

Összehasonlító vizsgálat spektroszkóppal, one-shot technikával

COMPARATIVE SPECTROSCOPY WITH ONE-SHOT TECHNIQUE

SIPOS Bence, GYÖRGY Levente

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem BSc hallgató,

1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3; tel.: +36 1 463-1111

Központi fax: +36 1 463-1110, www.bme.hu

ABSTRACT

The purpose of the dissertation is to create an optical device that can be used to determine if two samples are the same. The evaluation of the measurement is done with a deep learning algorithm called one-shot. The idea behind this technique is to compare the given two samples and decide whether they are the same or not. With this algorithm there is no need for large amounts of training data or calibration. The software and device can jointly reduce the costs of spectroscopic testing and make it widely available.

KIVONAT

A célunk a spektroszkópia kiértékelésének megújítása, az egyre jobban terjedő gépi tanuló algoritmusok használatával. Ennél a módszernél a problémát az jelenti, hogy igen nagy adatmennyiségre van szükség a tanításukhoz, de ez alól létezik néhány kivétel, például a one-shot technika. A mérések elvégzéséhez és a rendszer összköltségének alacsony szinten tartása miatt két eltérő módon működő spektroszkópot is építettünk.

Kulcsszavak: One-shot, Deep Learning, Spektroszkópia, Anyagvizsgálat, Összehasonlító vizsgálat

1. BEVEZETÉS

Az adatok kiértékelésében egyre több módszer jelenik meg, melyet sokszor nem kötnek iparban használható alkalmazáshoz. Ilyen terület például a Deep Learning, ahol az utóbbi években hatalmas fejlődés ment végbe. Ennek egyik oka, hogy a korábban kifejlesztett módszerek most váltak gyorsan futtathatóvá a számítástechnika fejlődése miatt. A másik mozgatórugója az ilyen irányú fejlődésnek a felhasználói kényelem növelése. Erre jó példa, hogy már az újlényomat olvasást is szeretnénk elhagyni és helyette egyetlen pillantással nyitni telefonunk. Pontosan az előbb felhozott példa adta az ötletet ezen spektroszkópiai alkalmazáshoz.

A spektroszkópia nagy múltra tekint vissza. Már 1802-ben William Hyde Wollaston észrevette, hogy a nap fénye nem folytonos. Ezen elv alapján később a mérés technika képessé vált bizonyos anyagok megkülönböztetésére, felismerésére. A módszer nagy hátránya, hogy igen költséges eszközök kellenek hozzá. A Raman-spektroszkópok például egy drága notch filtert kell, hogy használjanak, a monokromatizálás is igen költséges lehet nagy pontosságnál. De nem csak az anyagvizsgálatokban használnak spektroszkópokat, hanem egyre több területen, például a nagyon gyorsan fejlődő kijelző iparban vagy a világítás technikában.

Mindenképp szerettük volna, hogy a feldolgozási módszer ne legyen eszközfüggő, és a lehető legkevesebb megszorítással rendelkezzen azt illetően, hogy milyen specifikációkkal kell a spektroszkópnak rendelkeznie. Ennek bizonyítására két eszközt is építettünk, amelyek képesek a módszert alkalmazni és a kiértékelését is megcsinálni gyorsan és kedvező áron. Emellett végeztünk Konica Minolta CS-1000 fotoradiométerrel is méréseket, amely igazolta, hogy a nagyobb pontosság nem növeli jelentősen az anyagvizsgálat pontosságát, tehát nem jelentős a javulás nagyobb pontosság és felbontás esetén sem.

2. MONOKROMATIZÁLÁS

A spektroszkópia a fény hullámhossz szerinti energia vagy intenzitás eloszlását vizsgálja, így fontos, hogy a beérkező összetett fényt képesek legyünk színeire bontani. Erre igen sok lehetőség van. Mi a lehető legalacsonyabb költségre törekedtünk saját berendezésünknel, és ezt is számításba vettük a monokromátor kiválasztásánál.

