DLCP-2026, НИИЯФ МГУ, 6-8 июля 2026

Вычисление моментов как способ параметризации 2D-карт фотолюминесценции при решении обратной задачи спектроскопии

Г.А.Куприянов[1,2], И.В.Исаев[2], К.А.Лаптинский[1,2], С.А.Доленко[1,2], Т.А.Доленко[1]

[1]*Физический факультет Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова, Москва*

[2]*Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д.В.Скобельцына, Москва*

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-12-00138-П, https://rscf.ru/project/22-12-00138/

Углеродные точки

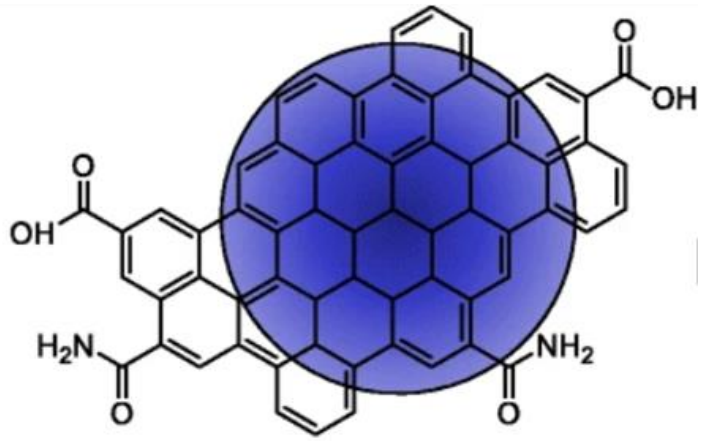
Углеродные точки (УТ) – наночастицы с углеродным ядром и химически разнообразной поверхностью

Свойства УТ:

1. Интенсивная, стабильная по времени фотолюминесценция (ФЛ)
2. Чувствительность ФЛ УТ к изменениям параметров среды – в том числе, к наличию различных ионов
3. Биосовместимость

Области применения:

1. Наносенсорика
2. Биовизуализация
3. Тераностика



F. Yan et al. Microchim Acta 186, 2019

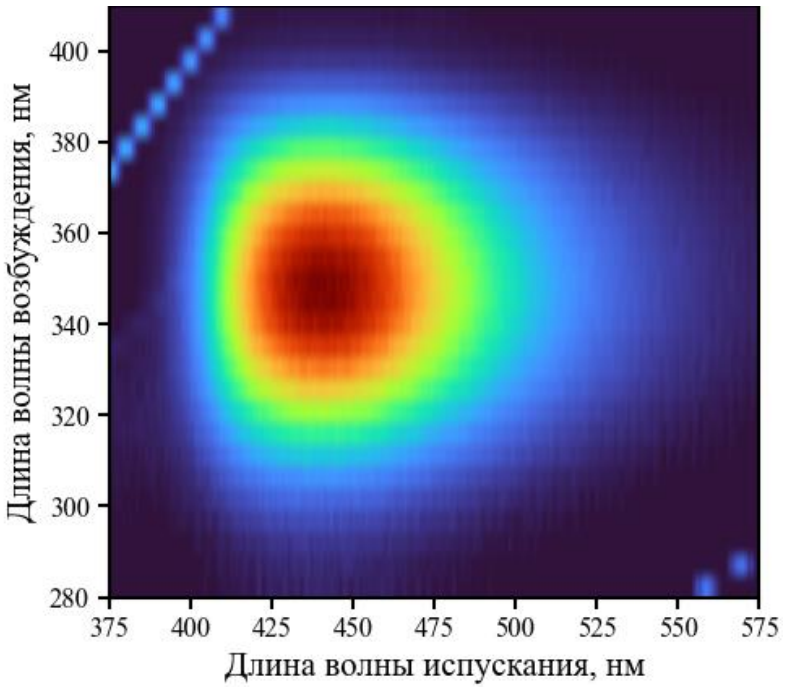
2D-карты ФЛ углеродных точек

Степень влияния катионов металлов на ФЛ УТ[1]:

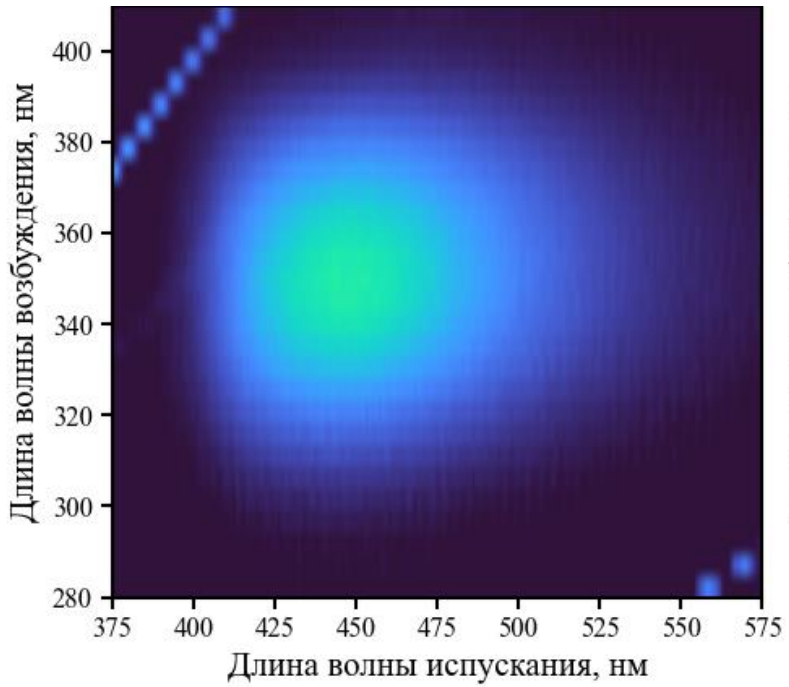
$Fe^{3+}>Cr^{2+}>Cu^{2+}>Co^{3+}>Pb^{2+}>Ni^{2+}>Al^{3+}>Mg^{2+}=Zn^{2+}$

[1] Vervald et al., J. Phys. Chem., 2023

Cr^{3+}: 0 мМ



Cr^{3+}: 3 мМ



Cr^{3+}: 6 мМ

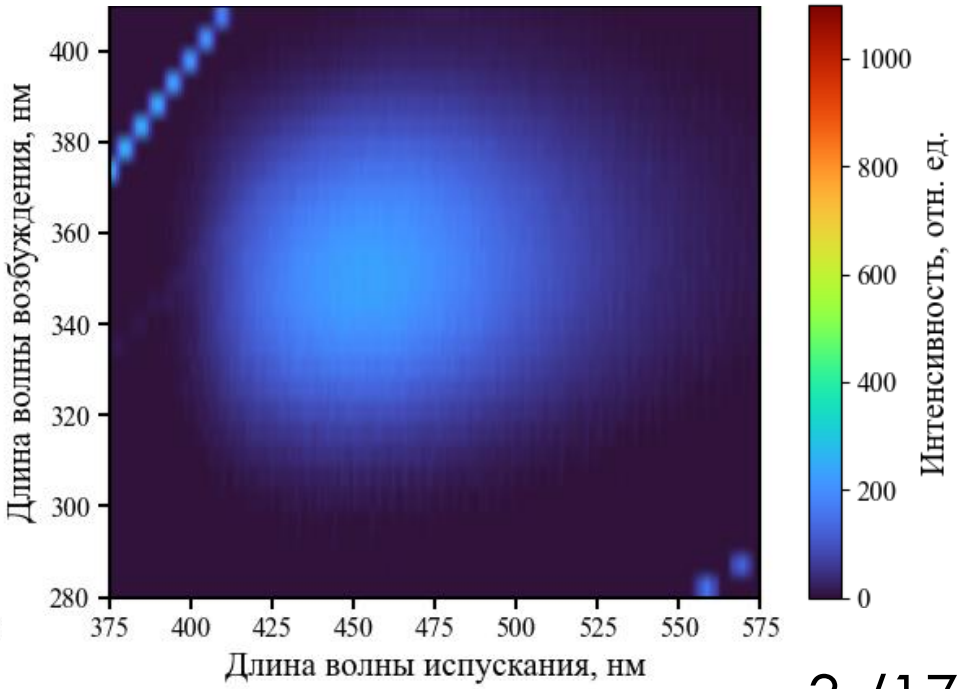
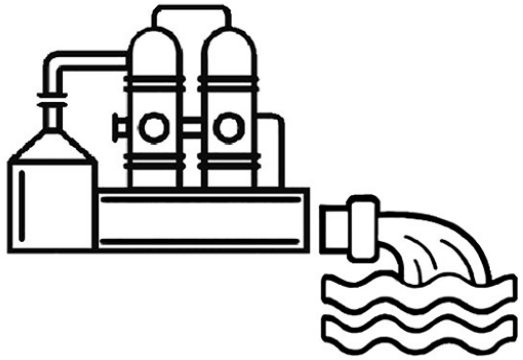


Схема применения сенсора на основе УТ

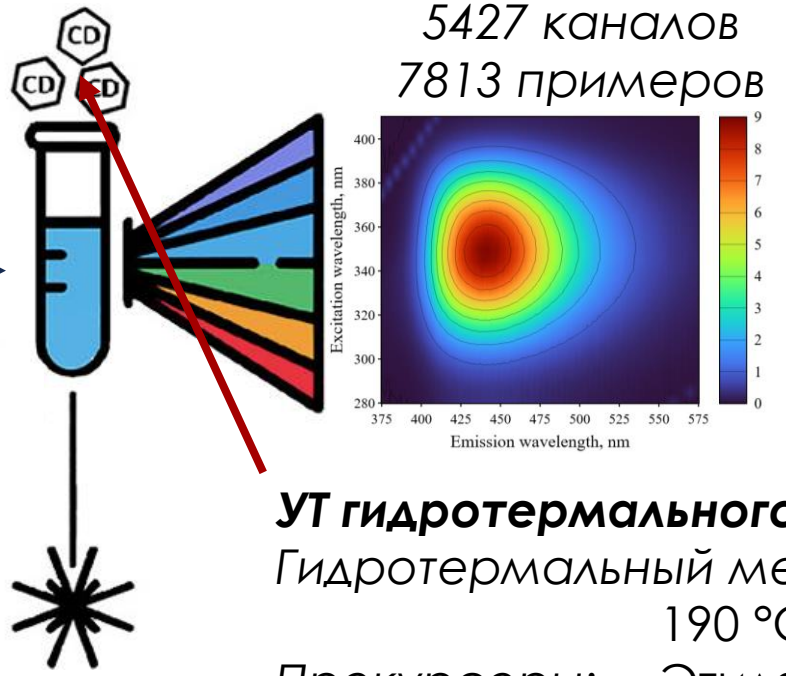
1. Пробоотбор

2. Спектральный анализ образца

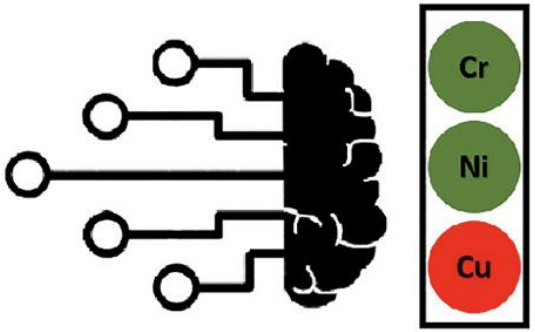
3. Решение обр. з. спектроскопии с помощью искусственных нейронных сетей



3-мерная сетка концентраций ионов:
Cu^{2+}, Ni^{2+}, Pb^{2+}, Co^{2+}, Al^{3+}, Cr^{3+}, NO_3^-



