

Effizientere Datenanalyse durch maschinelles Lernen in der Neutronenforschung

Beispielhafte Anwendungen und Möglichkeiten im Bereich der chemischen Elementanalyse am MLZ

C. Stieghorst

Heinz Maier-Leibnitz Zentrum (MLZ), Technische Universität München,
Lichtenbergstr. 1, 85748 Garching, Germany

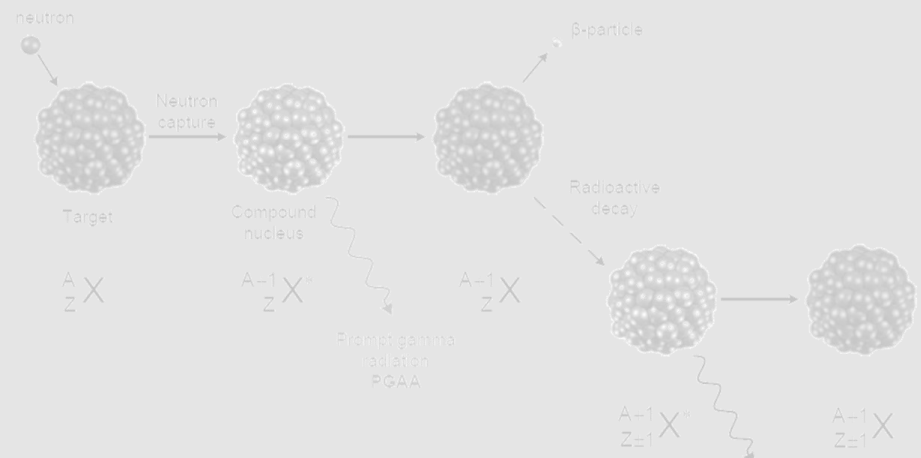
➤ Einleitung

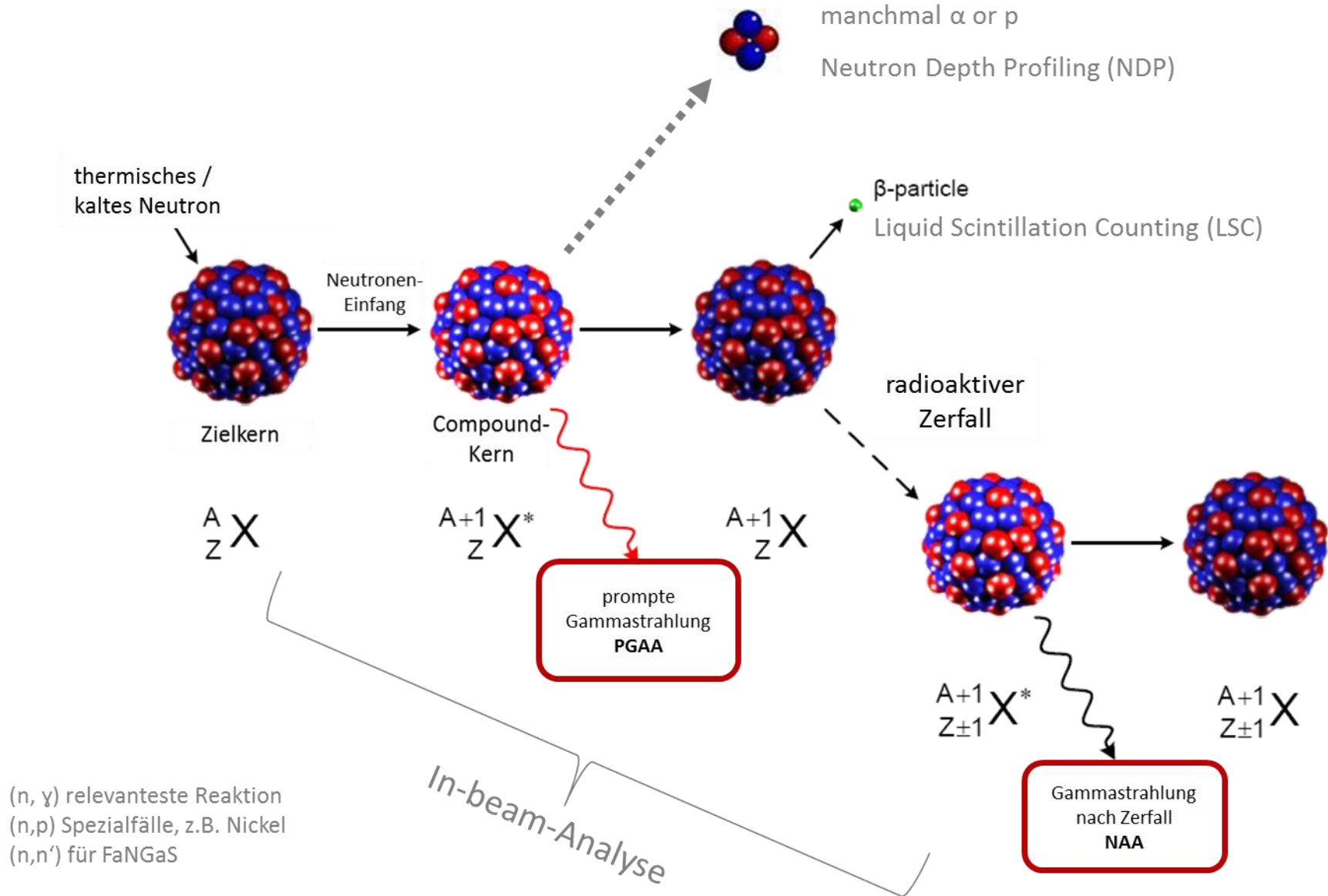
- ❖ Vorteile der chemischen Analyse mit Neutronen.
- ❖ Prinzip der Aktivierungsanalyse mit Neutronen.
- ❖ Elementanalyse am FRM II / MLZ – NAA und PGAA.

