**Машинное обучение для оценки параметров плазменных источников по спектральным данным**

***Рылов А.В., Лабутин Т.А.***

Аспирант*, 3 год обучения*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,   
химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: arylov*[*@laser.chem.msu.ru*](mailto:ivanov@yandex.ru)

Изучение лабораторных, промышленных, а также космических плазменных источников излучения представляет большой практический интерес. Хорошо известно, что состав плазменного источника можно определять по спектральным данным, сопоставляя наличие линий и их положения с базами данных. Использование моделирования позволяет облегчить этот процесс за счёт учёта влияния параметров источника на интенсивности линий. На данный момент разработано несколько подходов к определению параметров плазмы без использования образцов сравнения. При этом всё равно требуется большое количество ручного труда, а большое число параметров и проблема выбора начальных условий не позволяют легко получать реалистичные результаты. В современной науке для решения подобных задач широкое распространение получили методы машинного обучения. Предпринятые до сих пор попытки предсказания параметров источника с использованием машинного обучения были весьма ограниченными по масштабу и требовали переобучения модели при изменении состава мишени или используемого спектрального диапазона. Соответственно, целью данной работы являлось создание нейросети, способной определить состав и температуру/электронную плотность плазмы по оптическим спектрам.

Для изучения возможности быстрой оценки температуры и электронной плотности по калиброванным спектрам (точность до порядка для электронной плотности и 20-30 % для температуры) был создан обучающий набор из 20000 спектров чистого железа в диапазоне длин волн 252.5 - 807.5 нм (9000 точек) с помощью разработанного в лаборатории алгоритма моделирования спектров однородного источника в состоянии локального термодинамического равновесия (диапазон температур 0.3 - 2.0 эВ, десятичный логарифм электронной плотности 14 - 18 (для см-3), оба распределения были равномерны и независимы). На данном этапе работы не учитывались самопоглощение и аппаратная функция спектрометра. Для предсказания температуры или электронной плотности по спектру на вход нейросети подаётся вектор, состоящий из 2000 значений, первая тысяча —длины волн, вторая — значения интенсивности спектра на этих длинах волн. В модели используются комплексные числа, их использование связано с желанием учесть отношения интенсивностей в спектре, для чего можно использовать логарифмирование. На первом шаге от вектора интенсивностей берётся логарифм, затем эти значения проходят через линейный слой (без активации), затем от них берётся экспонента. Полученные значения объединяются с длинами волн и исходными интенсивностями путём конкатенации и подаются на вход в 5 полносвязных слоёв с функцией активации ReLU в комплексном варианте. В качестве функции потерь испольуется L1 норма (сумма модулей разностей). Предсказание температуры и электронной плотности осуществляется отдельными моделями. Для обучения и валидации сгенерированный обучающий набор был разделён 9 к 1, в качестве оптимизатора использовался adam.

В дальнейшем планируется расширение обучающего набора за счет расширения спектрального диапазона, а также использования многоэлементных смесей. Также ожидаются валидация модели на экспериментальных спектрах плазмы, оценка достоверности получаемых результатов и потенциала сокращения временных затрат.