



The 10th International Conference
in Deep Learning in Computational Physics
7 июля 2026 г.



Нейросетевое определение концентраций ионов в природной воде с использованием стратегий параметрически эффективной адаптации

Шалеев М.К. ¹, Исаев И.В. ², Доленко С.А. ²

(1) Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва

(2) НИИ ядерной физики им. Д.В. Скобельцына, Москва

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда, проект № 24-11-00266,
<https://rscf.ru/project/24-11-00266/>.

Экологический мониторинг водных сред

Спектроскопия как альтернатива химическому анализу

- **Задача:** Экспресс-диагностика концентраций ионов тяжелых металлов (Zn^{2+} , Cu^{2+} , Li^{+} , Fe^{3+} , Ni^{2+} , NH_4^{+} и SO_4^{2-} , NO_3^{-})
- **Хим. анализ:** Точно, но требует пробоподготовки, реагентов и времени
- **Оптическая спектроскопия:** Быстро, дистанционно, без подготовки
- **Комплексирование методов:** Одновременное использование КР (комбинационное рассеяние), ИК (инфракрасное поглощение) и ОП (оптическое поглощение).



Нейросетевая архитектура

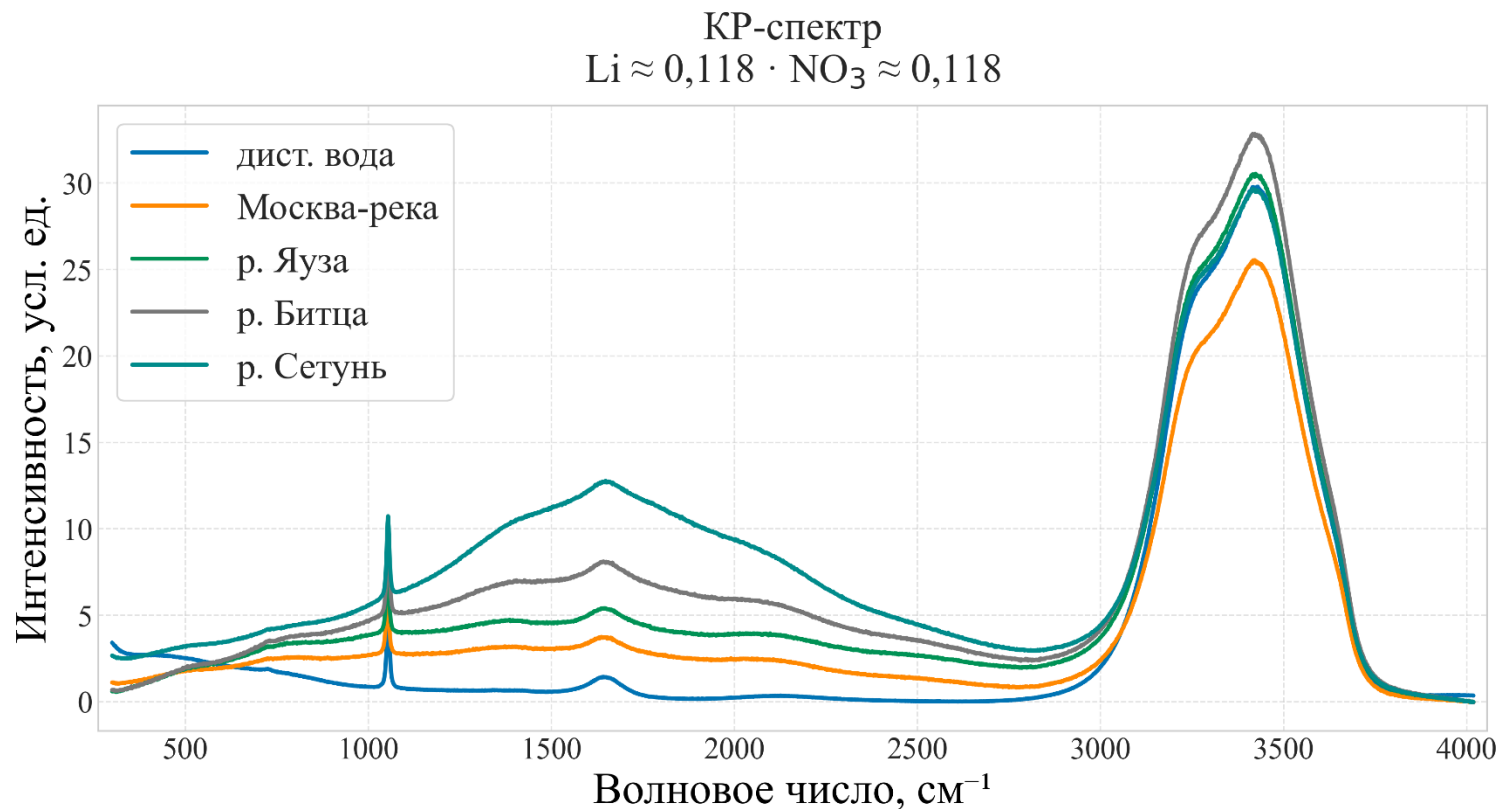
Успешное решение задачи для дистиллированной воды