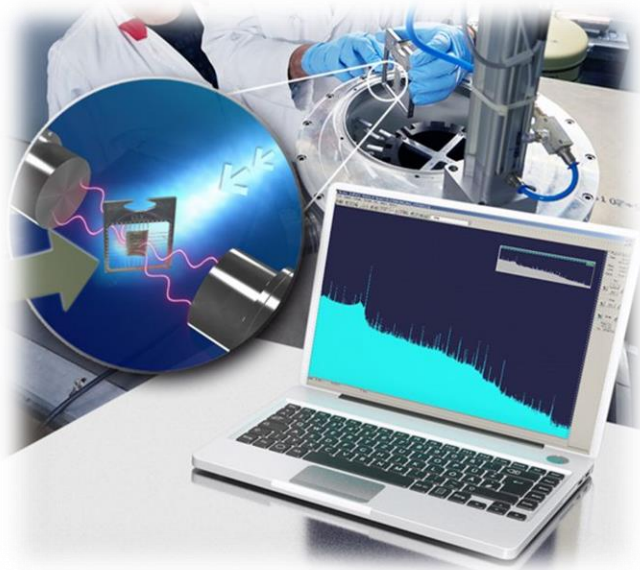
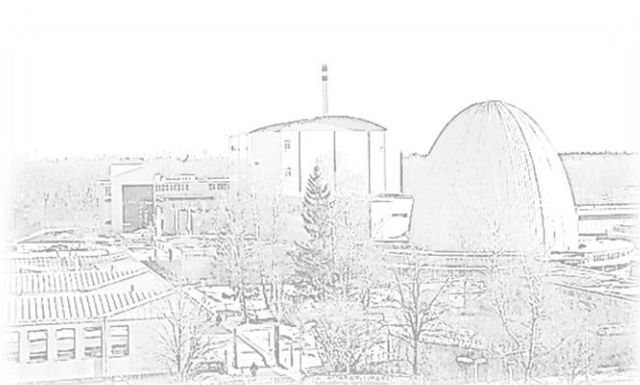
➤ Nutzung von ML/KI für die Aktivierungsanalyse

- ❖ Klassifizierung mittels ausgewerteter NAA/PGAA-Daten
- ❖ Verbesserung der Analyse-Methodik selbst
- ❖ Industrielle Anwendungen

➤ Zusammenfassung





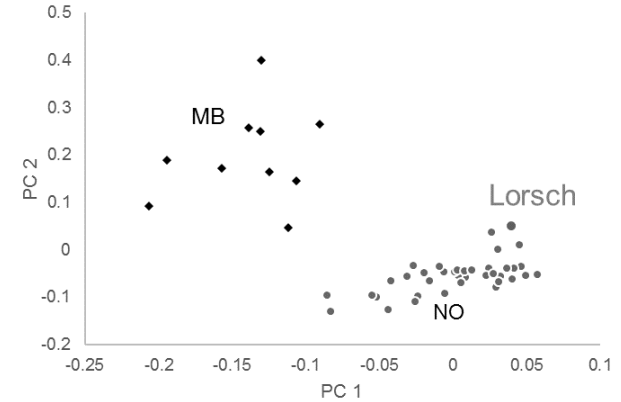


Elementanalyse mit Neutronen bietet eine einmalige Paket von Vorteilen:

- ✓ „Panorama-Analyse“ mit sehr geringen NWG für viele Elemente.
- ✓ Einfache Probenaufbereitung → einige Verfahren komplett zerstörungsfrei (PGAA).
- ✓ Wenig Matrixabhängigkeit.
- ✓ Extrem großer dynamischer Bereich.
- ✓ Bulkanalyse → wichtig, da viele Materialien oft mikroskopisch inhomogen sind.

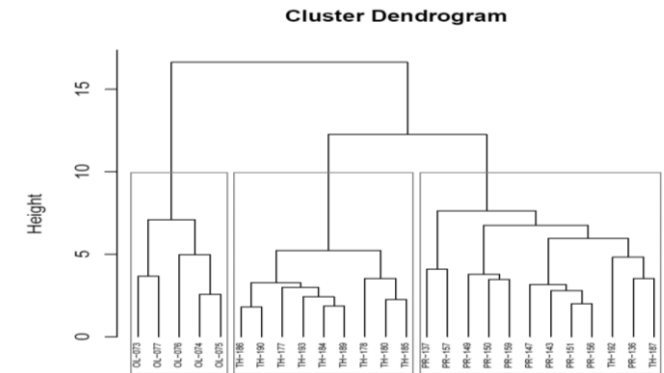
I. Reduzierung der Dimension:

- Aufgabe: Visualisierung von multivariaten Datensätzen.
- Methoden: z.B. Hauptkomponentenanalyse (PCA).