5427 каналов
7813 примеров



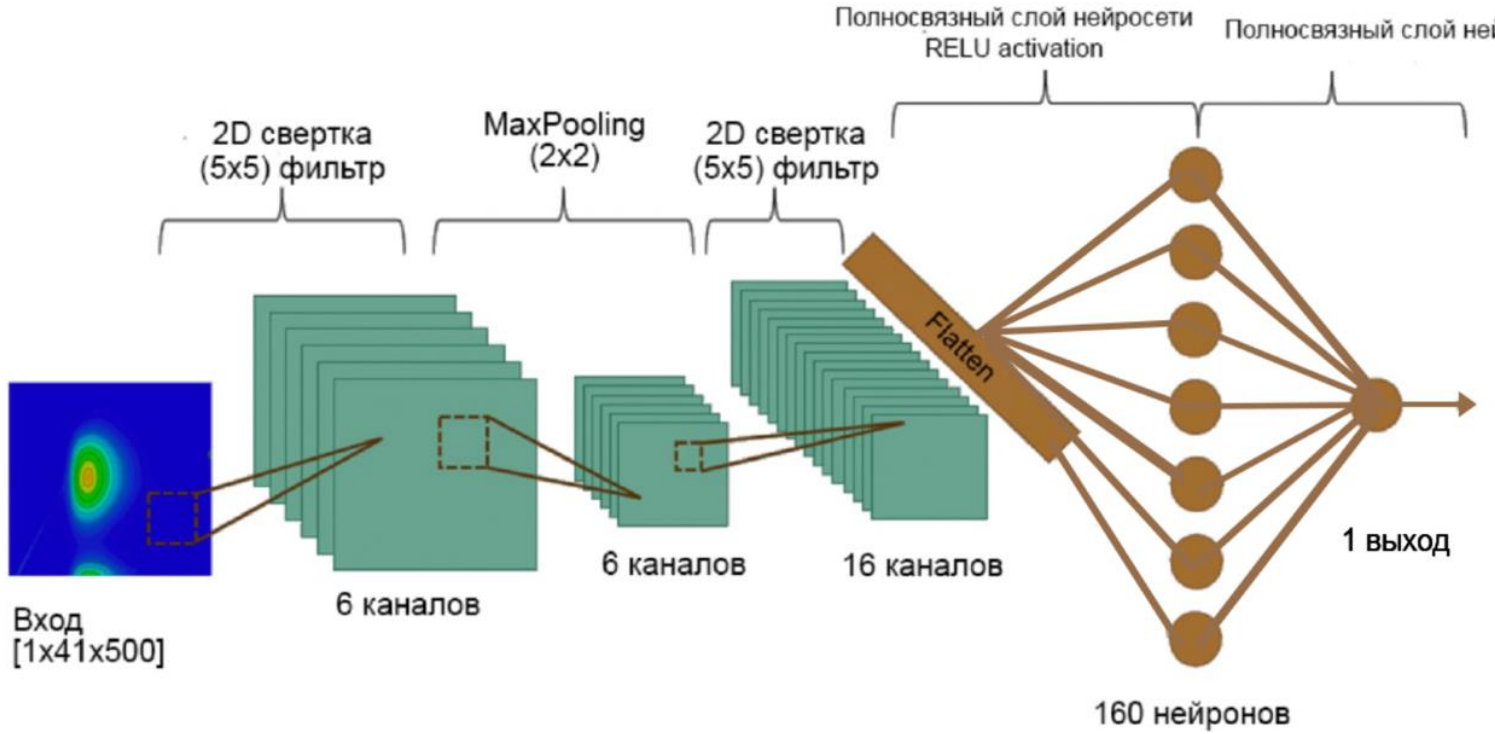
УТ гидротермального синтеза:
Гидротермальный метод синтеза: 190 °C, 4 часа.
Прекурсоры: Этилендиамин; Лимонная кислота.
Концентрация УТ в растворе: 5 мг/л

[Chugreeva et al., Scientific Reports 2026]
[Sarmanova et al., Spectrohimica Acta 2023]

Подход глубокого обучения

Обработка 2D-карт ФЛ методами **компьютерного зрения**:

- Выделение признаков в процессе обучения глубокой модели
- Использование сверточных нейронных сетей



Chugreeva et al., Moscow Phys. Bull. 2024

Способы представления спектров

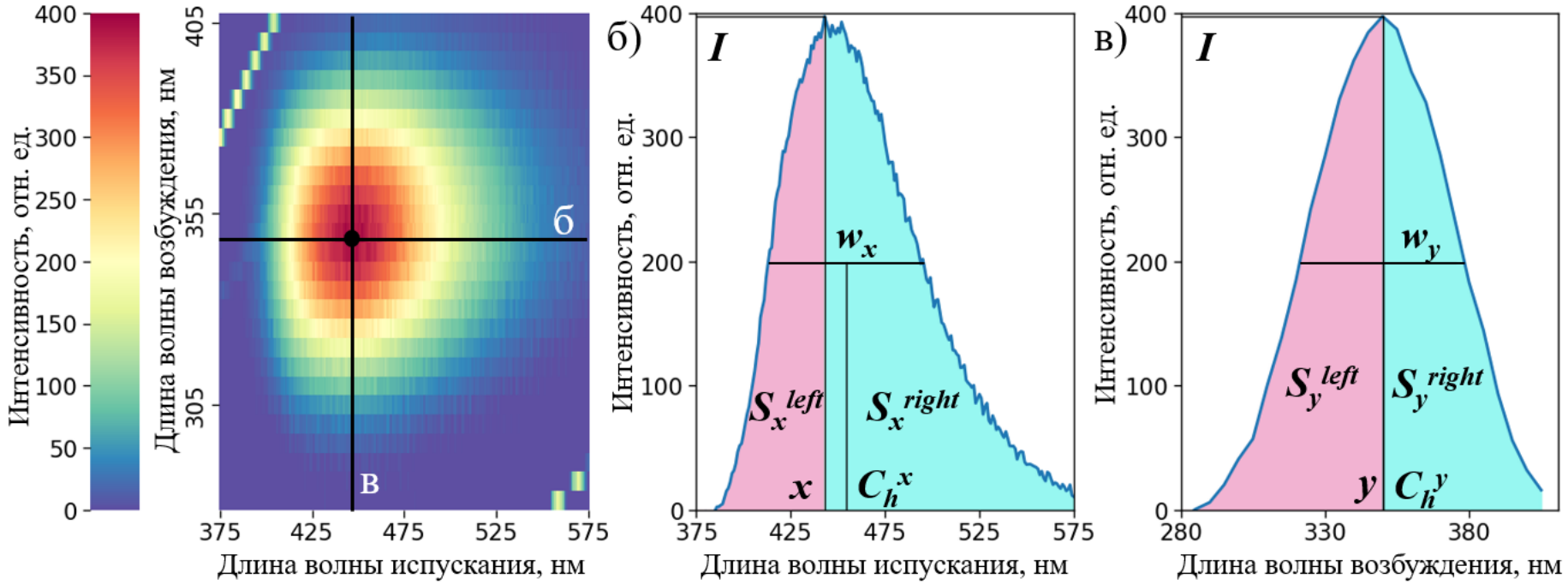
Параметризация 2D-карт ФЛ позволяет:

- Снизить размерность входного пространства на 3 порядка
- Построение классических моделей МО на полученных признаках

2D-карта ФЛ
~5000 признаков

X-сечение
~500 признаков

Y-сечение
~30 признаков



Параметризация X-сечения:
6 признаков

Параметризация X- / Y-сечения:
11 признаков

Kupriyanov et al., Optical Memory and Neural Networks, 2025

Цель работы:

Исследование эффективности представления 2D-карт ФЛ с помощью вычисления моментов для решения обратной задачи спектроскопии

Задачи:

1. Реализация разложения 2D-карт ФЛ по Полиномиальному базису, Лежандра, Фурье, Цернике.
2. Решение обратной задачи спектроскопии по определению концентраций 7 ионов (Ni^{2+}, Cu^{2+}, Co^{2+}, Pb^{2+}, Al^{3+}, Cr^{3+} и аниона NO_3^-) с помощью классических методов МО на полученных признаках.

Разложение карт ФЛ по базисным функциям

$$M^{a,b} = \iint \varphi^{a,b}(x,y) \cdot FL(x,y)dxdy \approx \sum_{x,y} \varphi^{a,b}(x,y) \cdot FL(x,y) \cdot \Delta x \Delta y$$

$M^{a,b}$- момент порядка $(a + b)$; $\varphi^{a,b}(x,y)$ - базисные функции; $FL(x,y)$ - 2D-карта ФЛ

1. Полиномиальный базис

$$\varphi_{pol}^{a,b}(x,y) = \sqrt[a+b]{(x-x_0)^a \cdot (y-y_0)^b}$$

2. Базис Лежандра

$$\varphi_{leg}^{a,b}(x,y) = (a+1/2) \cdot (b+1/2) \cdot P_a(x) \cdot P_b(y)$$

$P_i(x)$ - полиномы Лежандра

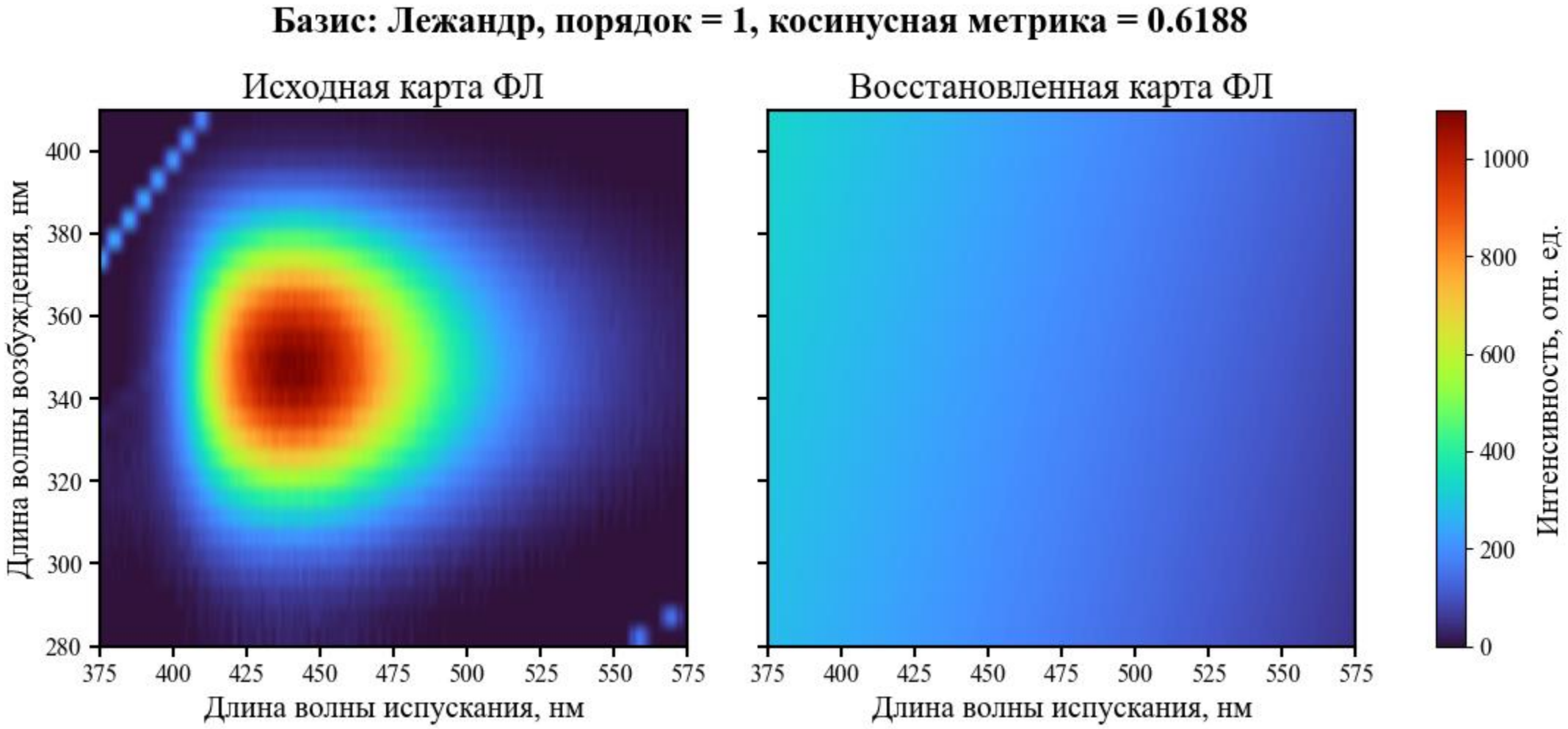
3. Базис Фурье

$$\varphi_{foir\,1}^{a,b}(x,y) = \cos(a\pi x) \cdot \cos(b\pi y)$$
$$\varphi_{foir\,2}^{a,b}(x,y) = \cos(a\pi x) \cdot \sin(b\pi y)$$
...