- **Входные данные:** Конкатенация спектров КР, ИК, ОП (5635 признаков)
- **Архитектура:** Многослойный персептрон:
Вход $\rightarrow 128 \rightarrow 64 \rightarrow 32 \rightarrow 1$ (отдельная модель для каждого иона)
- **Предобработка:** Масштабирование в диапазон от 0 до 1 (MinMax)
- **Базовый домен (BS):** Растворы на основе дистиллированной воды (~3760 образцов)
- **Итог:** Модель отлично выучивает физические закономерности и показывает низкую ошибку

Мотивация

Влияние органических примесей на спектры

- **Целевой домен:** Природная вода из рек (Москва-река, Яуза, Битца, Сетунь)
- Природная вода содержит **органику** и изменяется форма спектра
- Возникает **доменный сдвиг**: базовая модель теряет точность на речной воде



Ограничения традиционного переноса обучения

Неспособность обучаться на малых выборках

Ограничение: Сбор данных по речной воде дорог и сложен (выборки по 200–400 образцов)

Обучение с нуля: Проблематично, слишком мало данных

Full Fine-Tuning (дообучение всех весов):

- В сети сотни тысяч параметров
- Приводит к быстрому переобучению
- Потеря обобщающей способности модели

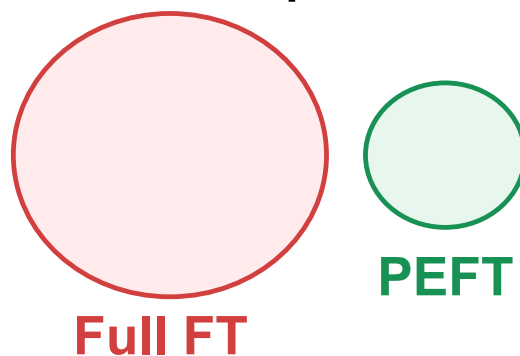
Концепция параметрически эффективной адаптации (PEFT)

Минимизация количества обучаемых параметров

Главная идея: Заморозить основную часть сети. Обучать только малую, структурно ограниченную поправку

Задачи PEFT:

- Снижение риска переобучения на малых выборках
- Сохранение базового физического представления
- Компенсация искажения спектров