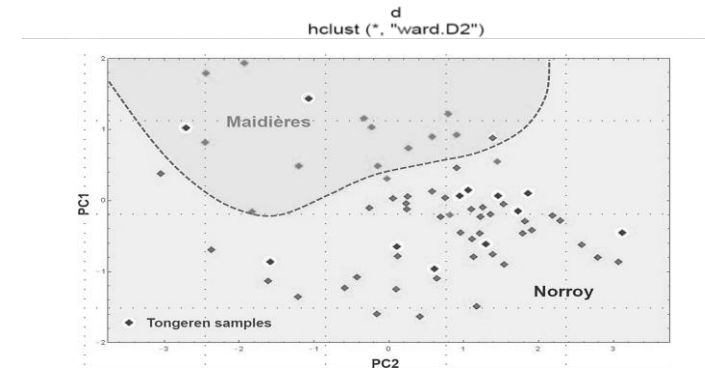
II. Clustering (unüberwachtes Lernen):

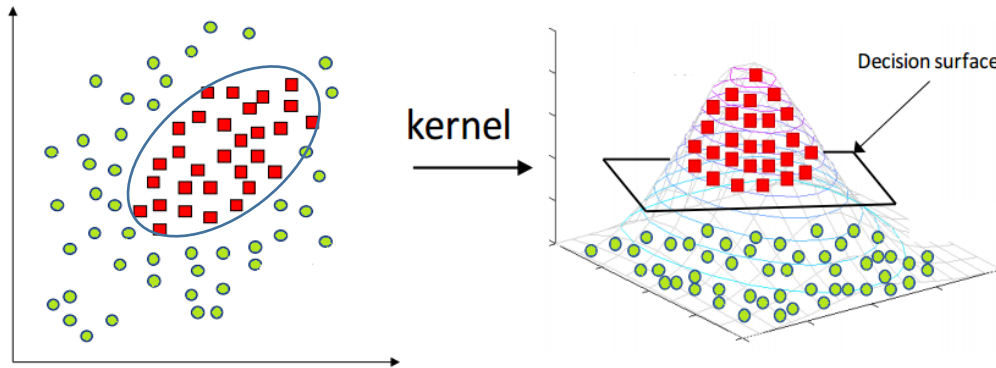
- Aufgabe: Auffinden von Gruppen von Objekten in einem gegebenen Datensatz.
- Methoden: z.B. hierarchische Clusteranalyse oder künstliche neuronale Netze (ANN).



III. Klassifizierung (überwachtes Lernen):

- Aufgabe: Zuordnung eines neuen Objektes zu einer bestimmten bestehenden Gruppe.
- Methoden: z.B. Support-Vektor-Maschinen (SVM) oder künstliche neuronale Netze (ANN)
- 2 Schritte: Training mit gelabelten Daten + Testing mit ungelabelten Daten





Quelle: <https://medium.com/@zxr.nju>

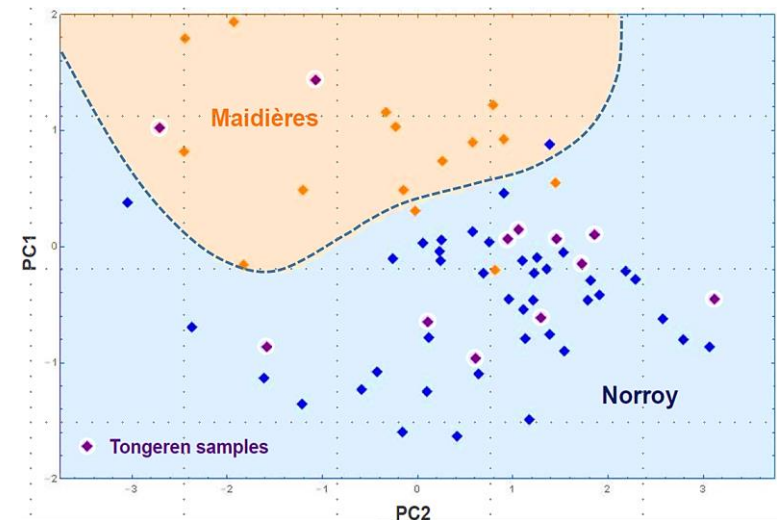
Support Vector Machines (Stützvektormethode)

- Lin. Separation von Datenwolken (mit möglichst breitem Rand).
- Transformation in höherdimensionalen Raum und zurück (nicht explizit, „Kernel-Trick“).