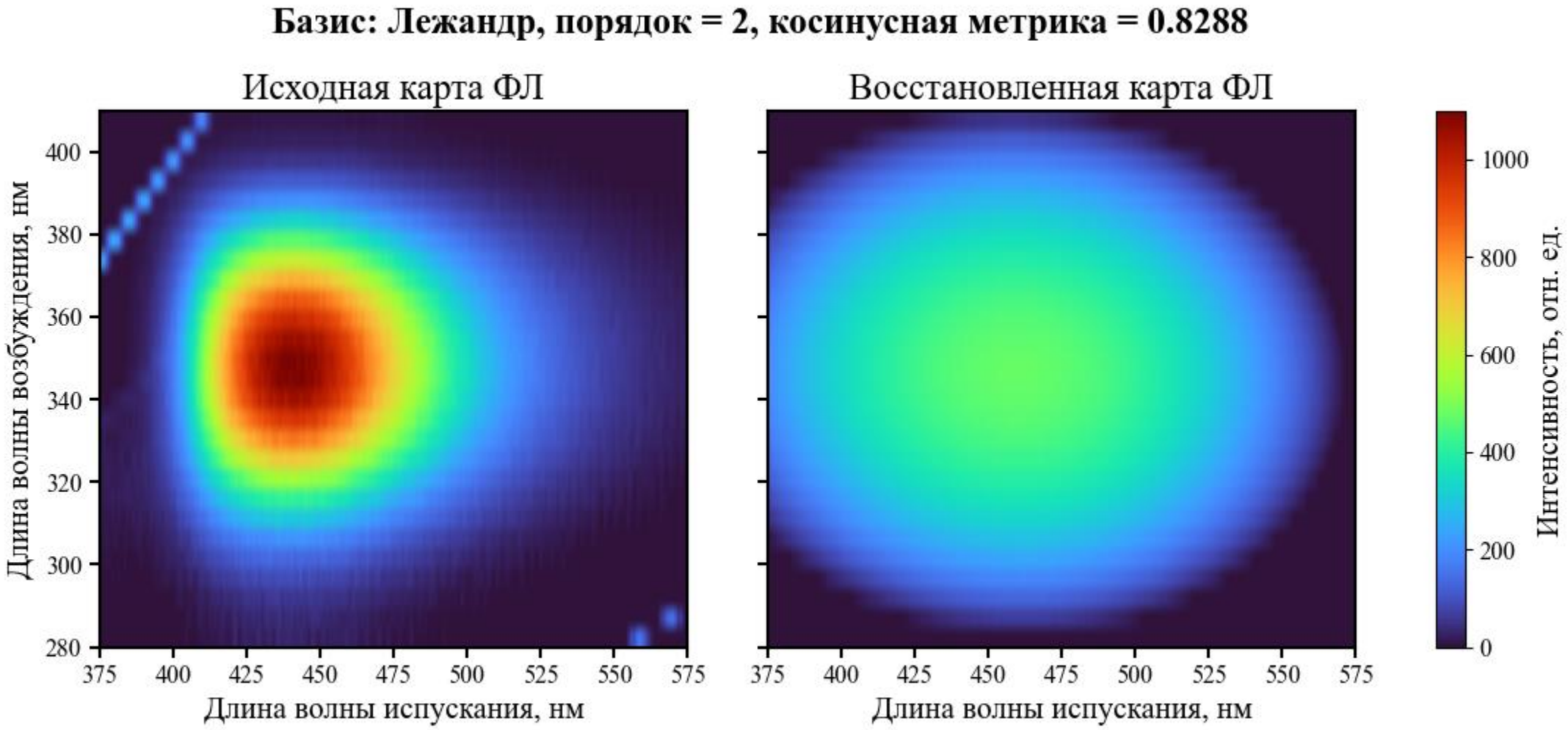
4. Полиномы Цернике

$$\varphi_{zern}^{a,b}(x,y) = R_a^{|b|}(r) \cdot \cos(m\theta)\,(m \geq 0)$$
$$\varphi_{zern}^{a,b}(x,y) = R_a^{|b|}(r) \cdot \sin(m\theta)\,(m < 0)$$