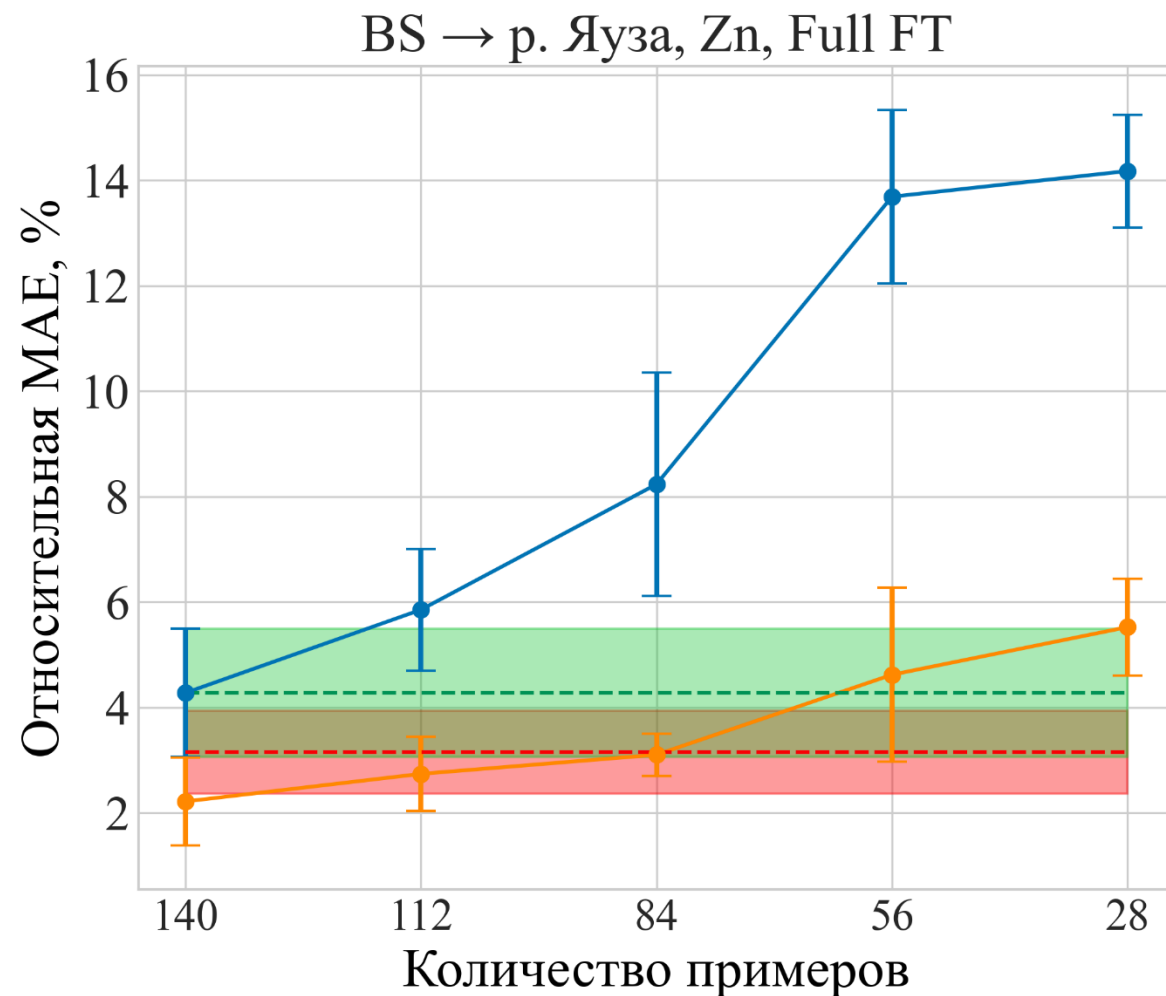