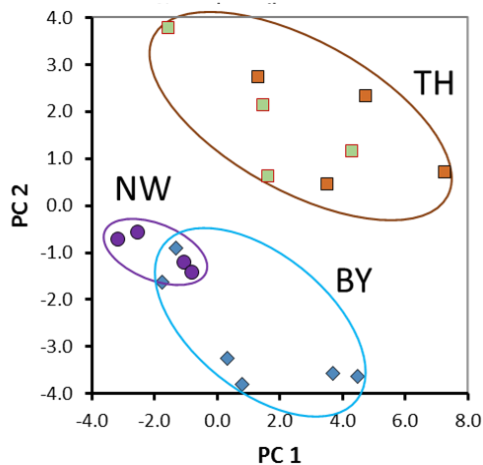
Aufgabe: Herkunftsbestimmung von Baumaterial;
denkbar für jegliche Art von Rohstoffen in denen sich
charakteristische Spurenelementfingerabdrücke finden lassen:

- Geograph. Provenienz v. Rohstoffen:
Erze, Gesteine, Rohöl, evtl. Holz ...
- Verarbeitete Materialien:
Gläser, Treibstoffe, Kunststoffe ...

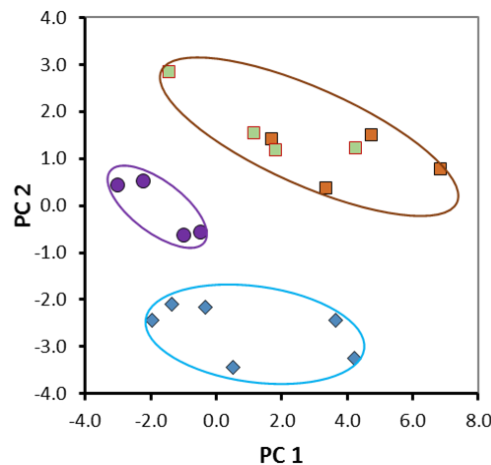
Hier: Sehr feinräumige Separation zw. von zwei Lagerstätten
möglich (hier < 10km). Geologische Befunde (Fazies) stimmen
überein.



Graphisch stark vereinfachte 2D-Darstellung einer Machine-Learning-Entscheidung (Support Vector Machines).

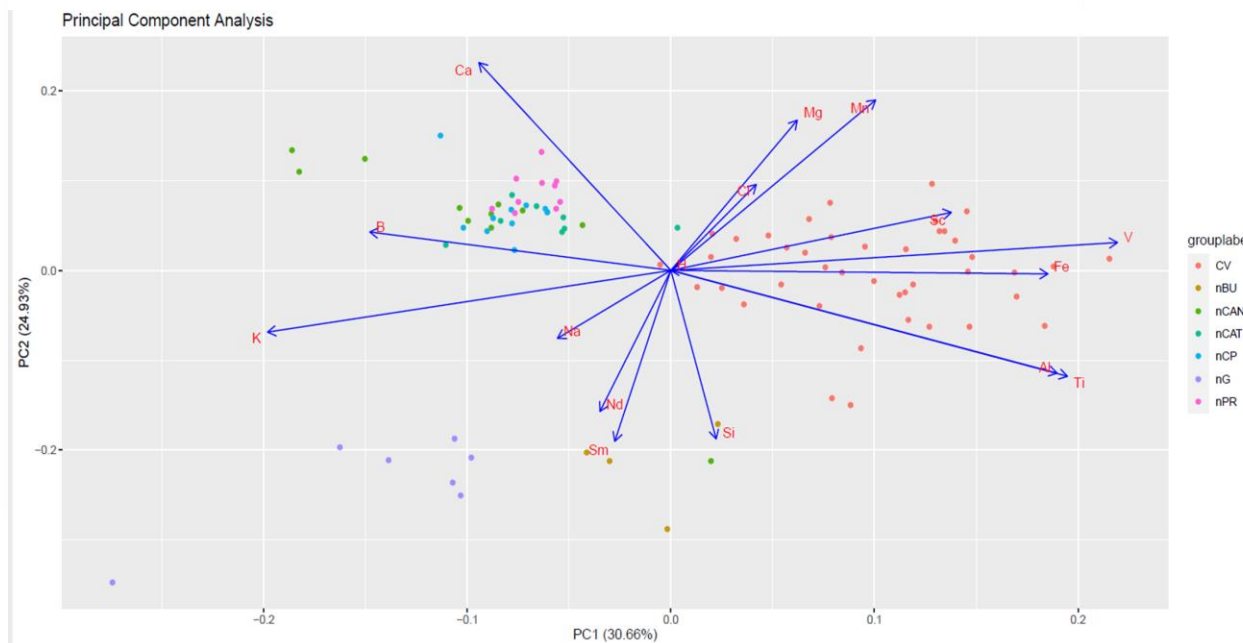


Statistischer Filter



Vorwissen über die Verteilungen einbringen.