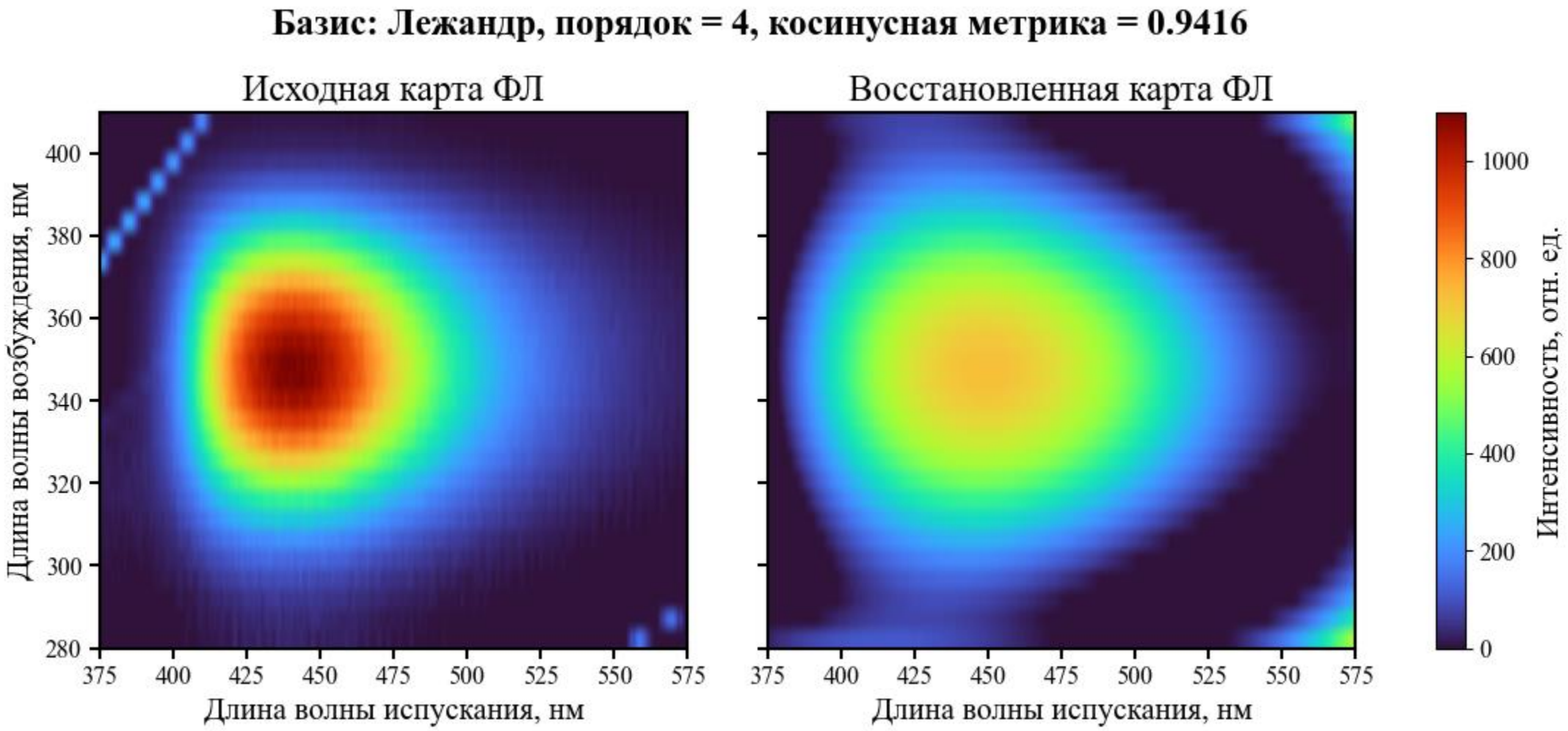
Разложение карт ФЛ по базисным функциям



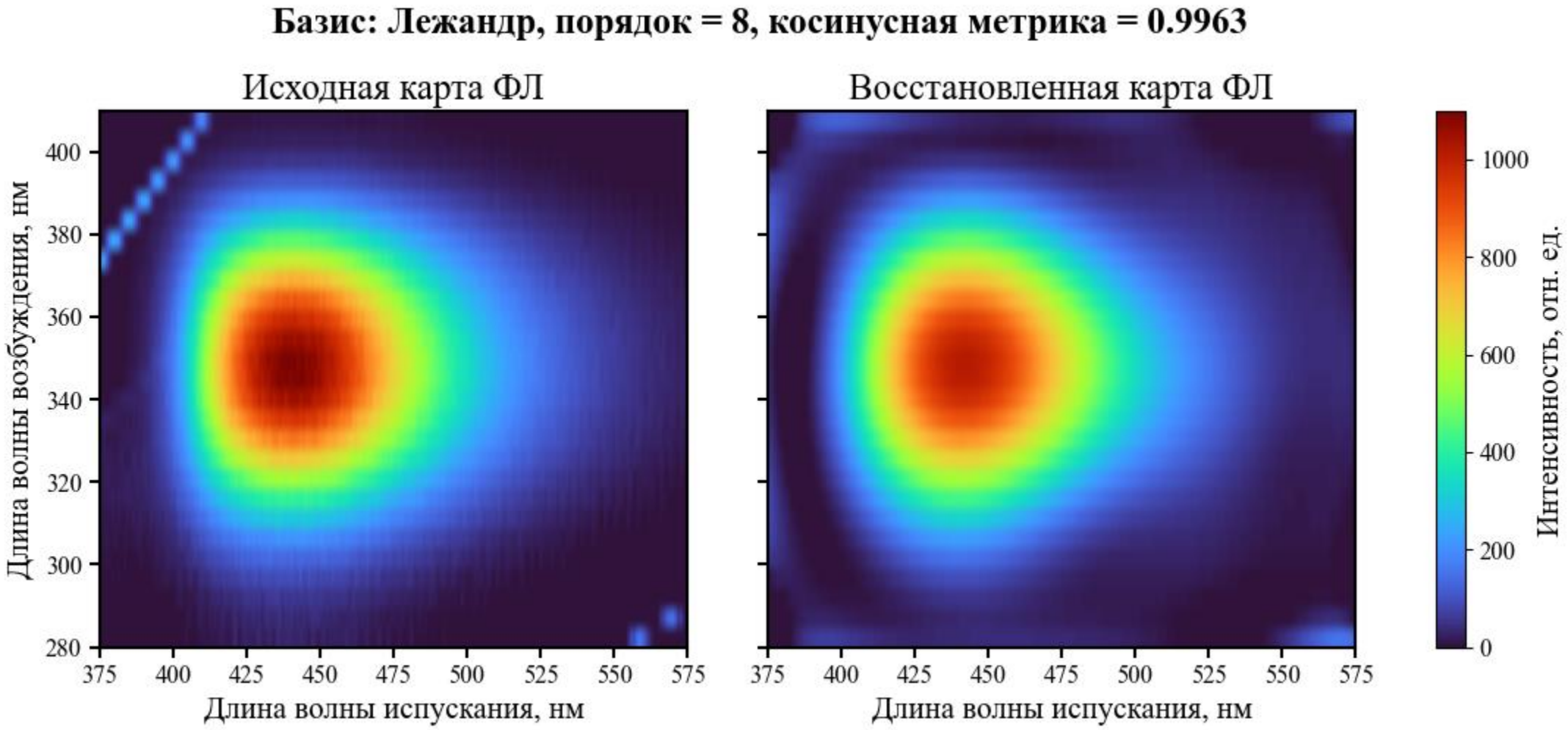
Разложение карт ФЛ по базисным функциям



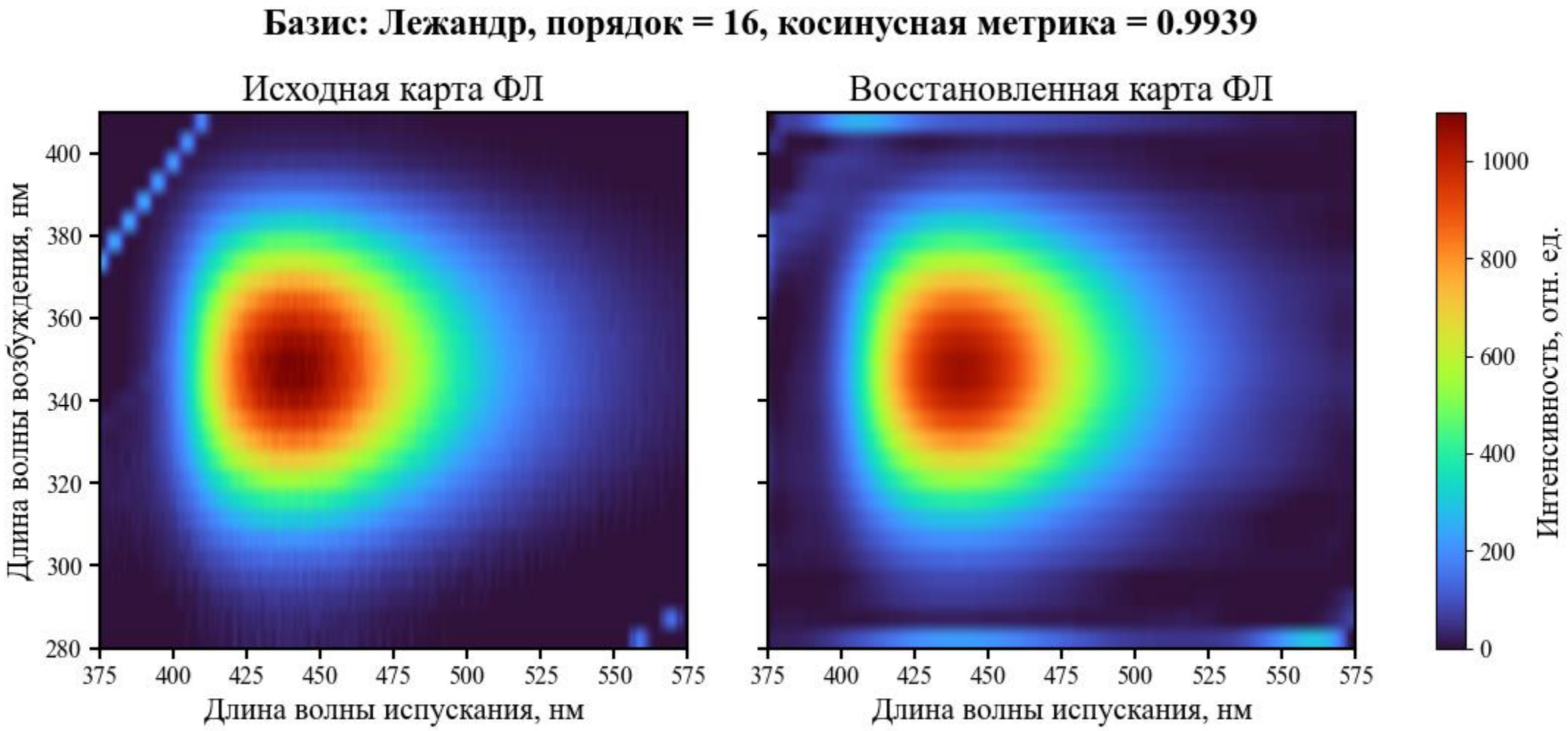
Разложение карт ФЛ по базисным функциям



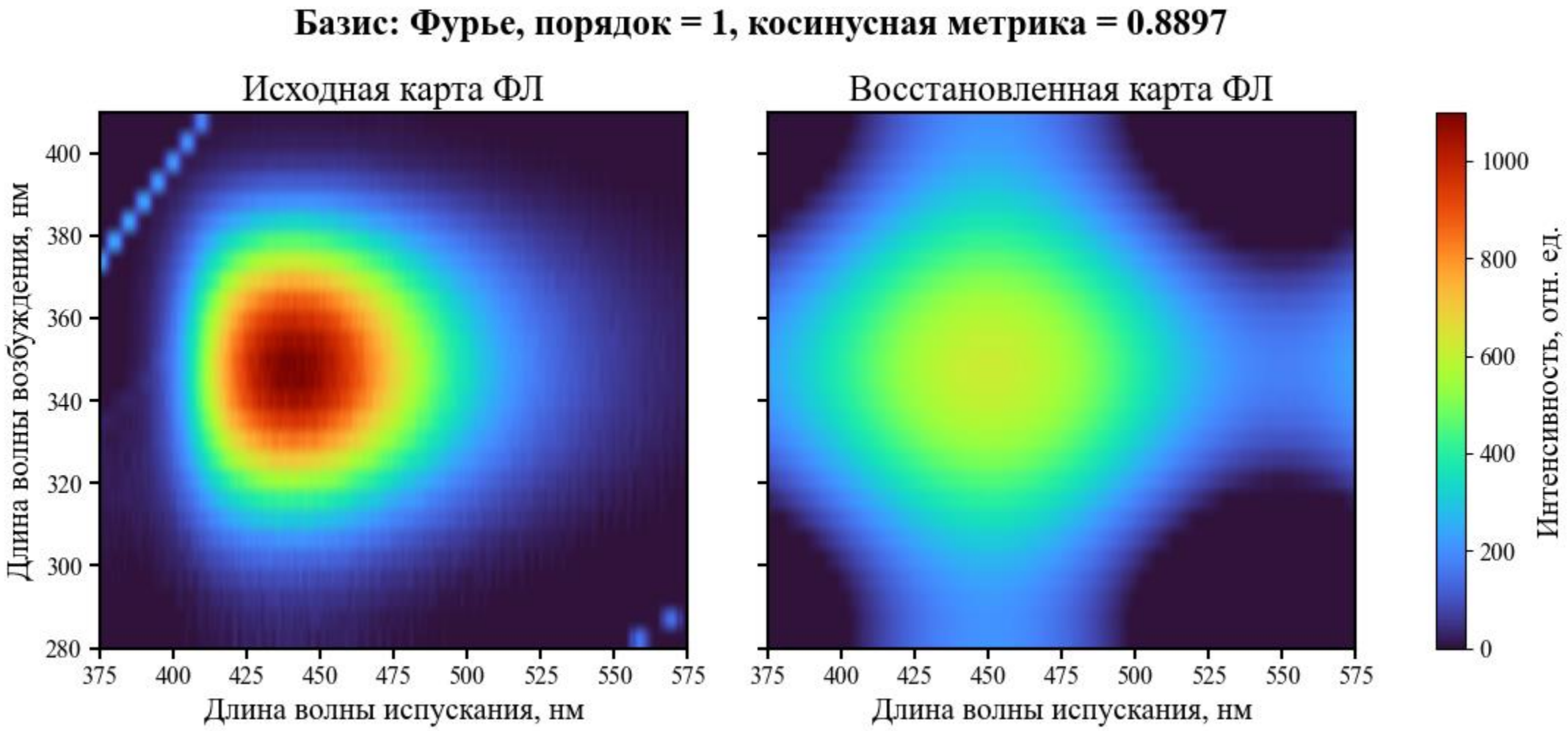
Разложение карт ФЛ по базисным функциям



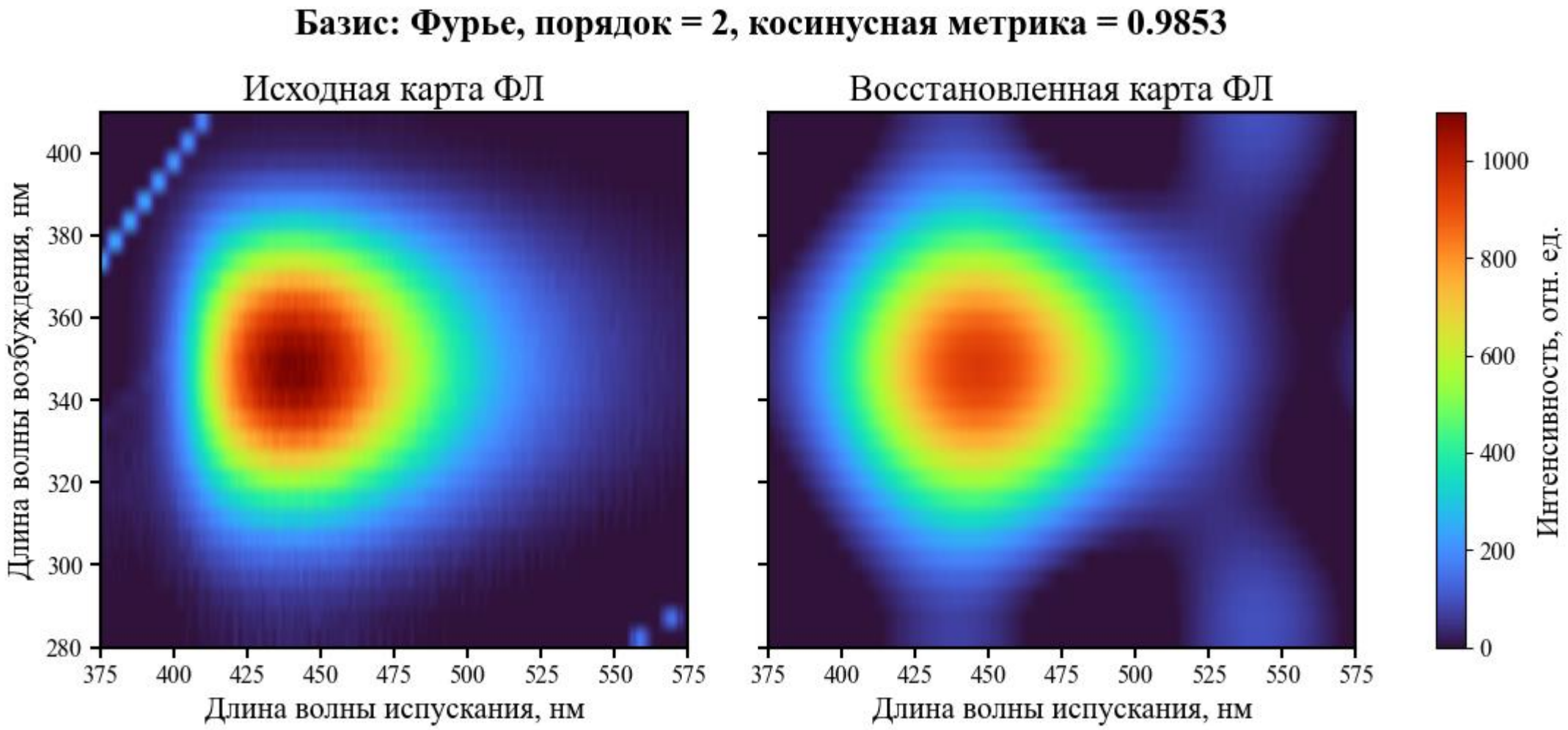
Разложение карт ФЛ по базисным функциям



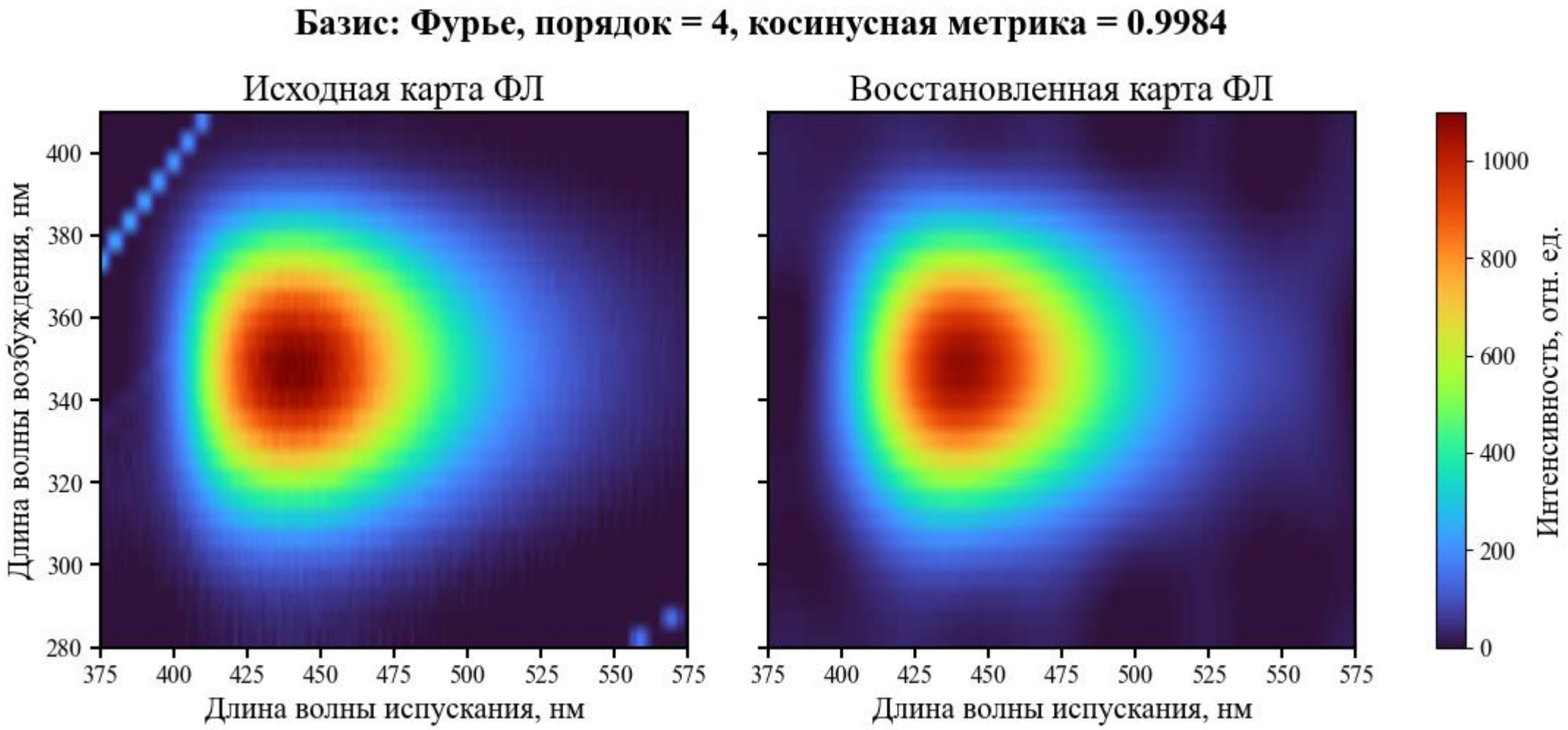