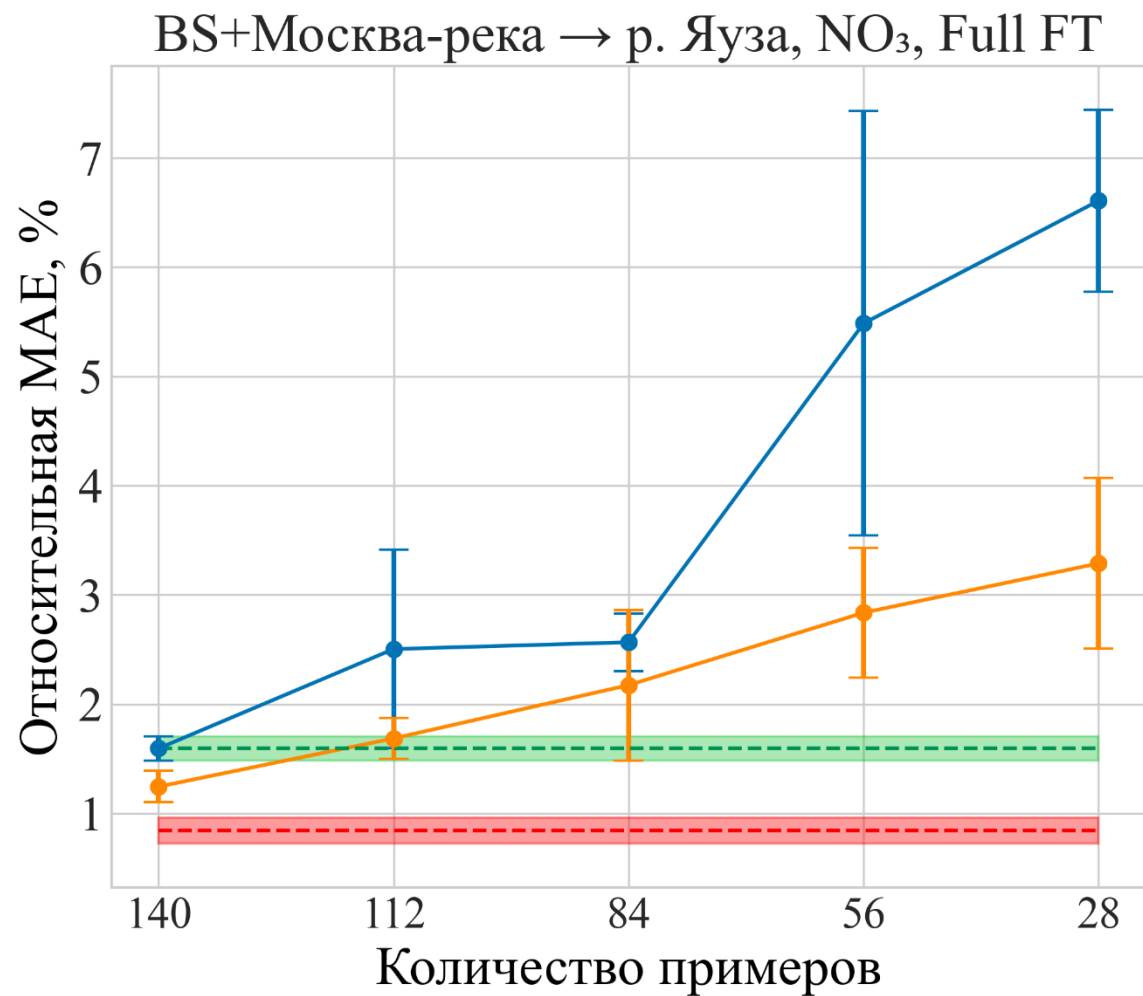
Исследуемые методы переноса обучения