A kézenfekvő megoldás egy prizma használata lenne, de sajnos ezzel egy kissé bonyolultabb optikai felépítést kell használni. Emellett az üvegyanyagok hullámhossz szerinti törésmutatója nem lineárisan változik, így, ha később a vetített képből szeretnénk meghatározni a hullámhosszt, nehezebb a dolgunk. A mi megoldásunknál ez nem jelent problémát, mivel nincs szükség a pontos hullámhossz értékekre, hanem csak

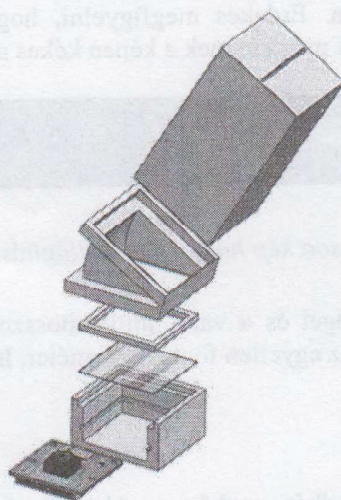
arra, hogy az eszköz a két mintát azonosnak lássa. Ez azt is jelenti, hogy nincs szükség kalibrálásra, de később erről bővebben beszámolunk.

A másik egyszerű és általunk választott megoldás az optikai rács használata. A diffrakció jelenségét kihasználva ezzel a sűrűn vonalazott lappal képesek voltunk a fény komponensekre bontására. Mi 1000 vonalpár per milliméteres rácsot használtunk és egyszerűen a kamera meglévő optikájával és egy réssel képesek voltunk méréseket végezni.

3. ESZKÖZEINK FELÉPÍTÉSE

Sok alacsony árú telefonra kapcsolható kit vásárolható, amellyel a mi megoldásunkhoz hasonlóan lehet a spektrumot vizsgálni. Az a probléma velük sajnos, hogy használatuk sokszor nehézkes és a telefonok sokszínűsége miatt a kamera kép feldolgozásához is összetettebb program kell. Ezért döntöttünk a Raspberry Pi fejlesztőlap és az ehhez tartozó kamera mellett. Ezek igen elterjedtek a hobbisták körében, és igen jól dokumentáltak.

Az eszköz váza 3D nyomtatással készült, egymásba pattanó elemekből, amelynek köszönhetően könnyen össze és szétszerelhető. Így például, ha más projektben van szükség a kamerára, akkor kevesebb, mint egy perc alatt szét és össze is rakhatjuk. A másik fontos jellemző a moduláris felépítés [1. ábra]. Itt a cél az volt, hogy nem csak egy típusú elemekből lehessen megépíteni, hanem különböző kamerák is használhatók kell, hogy legyenek vagy eltérő optikai rácsokat is használhassunk. Ennek köszönhetően egy változtatás alkalmával nincs szükség minden elem újranyomtatására.

