

Генетические алгоритмы для обучения нейронных сетей при создании оптических углеродных наносенсоров ионов металлов

Куприянов Г.А.¹, Доленко С.А.², Исаев И.В.², Сарманова О.Э.¹, Доленко Т.А.¹

gavriil101@yandex.ru

¹ Физический факультет, МГУ им. М.В.Ломоносова

² НИИЯФ им. Д.В.Скобельцина, МГУ

Благодаря высокой чувствительности фотOLUMИнесценции (ФЛ) к изменению параметров окружающей среды, в том числе, типа и концентрации растворенных ионов, углеродные точки (УТ) имеют широкие перспективы применения в качестве оптических наносенсоров катионов металлов в технологических средах [1]. При создании подобных сенсоров необходимо решить многопараметрическую обратную задачу люминесцентной спектроскопии, заключающуюся в определении концентрации каждого из растворенных ионов в среде по изменению спектров люминесценции УТ, обусловленному взаимодействием УТ с ионами. Линейные модели, такие МРК (многомерное разрешение кривых) и ПЛС (проекция на латентные структуры), не дают необходимое качество предсказаний [2]. Нелинейные модели, превосходя линейные по получаемому качеству предсказания, имеют сложную, многоэкстремальную минимизируемую функцию ошибки. Учитывая большую размерность входных данных, а, значит, и подбираемых весов нейронной сети (НС), градиентные методы склонны к преждевременному схождению в локальные минимумы функции ошибки, что приводит к неполному использованию потенциала НС. Один из путей решения проблемы преждевременной сходимости - использование популяционных методов для обучения НС.

В данной работе исследуется возможность применения генетического алгоритма в качестве оптимизатора для решения обратной задачи люминесцентной спектроскопии - определения концентрации каждого из ионов Cu^{2+} , Ni^{2+} , Cr^{3+} , $(\text{NO}_3)^-$ в воде по спектрам ФЛ УТ - с помощью моделей нейронных сетей. Генетический алгоритм (ГА) - один из наиболее широко используемых популяционных методов. На каждой итерации ГА оперирует набором решений, что позволяет более полно по сравнению с градиентными методами исследовать оптимизируемую функцию и найти наилучшее решение [3]. В настоящей работе представлены результаты применения ГА для подбора весов НС различных архитектур при решении указанной многопараметрической обратной задачи люминесцентной спектроскопии [1]. Проведен сравнительный анализ с классическими методами подбора весов нейронной сети - градиентными методами, который показал большие возможности применения ГА.

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда № 22-12-00138, <https://rscf.ru/project/22-12-00138/>; стипендии развития теоретической физики и математики фонда «БАЗИС» №23-2-1-65-1.

Ссылки

1. O. Sarmanova, K. Laptinskiy, S. Burikov, G. Chugreeva, T. Dolenko, Implementing neural network approach to create carbon-based optical nanosensor of heavy metal ions in liquid media, SAA: Molecular and Biomolecular Spectroscopy (2023), **286**, 122003.
2. A. Efitov, S. Burikov, T. Dolenko, I. Persiantsev, S. Dolenko, Comparison of the quality of solving the inverse problems of spectroscopy of multi-component solutions with neural network methods and with the method of projection to latent structures, Information Optics (2015), **24**, 93.
3. G. Kupriyanov, I. Isaev, I. Plastinin, T. Dolenko, S. Dolenko, Decomposition of Spectral Contour into Gaussian Bands using Gender Genetic Algorithm, Proceedings of Science (2022), **429**, 9.