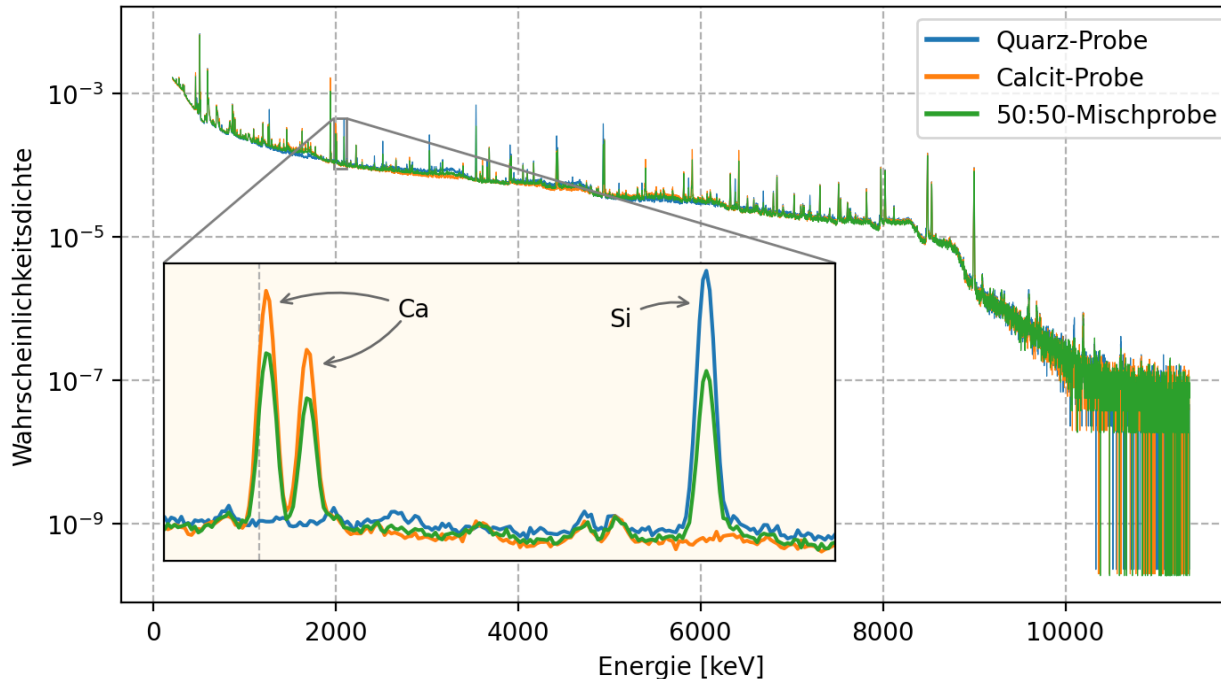
→ sauberere Klassifizierung.



An Feinunterteilungen sind nicht notwendigerweise dieselben Elemente beteiligt.

→ (geo-)chemisches Verhalten als Ursache.

Gemeinsam beantragtes Verbundprojekt (ErUM) von **Helmholtz-Zentrum Hereon** (S. Busch, Koord.), **TUM** (C. Stieghorst), **Helmut-Schmidt-Universität/Universität der Bundeswehr Hamburg** (O. Niggemann), **AiNT GmbH** (K. Krycki) und assoziierten Partnern (z.B. ESO, BASF, ESS ERIC, FZ Jülich).



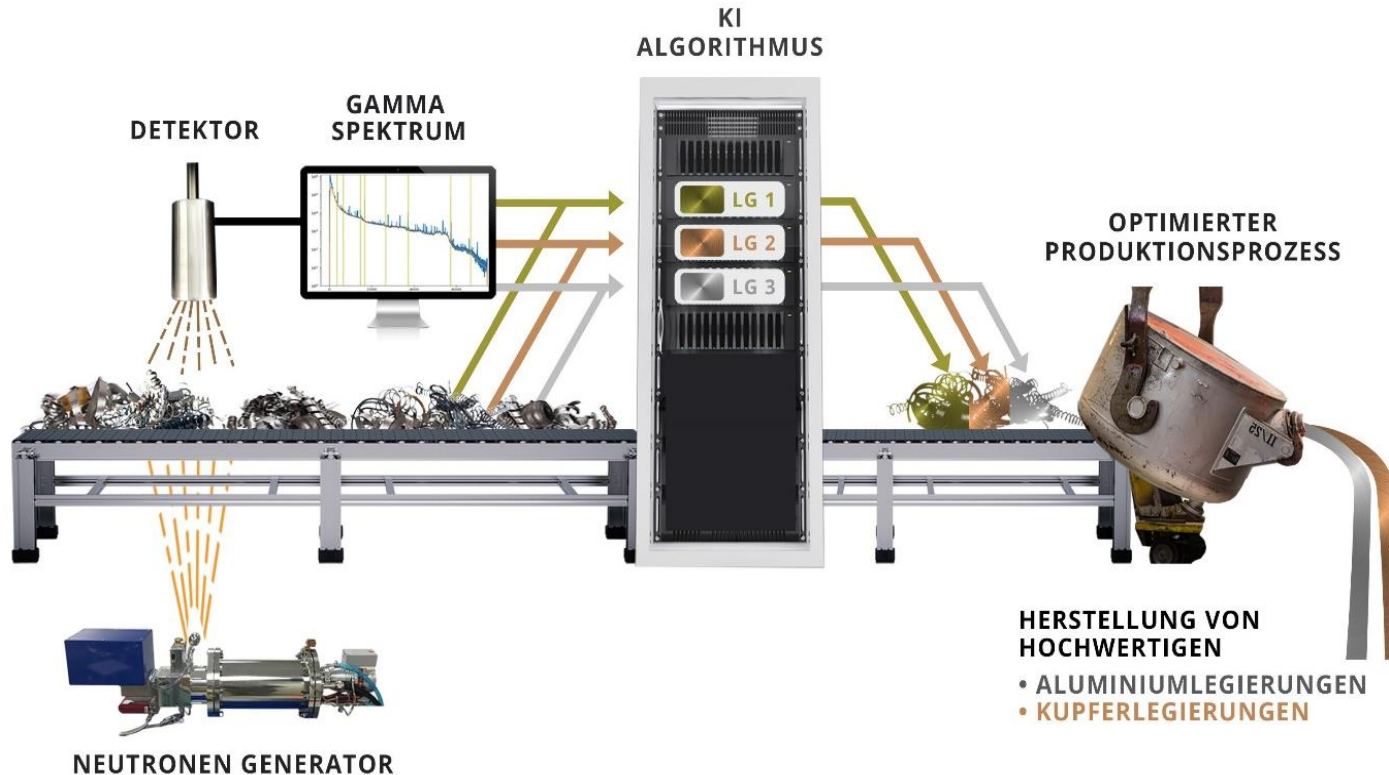
Bisheriges Bottleneck
der manuellen
Nachbearbeitung
beseitigen /
DL verbessern!