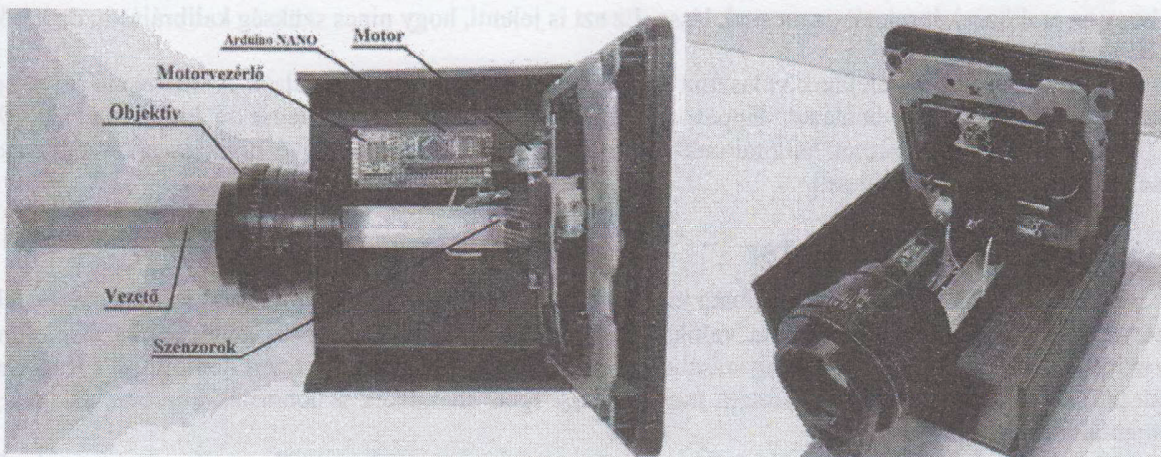


1. ábra

Robbantott ábra az eszköztől

A robbantott ábrán láthatjuk az egyes elemeket. A résen érkező fény a rácson eltérítődik és a kamera optikáján keresztül a szenzorra vetül. A képet ezt követően egy CSI porton keresztül a Raspberry Pi-be küldjük.

A másik felépítés jóval nagyobb érzékenységre képes, ami például a Raman-spektroszkópiánál elengedhetetlen. Emiatt nincs lehetőség egyszerű CCD vagy CMOS szenzor használatára. A legjobb és legnagyobb érzékenység fotoelektron-sokszorozó segítségével érhető el ebben az esetben. Ennek hátránya, hogy nagyfeszültségre van szükség hozzá, ami veszélyessé teszi kevésbé hozzáértők számára, így inkább egy nagy érzékenységű fototranzisztort és műveleterősítőket használtunk [2. ábra], mely a működési elv igazolása megfelelő.



2. ábra

Lineárisan mozgatott szenzoros gép

A képen is jól látszik, hogy egyetlen szenzort használunk, melyet síneken mozgatunk és így olvassuk ki az adatokat. A kiolvasott adatokat később a program azonos módon kezeli. Az első bemutatott eszköz a következő képet adja vissza [3. ábra], melyet később a program a rövidebb oldala mentén összegez, így egy hullámhossz szerinti eloszlást ad vissza. Érdekes megfigyelni, hogy mivel infraszűrő nélküli kamerát használtunk bőven 680 nm feletti sávok is megjelennek a képen kékes színnel.



3. ábra

Beolvasott kép halogén megvilágításról

A szenzorok spektrális érzékenységet és a valós hullámhosszokat nem kell figyelembe vennünk a kiértékelés összehasonlító jellege miatt. Az egyetlen fontos paraméter, hogy jó ismételhetőségi tulajdonsággal kell rendelkezzen az összeállítás.

4. ADATOK FELDOLGOZÁSA

Az adatok egydimenziósok mindkét eszköz esetén. Ezen adatokat több eltérő módon is klasszifikálhatjuk, de legtöbb esetben érdemes normálni ezen értékeket, ezzel elkerülve a fényességbeli eltérések okozta anomáliákat.

A neurális hálókat felépítő rétegek ismeretét feltételezve, a következőkben az összehasonlítást végző hálókat mutatjuk be. Ezek tanításához 3 különböző polimer (PET-G, PLA, ABS) fényelnyelését vizsgáltuk, 30-30 mintával. Ez a mennyiség gyorsan begyűjthető, mivel egy minta felvétele kevesebb mint egy másodpercet vett igénybe. A tanítást Amazon és Google felhőszolgáltatásaiban végeztük. A teszteléshez további adatokat használtunk, hogy könnyen észleljük az "overfitting"-et, ami a kevés adat miatt biztosra vehető volt. Fontos még kiemelni, hogy a mért mintákat szemmel alig lehetett megkülönböztetni, mivel minden eltérő anyagú próbatest fehér volt, így attól függetlenül, hogy mi nyomtattuk azokat, fel kellett, hogy címkézzük ahhoz, hogy képesek legyünk megkülönböztetni őket egymástól.