От заморозки слоев до низкоранговых поправок

- **Заморозка слоев** (Freeze Layers):
Обучаются только веса последних слоев в нейронной сети
- **BitFit** (Bias-Term Fine-Tuning):
Обучаются исключительно векторы сдвигов (bias) всей сети
- **LoRA** (Low-Rank Adaptation):
Введение обучаемой поправки в виде матриц низкого ранга
($\Delta W = B \times A$)

Архитектурное решение: В нашем исследовании адаптации применяются только к двум последним слоям сети

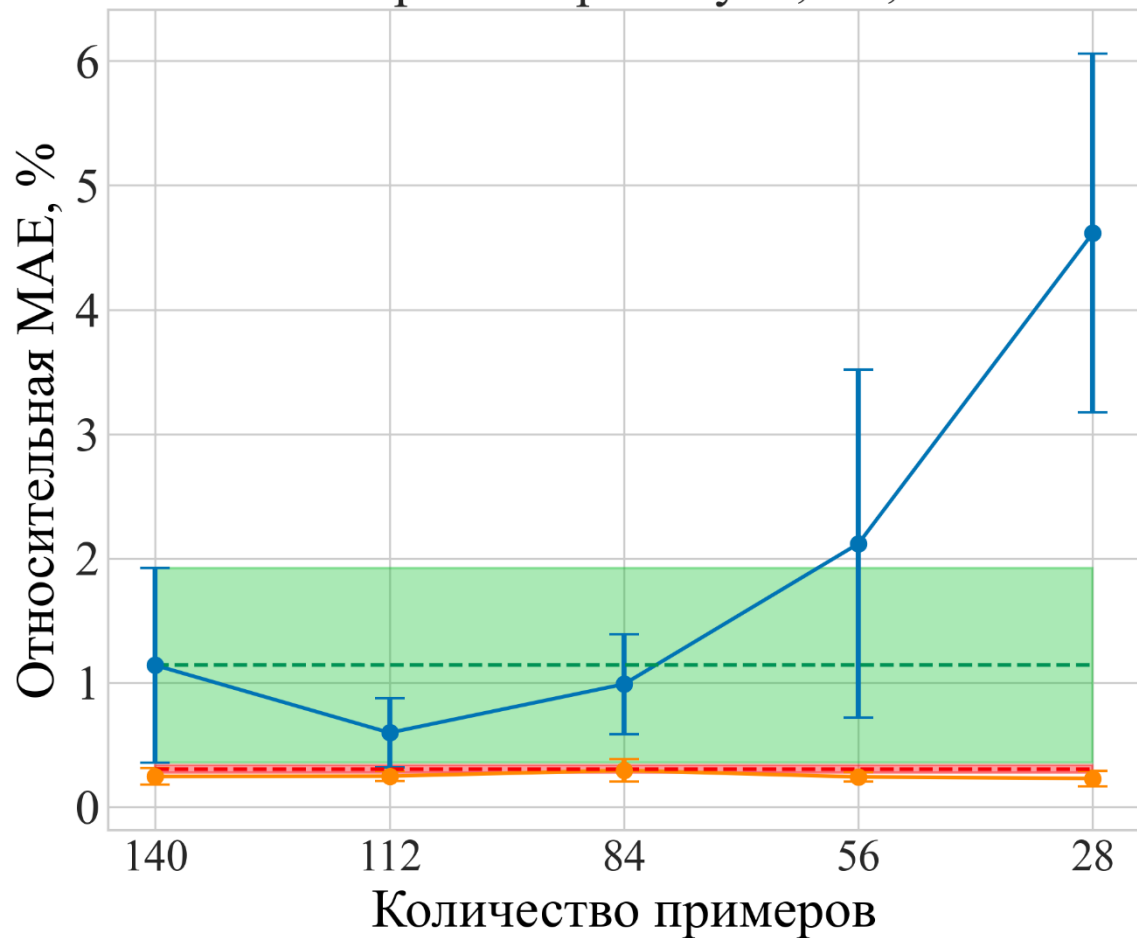
Результаты



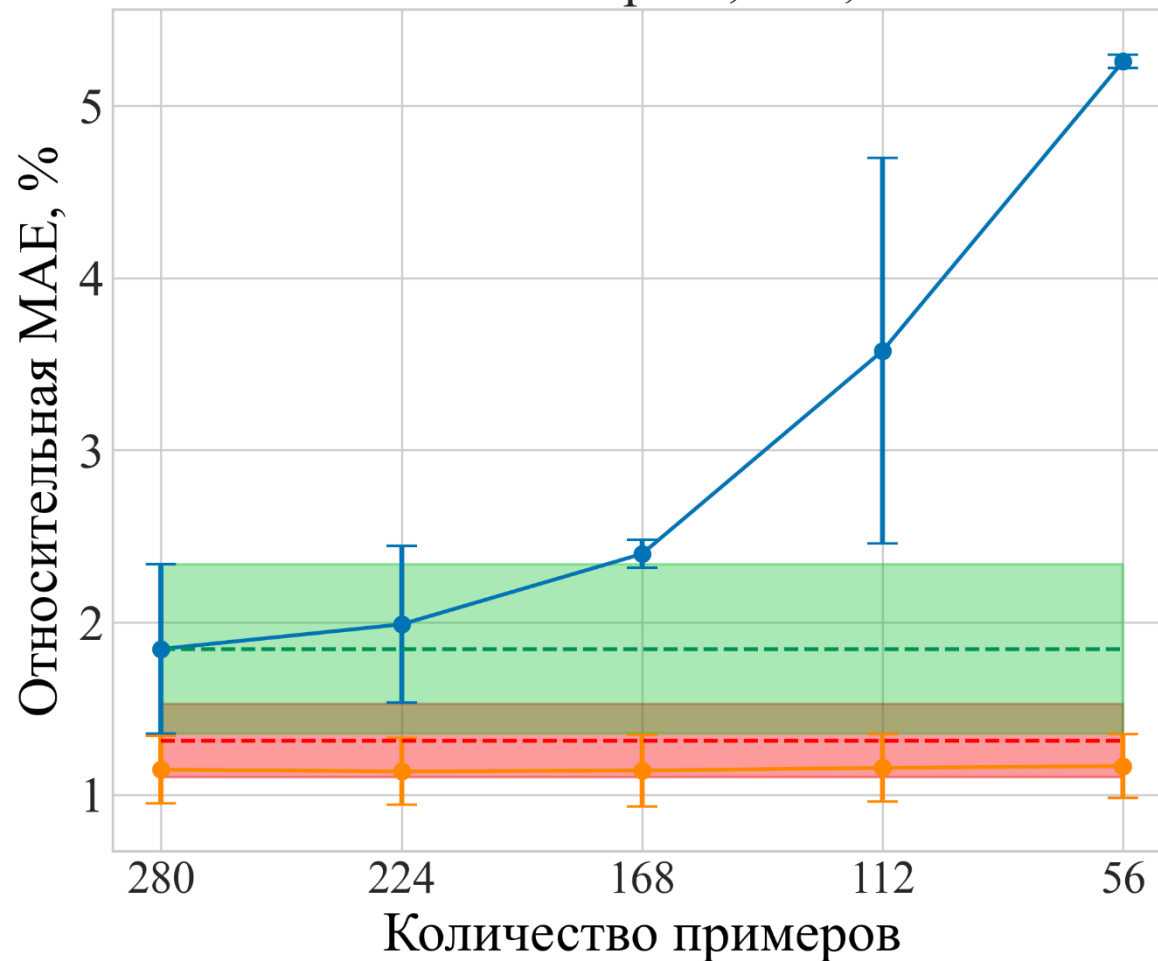
—●— перенос обучения —●— без переноса обучения - - - до переноса обучения - - - базовое решение