Spektren in guter Näherung
konvexkombinierbar.

- **Automatisierung** – eine robuste und effiziente Auswertung spektraler Daten mit minimaler Notwendigkeit manueller Eingriffe
- **Interpretierbarkeit** – Darstellung der Entscheidungskriterien bei der Auswertung und Angabe von Unsicherheiten
- **Generalisierung** – Möglichkeiten zur Erweiterung auf weitere Messmethoden
- **Wiederverwendung** – auf bestehendem Wissen aufbauen und die Software, Trainingsdaten und trainierten Netzwerke bereitstellen.

METALCLASS

AiNT 
Aachen Institute for Nuclear Training



TH OWL 
TECHNISCHE HOCHSCHULE
OSTWESTFALEN-LIPPE
UNIVERSITY OF
APPLIED SCIENCES
AND ARTS

Associated partner:

wieland

Wieland-Werke
(Ulm/Vöhringen)

 Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

Gefördert vom BMBF
im Rahmen von KMU
Innovativ unter dem
Förderkennzeichen
01IS20082A/B

Projektkoordination und Quelle: Kai Krycki AiNT GmbH

Zusammenfassung

- Neutronenaktivierung bietet eine einmalige Kombination von Vorteilen, wie Multielementmethodik, Bulkanalyse, Zerstörungsfreiheit, etc.
- PGAA und NAA am FRM II mit extrem hohen Flüssen und niedrigen NWG.
- Datenaufbereitung mindestens so wichtig wie die Wahl der multivariaten Verfahren.
- ML hat Potential in der Laboranalytik wie auch in der direkten industriellen Anwendung von Aktivierungsanalyse.

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!