Разложение карт ФЛ по базисным функциям



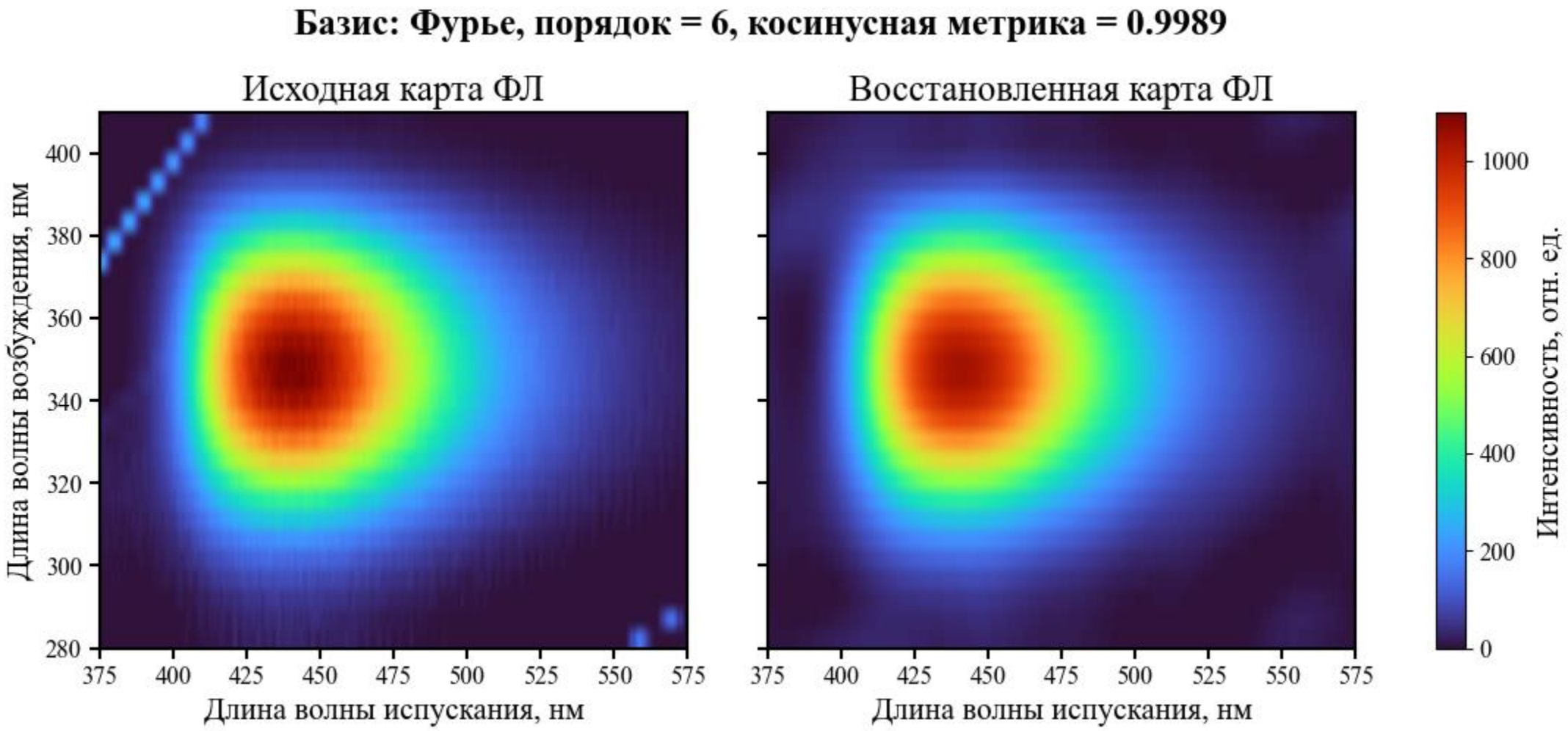
Разложение карт ФЛ по базисным функциям



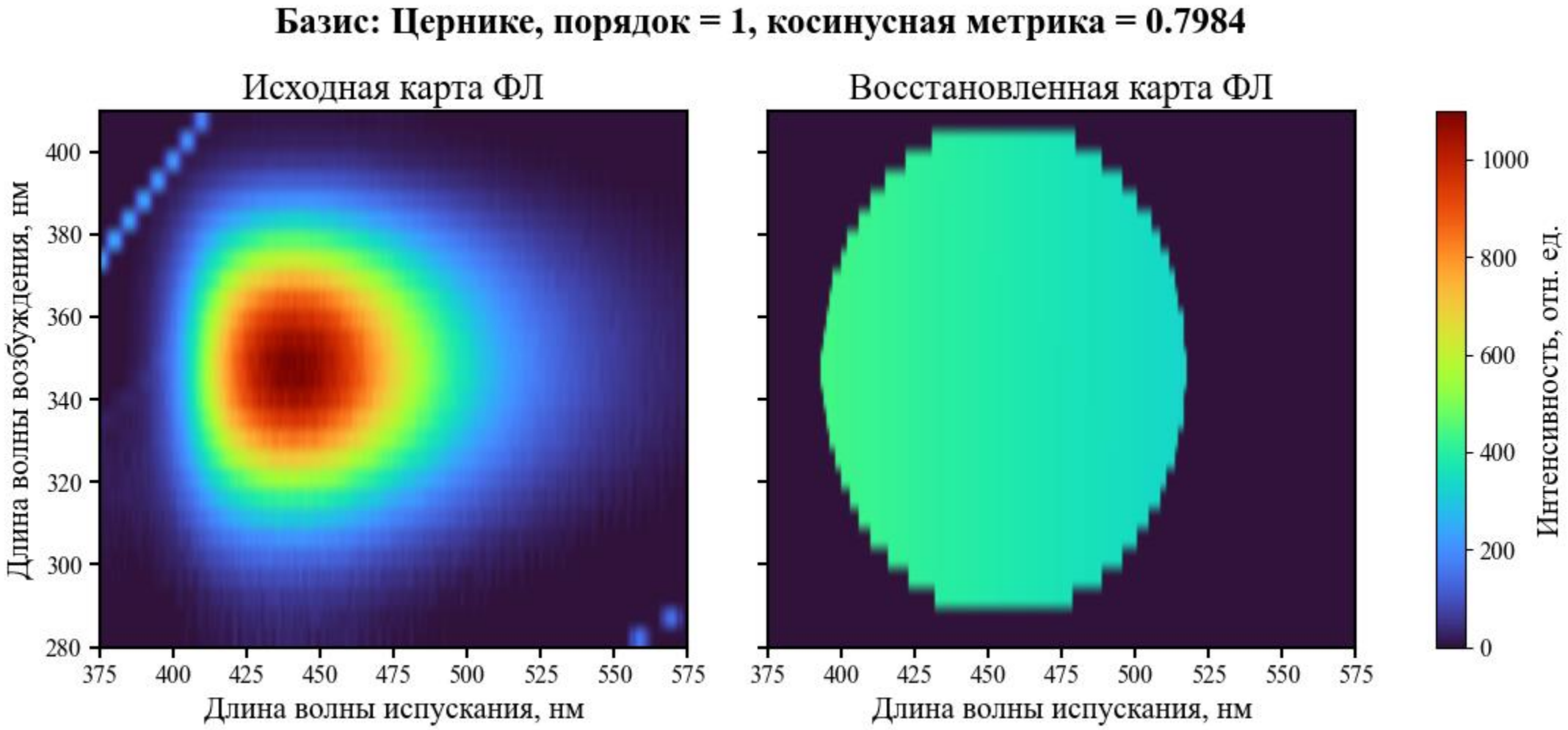
Разложение карт ФЛ по базисным функциям



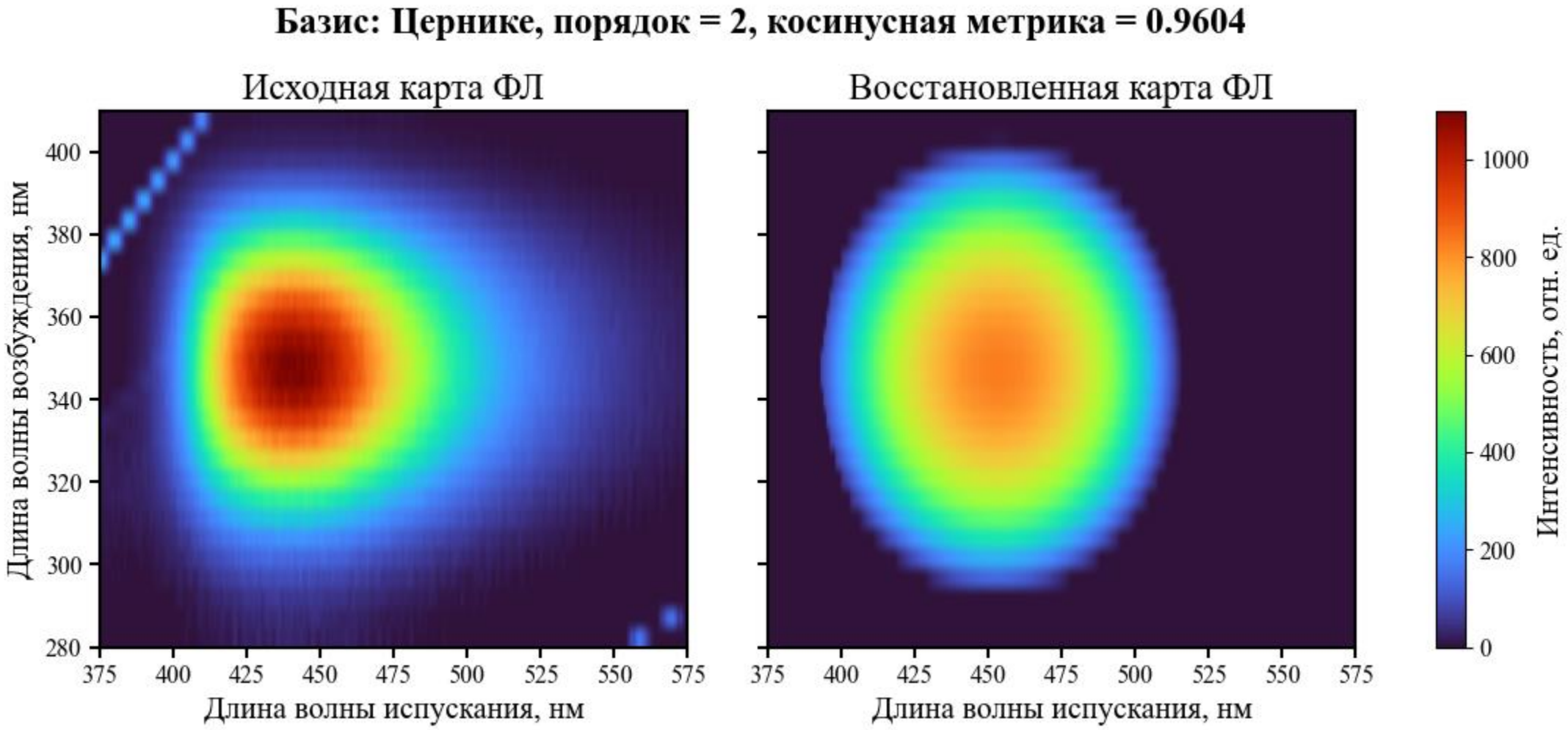
Разложение карт ФЛ по базисным функциям



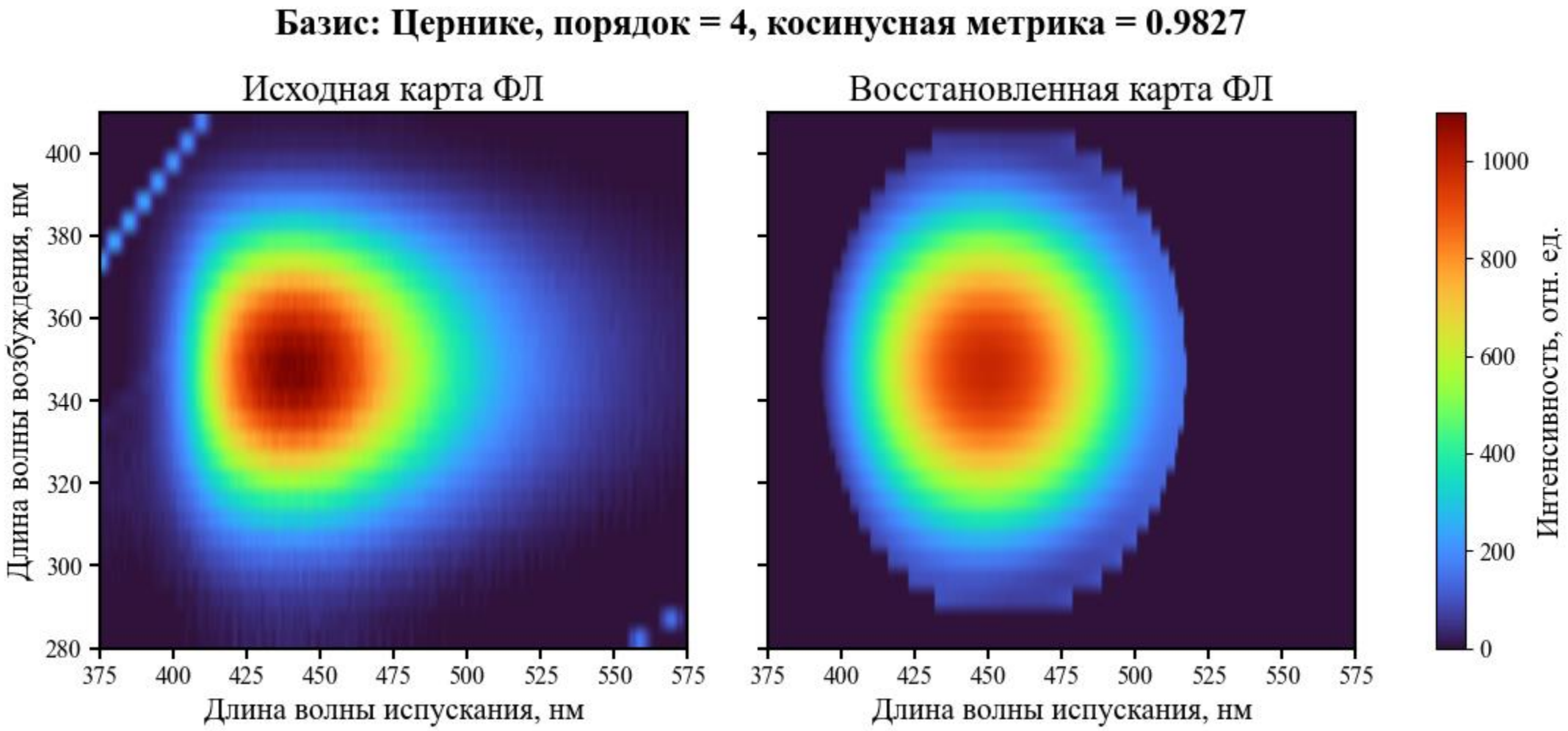
Разложение карт ФЛ по базисным функциям



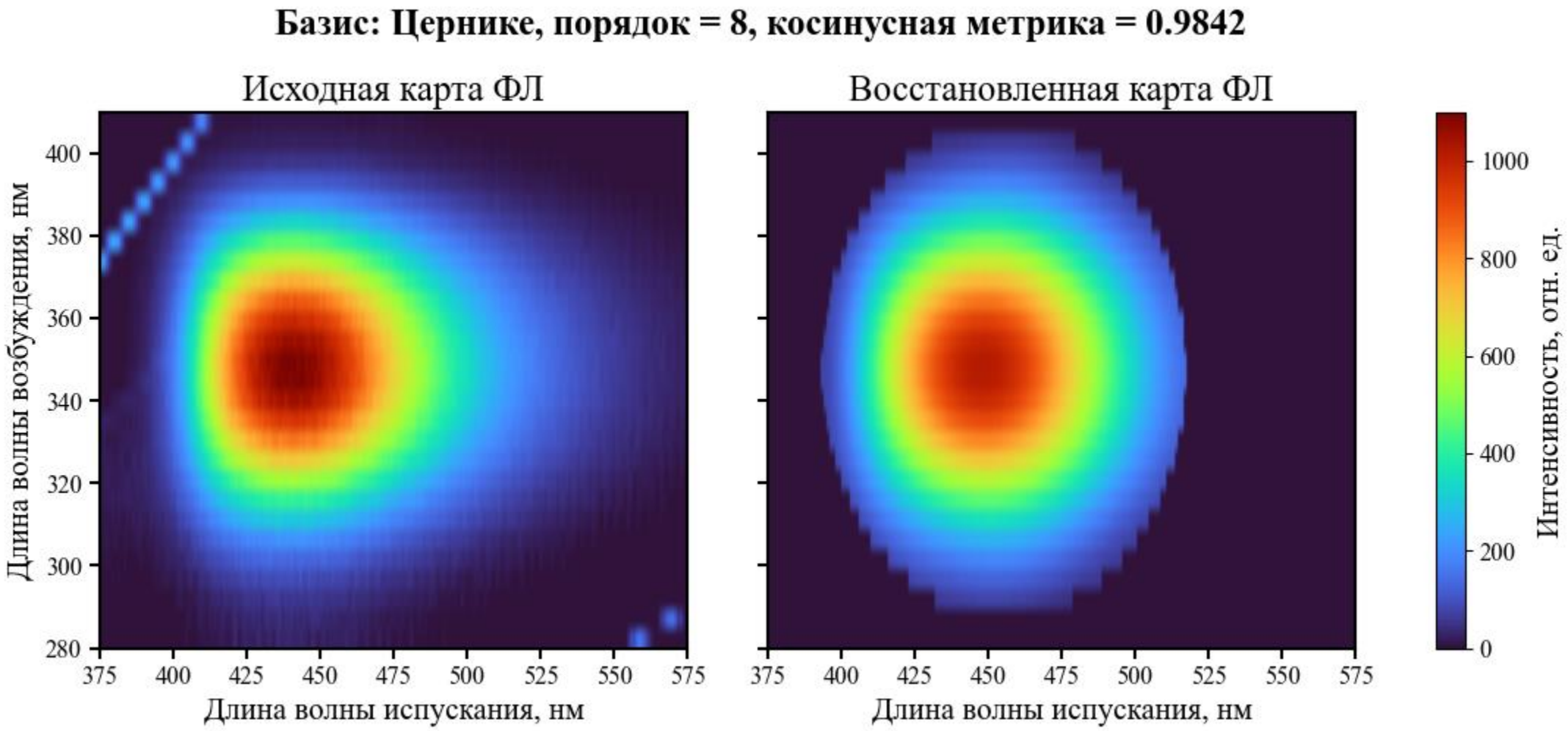
Разложение карт ФЛ по базисным функциям