Результаты

BS+Москва-река → р. Сетунь, Cu, Freeze 1-2



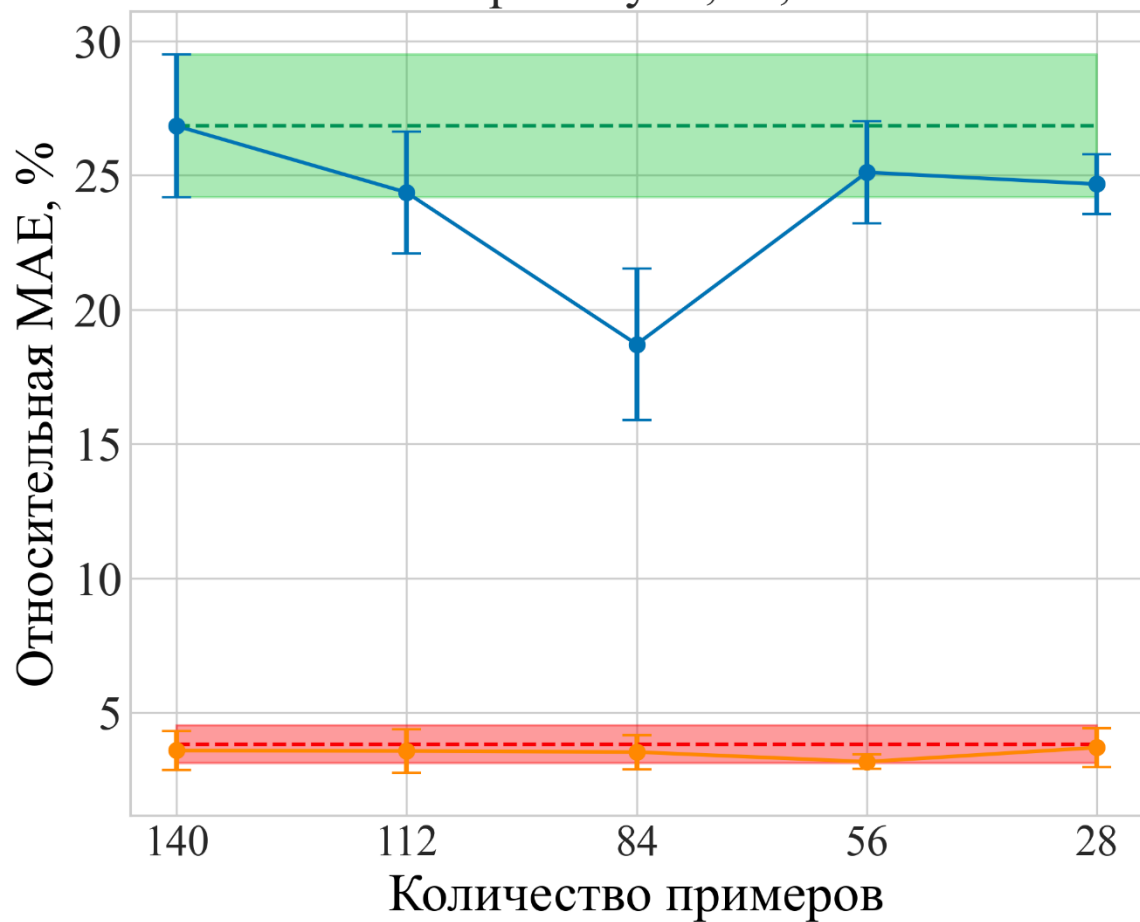
BS → Москва-река, SO₄, LoRA



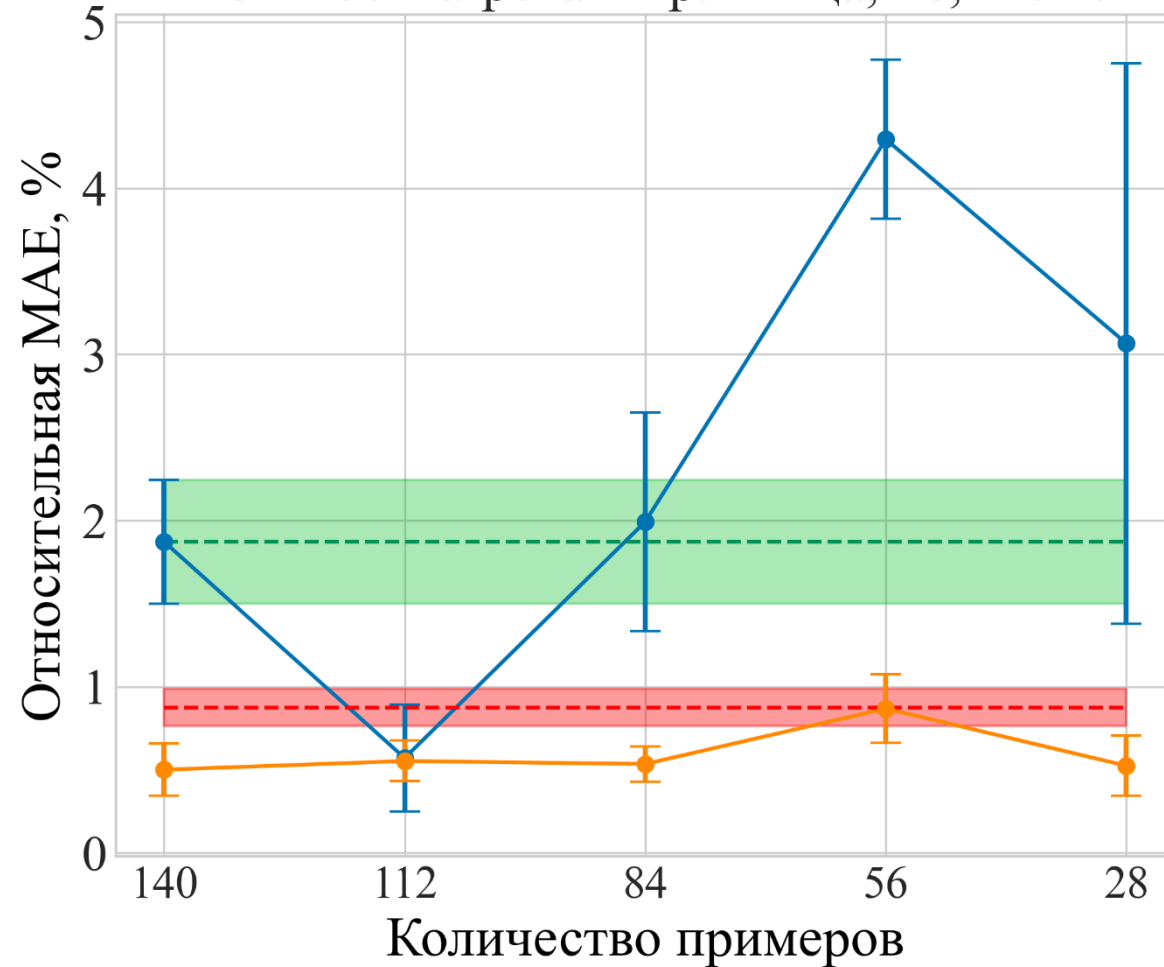
—●— перенос обучения —●— без переноса обучения - - - до переноса обучения - - - базовое решение