PGAA / NAA

<https://mlz-garching.de/pgaa>

Dr. Zsolt Revay

Tel.: +49 (0)89 289-12694

E-Mail: zsolt.revay@frm2.tum.de

Dr. Christian Stieghorst

Tel.: +49 (0)89 289-54871

E-Mail: christian.stieghorst@frm2.tum.de

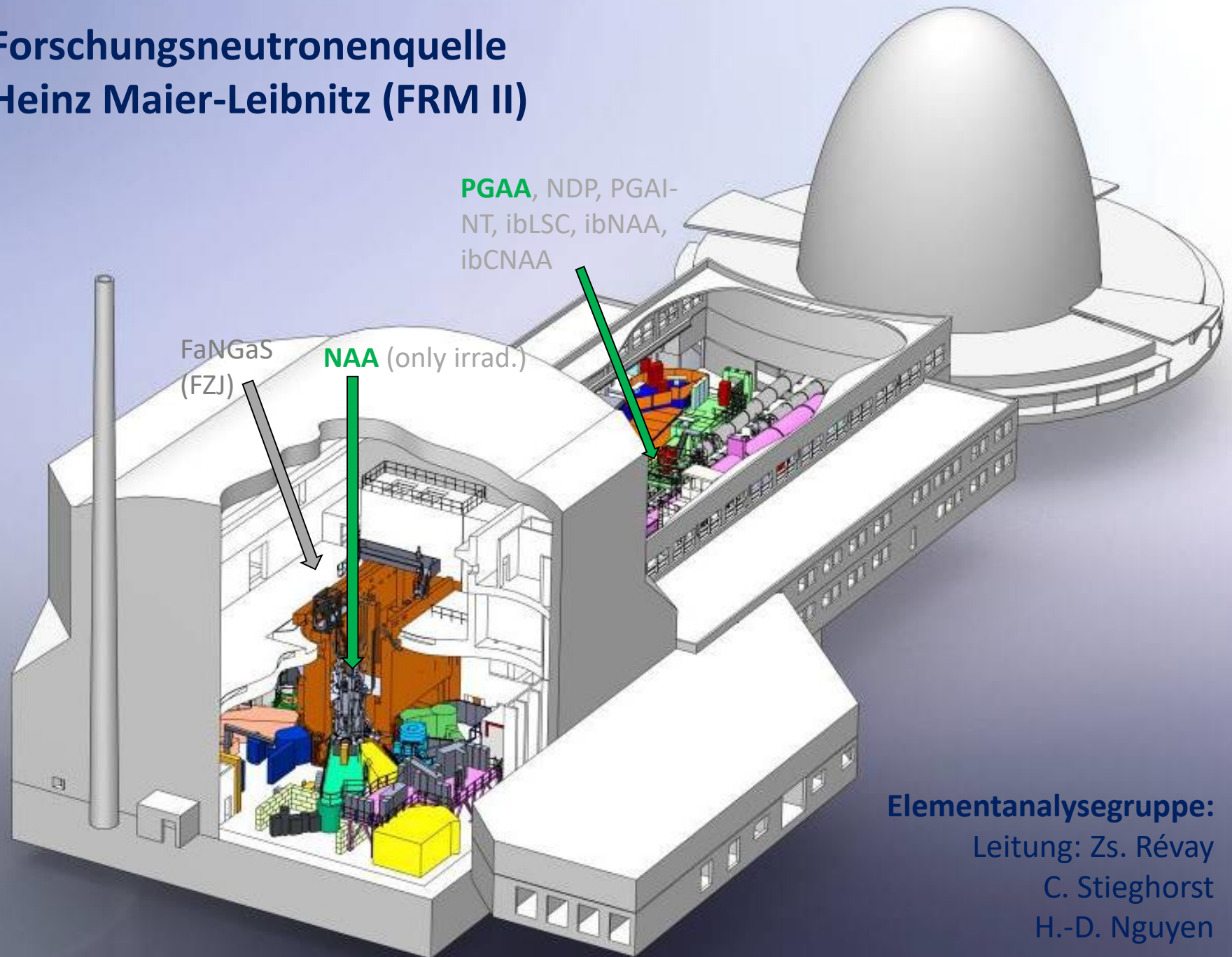
AiNT GmbH – MetalClass

<https://www.nuclear-training.de/forschungsprojekte-details/metall-class.html>

Tel.: +49 02402 10215-14

E-Mail: krycki@nuclear-training.de

Forschungsneutronenquelle Heinz Maier-Leibnitz (FRM II)



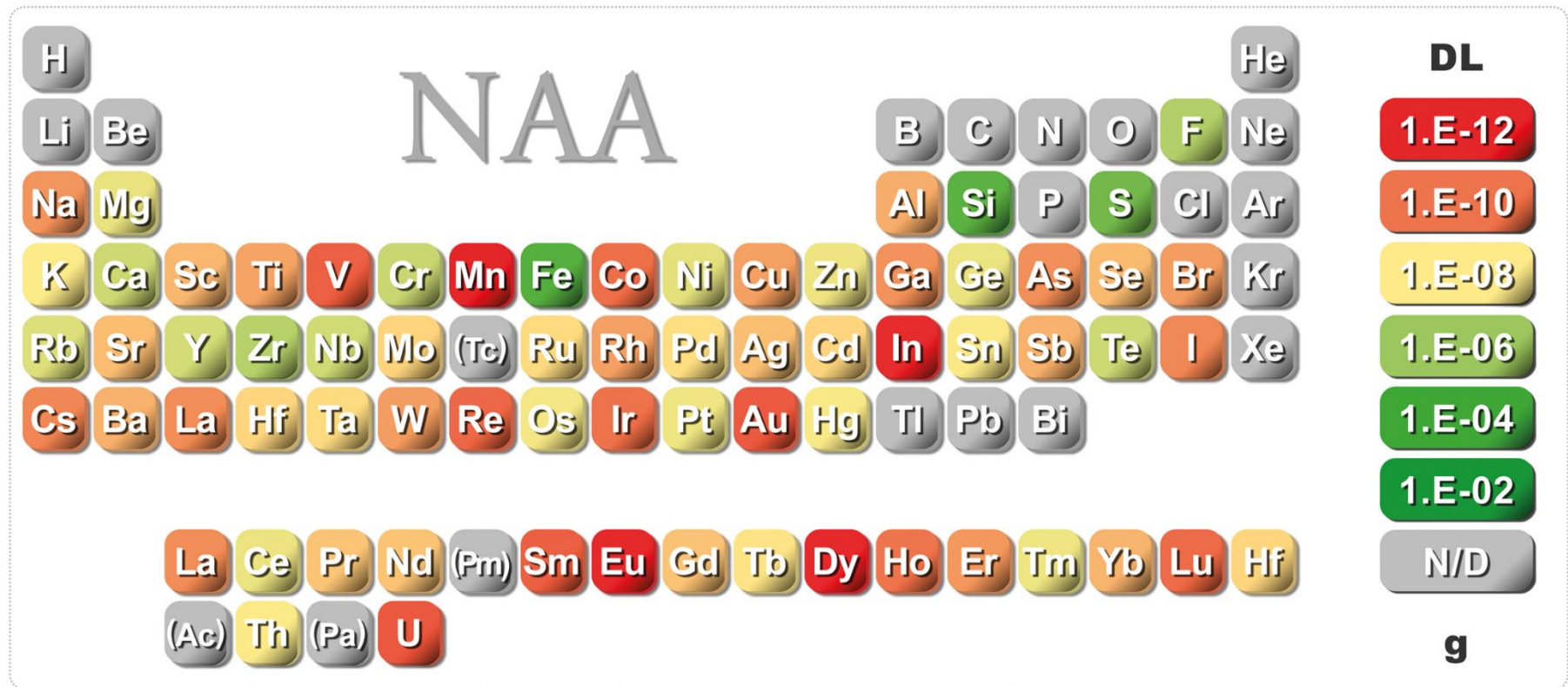
Elementanalysegruppe:

Leitung: Zs. Révay

C. Stieghorst

H.-D. Nguyen

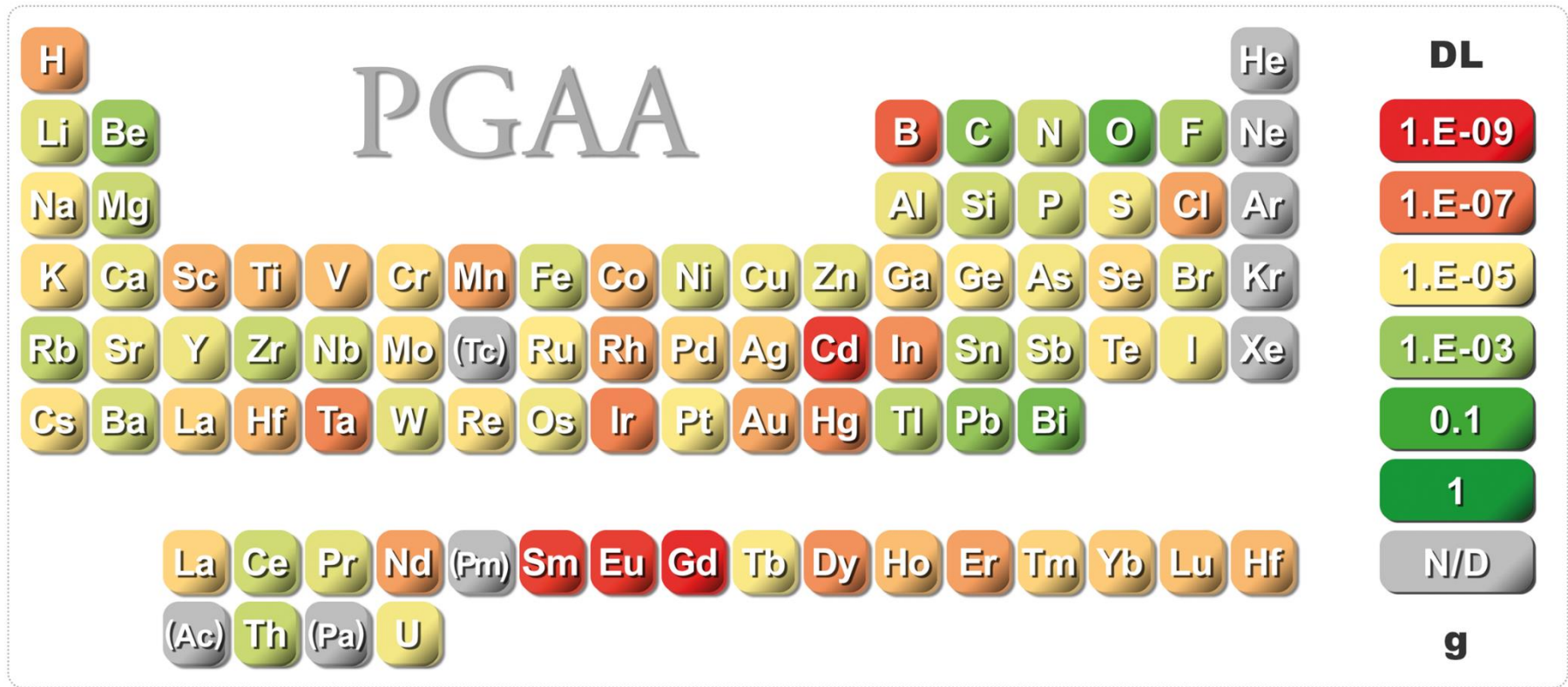
Sensitivität von NAA (typisches geologisches Material)



In-beam NAA: DL in g / INAA: DL in mg (ppt/ppq-Level möglich!)

INAA = Instrumentelle Neutronenaktivierungsanalyse (keine chem. Aufbereitung)

Sensitivität von PGAA (typisches geologisches Material)



Komplementäre Methoden!