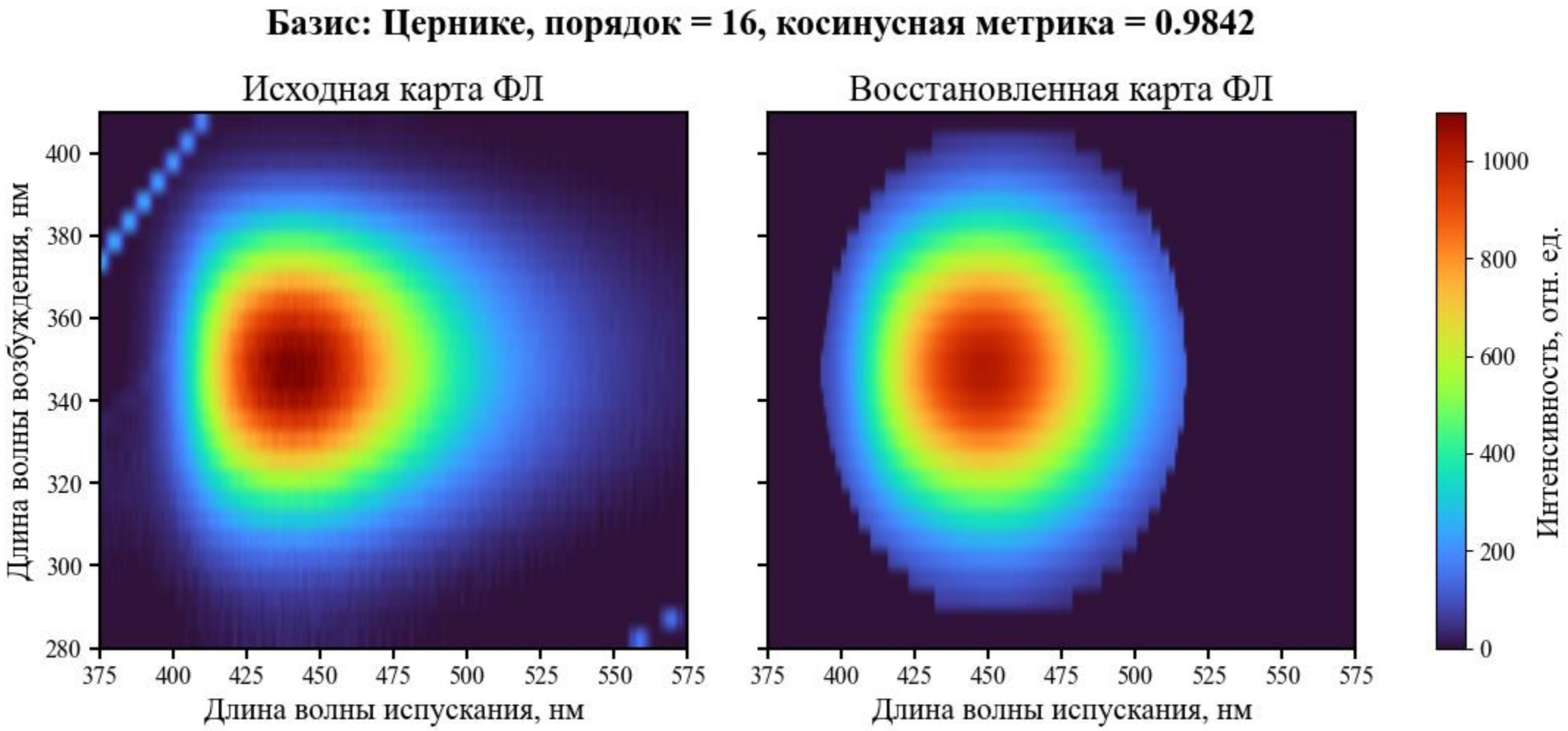
Разложение карт ФЛ по базисным функциям



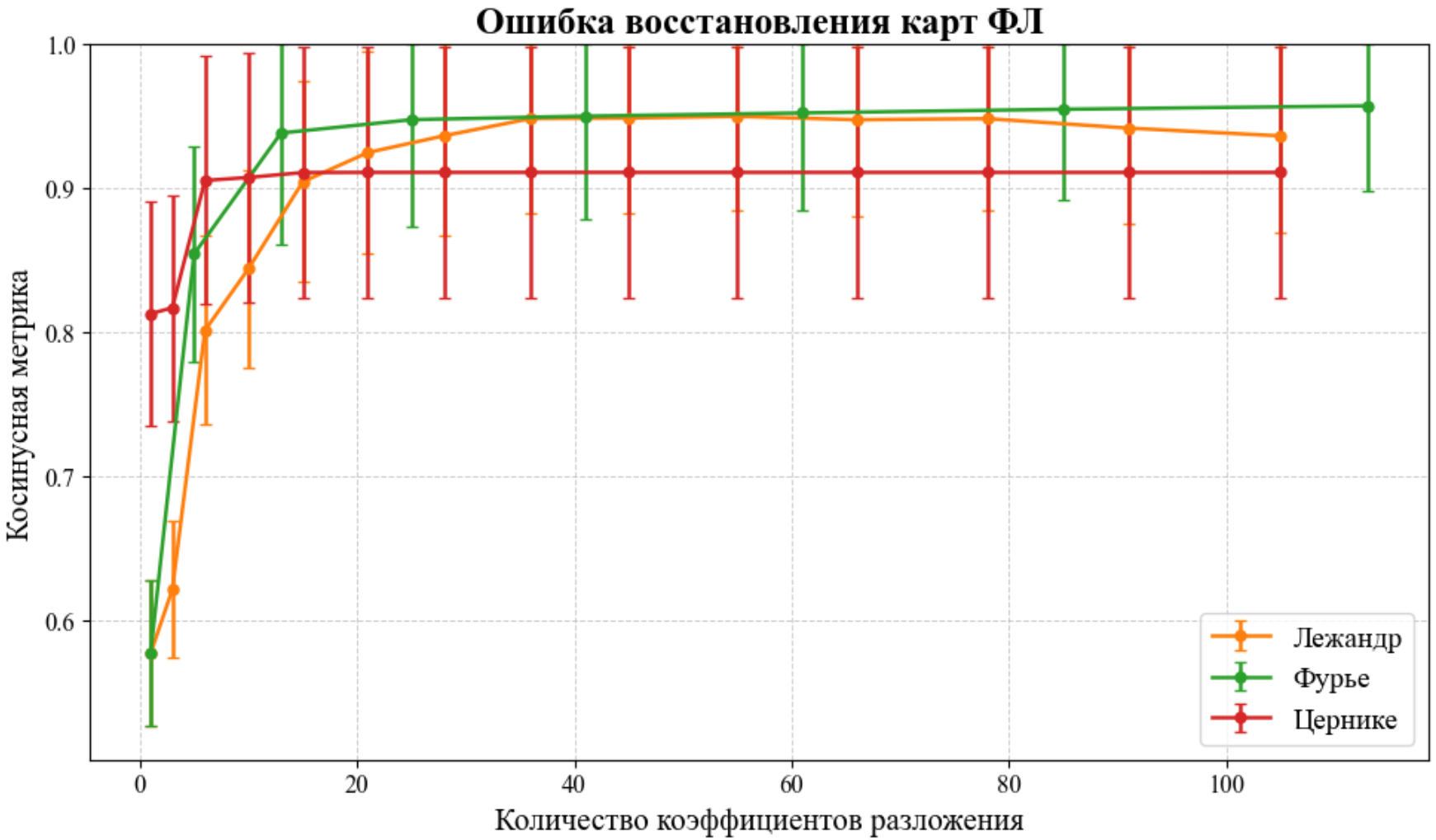
Разложение карт ФЛ по базисным функциям



Разложение карт ФЛ по базисным функциям



Разложение карт ФЛ по базисным функциям



- Базис Цернике наиболее эффективен при малых порядках коэффициентов разложения
- Прямоугольные базисы (Лежандра, Фурье) эффективны при высоких порядках коэффициентов разложения

Решение обратной задачи (О3) спектроскопии

Используемые моменты:

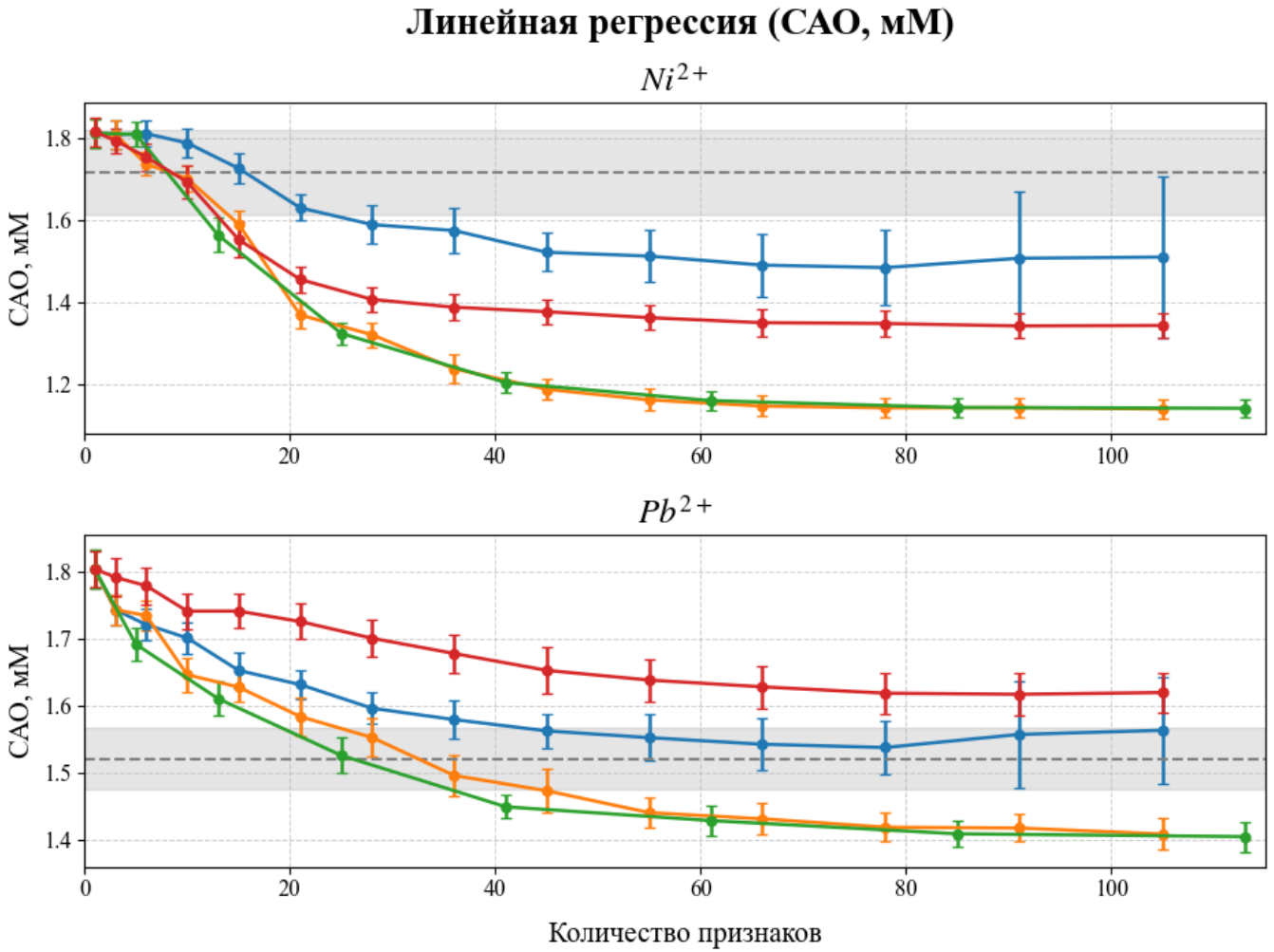
1. Полиномиальные. Порядок используемых моментов = [1, 13]
2. Лежандра. Порядок = [1, 13]
3. Фурье. Порядок = [1, 7]
4. Цернике. Порядок = [1, 13]

Используемые модели:

1. Линейная регрессия (sci-kit learn)
2. Случайный лес (sci-kit learn)
3. Градиентный бустинг (xgboost)

Базовая модель: Сверточная нейронная сеть (СНС): 1 сверточный слой,
2 полносвязных слоя с LeakyReLU в качестве актив. ф. (~4000 оптим. парам.)

