhoven, J. Gerretzen, T. N. Tran, Lutgarde M. C. Buydens, and E. Marchiori, “Convolutional neural networks for vibrational spectroscopic data analysis”, *Analytica Chimica Acta*, vol. 954, pp. 22–31, Feb. 2017, doi: <https://doi.org/10.1016/j.aca.2016.12.010>. (in English).
- [12] D. J. Brown, K. D. Shepherd, M. G. Walsh, M. D. Mays, and T. G. Reinsch, “Global soil characterization with VNIR diffuse reflectance spectroscopy”, *Geoderma*, vol. 132, no. 3–4, pp. 273–290, Jun. 2006, doi: [10.1016/j.geoderma.2005.04.025](https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2005.04.025). (in English).
- [13] D. Prochazka, P. Porizka, J. Hruska, K. Novotny, A. Hrdlicka, and J. Kaiser, “Machine learning in laser-induced breakdown spectroscopy as a novel approach towards experimental parameter optimization”, *J. Analytical Atomic Spectrometry*, vol. 37, pp. 603–612, Feb. 2022, doi: [10.1039/D1JA00389E](https://doi.org/10.1039/D1JA00389E). (in English).
- [14] Y. Fan *et al.*, “Deep learning-based method for automatic resolution of gas chromatography-mass spectrometry data from complex samples”, *Journal of Chromatography A*, vol. 1690, Feb. 8, 2023, Art. no. 463768, doi: [10.1016/j.chroma.2022.463768](https://doi.org/10.1016/j.chroma.2022.463768). (in English).
- [15] G. Huab, and M. Qiu, “Machine learning-assisted structure annotation of natural products based on MS and NMR data”, *Nat. Prod. Rep.*, vol. 40, pp. 1735–1753, Jul. 2023, doi: [10.1039/D3NP00025G](https://doi.org/10.1039/D3NP00025G). (in English).
- [16] Z. Chen, Y. Xie, Y. Wu, Y. Lin, S. Tomiya, and J. Lin, “An interpretable and transferrable vision transformer model for rapid materials spectra classification”, *Digital Discovery*, no. 3, pp. 369–380, 2024, doi: [10.1039/D3DD00198A](https://doi.org/10.1039/D3DD00198A). (in English).
- [17] R. Zhao, D. Wu, J. Wen, Q. Zhang, G. Zhang, and J. Li, “Robustness and accuracy improvement of data processing with 2D neural networks for transient absorption dynamics”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 23, pp. 16998–17008, Jul. 2021, doi: [10.1039/D1CP02521J](https://doi.org/10.1039/D1CP02521J). (in English).

- [18] S. O. Subbotin, *Neural networks: theory and practice: a study guide*. Zhytomyr, Ukraine: O. O. Evenok Publishing House, 2020. (in Ukrainian).
- [19] S. Haykin, *Neural Networks. A Comprehensive Foundations*. Avrora, N.Y., USA: McMillan College Publ. Co., 1994. (in English).
- [20] T. Rashid, *Make Your Own Neural Network*. Charleston, SC, USA: CreateSpace Independent Publishing Platform, 2016. (in English).
- [21] S. P. Velychko, I. S. Velychko., S. G. Kovalov, and V. V. Mykolayko, «Creation of a modern set for the study of optical radiation in a physics workshop in institutions of higher education», in *Modern aspects of science: Volume XXVIII of the international collective monograph*, Jesenice, Czech Republic: International Economic Institute s.r.o., 2023, pp. 170–271. (in Ukrainian).
- [22] S. Velichko, I. Velichko, and S. Kovalov, «Creating a modern spectral device for educational purposes», *Current issues in modern science*, no. 1(7), pp. 338-351, Jan. 2023. doi:10.52058/2786-6300-2023-1(7)-338–351. (in Ukrainian).