Próbát tettünk a neurális háló megkerülésére is, k - legközelebbi szomszéd és Hausdorff távolság figyelembevételével. Ezek is sikeresnek mondhatóak a kevés csoport miatt, de a később bemutatott módszerekhez képes még ilyen kevés kategória esetén is 10-15%-kal kisebb pontosságot tudtak produkálni.

Az LSTM [1] háló igen elterjedtek, de kissé már elavultnak számítanak több területen, mivel relatív rosszul parallelizálhatóak, így a tanításuk hosszabb lehet. A mi esetünkben a kevés adat használata miatt ez nem jelentett problémát, emellett a tanítás nem a Raspberry Pi-n történik, hanem felhőben. LSTM hálókat használatával sikerült elérni 96%-os pontosságot a teszt halmazon a bemutatott tanítóadatmennyiség használatával.

Az LSTM hálókat felváltó módszer a trendeket figyelembe véve úgy tűnik az egy dimenziós konvolúciós háló [3]. Ezek jobban taníthatóak, és nagyobb pontosságot is lehetővé tehetnek. Sajnos nekünk nem sikerült megtalálni a megfelelő hiperparamétereket, mellyel meg tudná előzni az LSTM hálókat.

Siamise hálókka [2] is próbát tettük, de nem jelentettek pontosság növekedést, de lassabb futást eredményeztek. MANN [4] hálókka is hasonló a helyzet. A továbblépést a DNS szekvenálásnál használt hálókka jelenthetik, ebben az irányban is folytatjuk a munkát jelen pillanatban is.

5. ALKALMAZÁSOK

A tesztjeinket is már polimerek vizsgálatával végeztük, tehát ezt egy lehetséges felhasználásnak gondoljuk, akár fröccsöntött elemek összehasonlításánál az összetétel megváltozásának kimutatására. Ezzel hasonló módon akár az otthoni 3D nyomtatók automatikus anyagfelismeréssel okosítása is megoldható lehet. Erre a kényelem növelése miatt lehet szükség, mivel sok anyag más nyomtatási paramétereket igényel és ezt egyelőre beállított profil alapján a nyomtató automatikusan is választhatná.

A másik nagy alkalmazási lehetőség a világítástechnikában jelenik meg, mivel az egyre terjedő LED-es világítás színösszetétele azonos színhőmérsékleten is eltérő lehet, ami zavaró lehet, de ha a boltban ki tudjuk próbálni a fényforrást, akkor jobb választást tud biztosítani. Az akkumulátorról való működés - tesztjeink szerint - több óra működést is lehetővé tesz.

Emellett fontos eszköze lehet az oktatásnak, mivel alacsony ára lehetővé teszi, hogy akárki megépítse és az által tanuljon. Sajnos az optika a fizika oktatásban általában kis hangsúllyal jelenik meg, de egy ilyen eszköz sok emberben felkeltheti az érdeklődést a téma iránt.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Hálával tartozunk konzulensünknek, Nagy Balázs Vincének, valamint Urbin Ágnesnek, a mérésekhez nyújtott segítségükért. Köszönjük a Mechatronika Szakosztálynak, hogy műhelyüket használhattuk az eszköz megépítéséhez és teszteléséhez.

HIVATKOZÁSOK

- [1] GERS, Felix A., SCHMIDHUBER, Jürgen, et CUMMINS, Fred. Learning to forget: Continual prediction with LSTM. 1999.
- [2] SUN, Yi, WANG, Xiaogang, et TANG, Xiaoou. Deep learning face representation from predicting 10,000 classes. In : Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition. 2014. p. 1891-1898.
- [3] TABAR, Yousef Rezaei et HALICI, Ugur. A novel deep learning approach for classification of EEG motor imagery signals. Journal of neural engineering, 2016, vol. 14, no 1, p. 016003.
- [4] VINYALS, Oriol, BLUNDELL, Charles, LILLICRAP, Timothy, et al. Matching networks for one shot learning. In : Advances in neural information processing systems. 2016. p. 3630-3638.