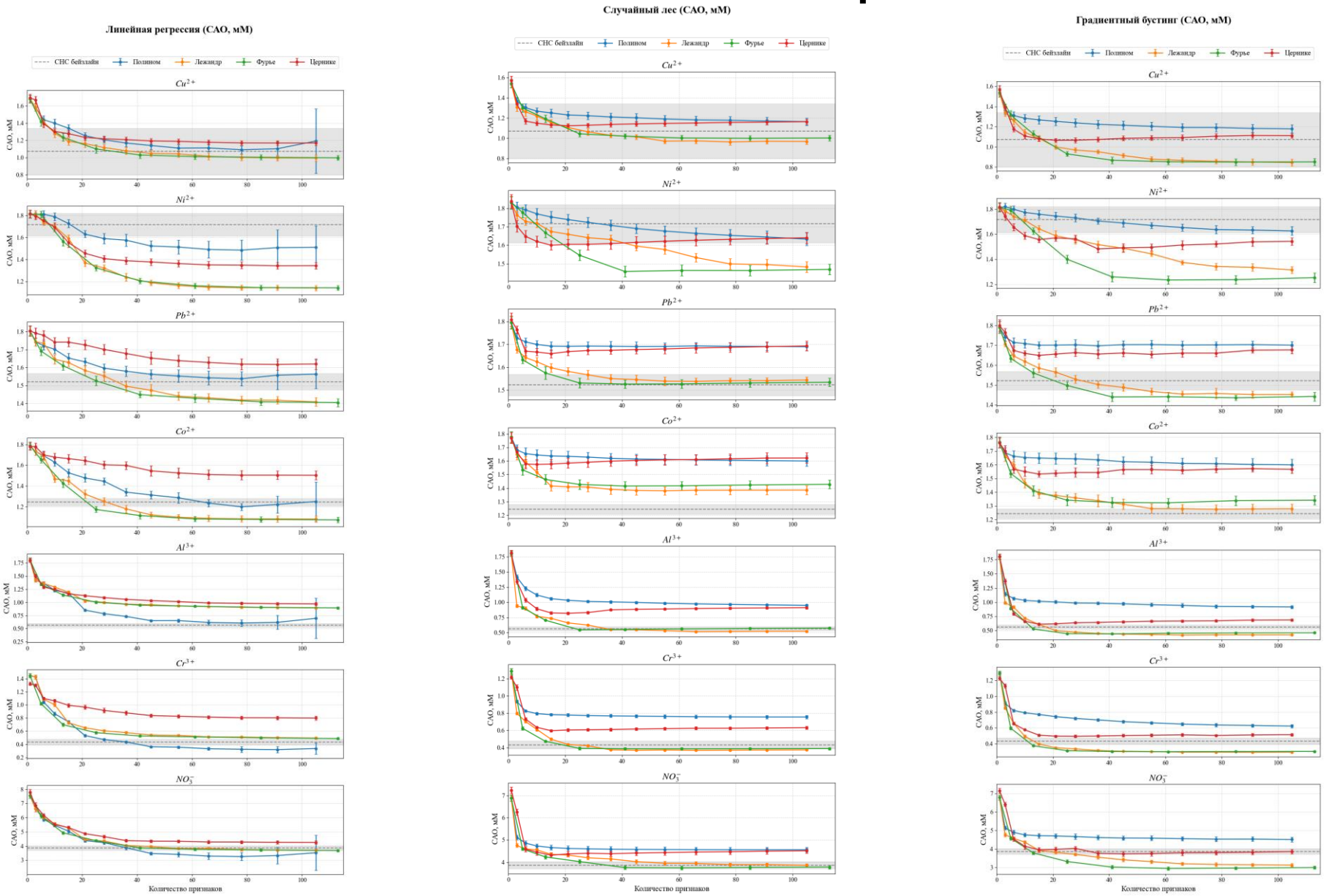
Решение О3 спектроскопии



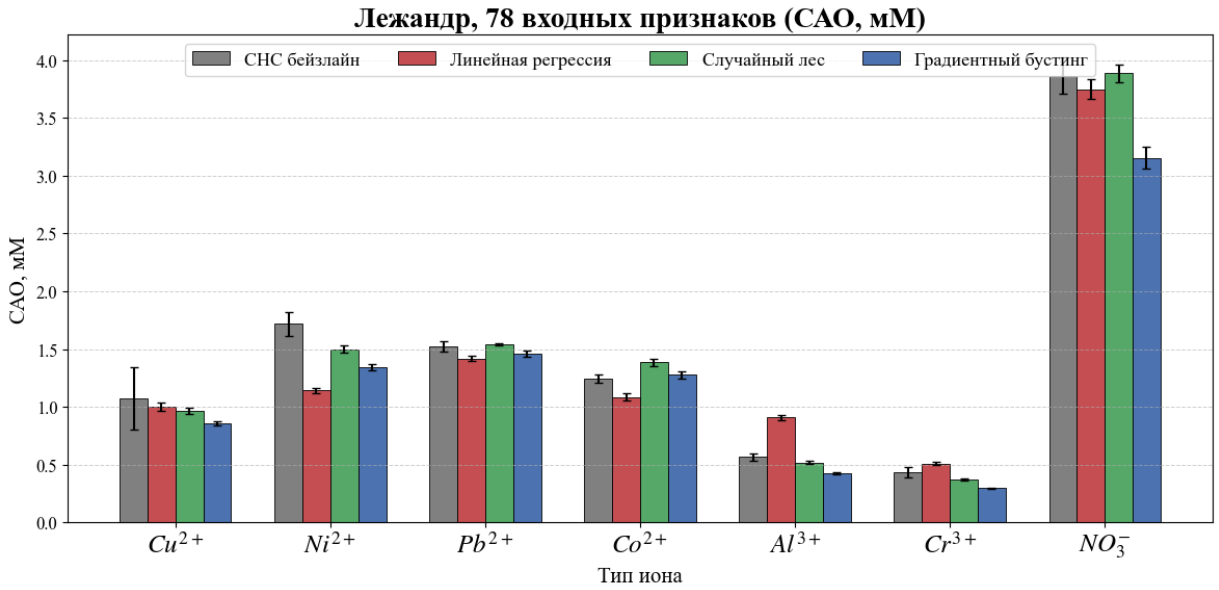
Разложение по базису 2D-карт ФЛ позволяет:

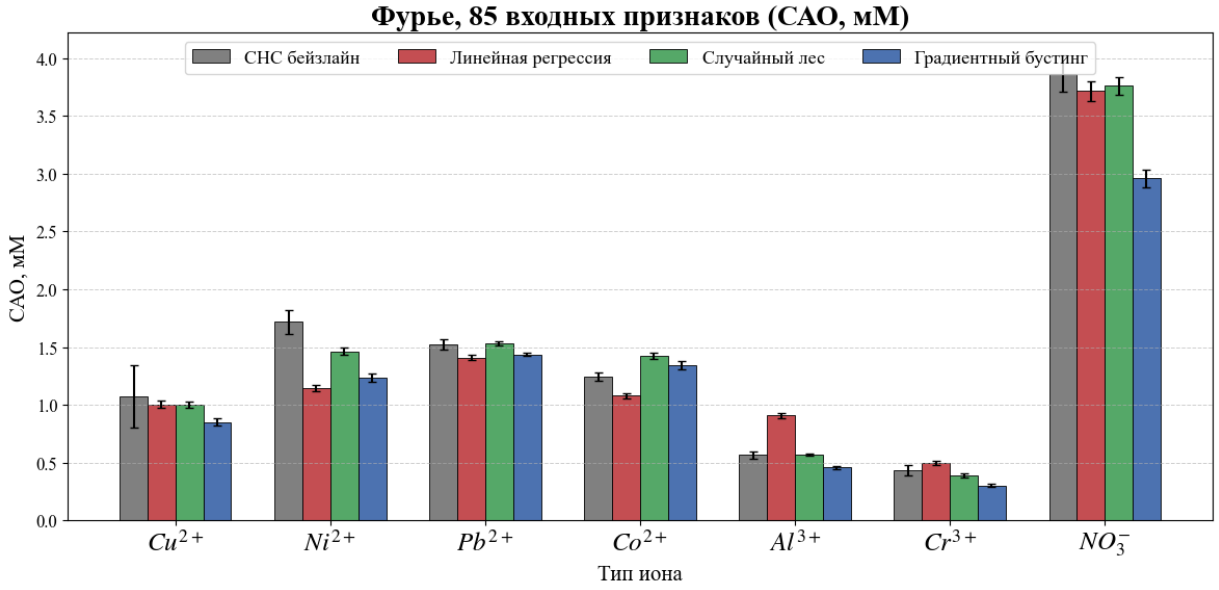
- Снизить размерность входного пространства на 2 порядка
- Контролировать качество представления 2D-карт ФЛ
- Эффективно применять методы классического МО

Решение О3 спектроскопии



Решение О3 спектроскопии





- Предложенные решения не уступают, а на 5 из 7 ионах превосходят СНС по точности

- Параметризация 2D-карт ФЛ + линейная регрессия (~90 оптим. пар.)
  - Превосходит СНС (~4000 опт. пар.) на 3 ионах: Ni^{2+}, Pb^{2+}, Co^{2+};
  - Уступает на 1 ионе: Al^{3+} ;
  - Держит паритет на 3 ионах: Cu^{2+}, Cr^{3+} , NO_3^-

Выводы

- Использование базисов позволяет эффективно сократить размерность входного пространства (2D-карт ФЛ) с 5427 до 100 признаков.
- Получаемое качество решений при этом не уступает подходу глубокого обучения со сверточными нейронными сетями.
- Наиболее эффективными и стабильными оказались ортогональные базисы, определенные на прямоугольниках – базисы Лежандра и Фурье.

Спасибо за внимание!

main Spectroscopy_FL_7_momenta / src.py

Code Blame 855 lines (686 loc) · 27 KB

```
328
329  class LegendreTransformer2D(BaseEstimator, TransformerMixin):
330      def __init__(self, order=2, x_order=None, y_order=None):
331          if order is not None:
332              if x_order is None: x_order = order
333              if y_order is None: y_order = order
334          else:
335              order = x_order + y_order
```

https://github.com/Gavr101/Spectroscopy_FL_7_momenta