Результаты

BS → р. Сетунь, Li, BitFit

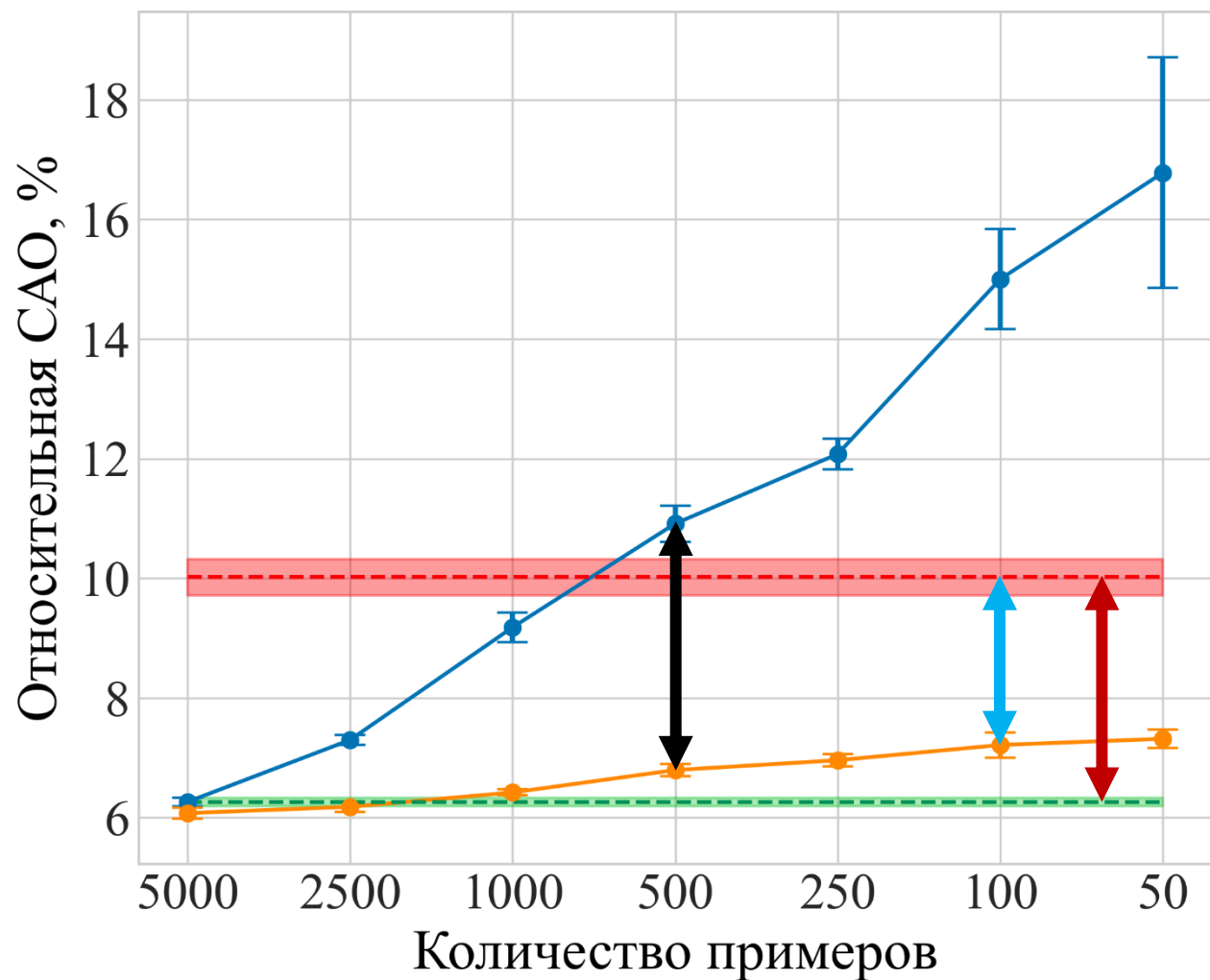


BS+Москва-река → р. Битца, Fe, BitFit



—●— перенос обучения —●— без переноса обучения - - - до переноса обучения - - - базовое решение

Результаты



$$G = \frac{E_{\text{без}} - E_{\text{ПО}}}{E_{\text{без}}} \times 100\%$$

$$Q = \frac{E_{\text{до}} - E_{\text{ПО}}}{E_{\text{до}} - E_{\text{Б}}} \times 100\%$$

—●— перенос обучения —●— без переноса обучения - - - до переноса обучения - - - базовое решение

Результаты

Стратегия	Тренируемых параметров	$\langle G \rangle$, %	$\langle Q \rangle$, %
BitFit	225	60.7	24
LoRA	418	58.1	10
Freeze 1-2	2 113	57.5	27
Full FT	731 777	44.6	132

- **PEFT** эффективно адаптирует нейросетевые модели к природной воде, надежно превосходя базовый метод полного дообучения
- **Методы BitFit и LoRA** доказали свою эффективность при применении к MLP, успешно компенсируя искажения от органических примесей
- Подход позволяет проводить адаптацию алгоритмов для экологического мониторинга к новым условиям, используя **минимальный** набор калибровочных данных

Спасибо за внимание!