

Углеродные наносенсоры и методы машинного обучения для одновременного измерения pH и температуры водных сред

О.Э. Сарманова^{1,2}, К.А. Лаптинский², М.Ю. Хмелева¹, С.А. Буриков¹, С.А. Доленко², Т.А. Доленко¹

¹Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова, Ленинские горы 1, стр. 2, Москва, Россия, 119991

²Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д.В. Скобельцына, Ленинские горы 1, стр. 2, Москва, Россия, 119991

Аннотация

В работе рассматривается возможность одновременного определения значений pH и температуры жидкой среды по спектрам флуоресценции углеродных точек (УТ) с помощью методов машинного обучения: линейной регрессии, метода проекций на латентные структуры, искусственных нейронных сетей, случайного леса и градиентного бустинга. В работе показано успешное применение флуоресцентной спектроскопии и методов машинного обучения для создания углеродного наносенсора pH и температуры окружающей среды: точность определения температуры и pH водных сред составила десятые доли °C и тысячные доли единиц pH, соответственно.

Ключевые слова

Флуоресцентная спектроскопия, углеродные точки, обратная задача, методы машинного обучения

1. Введение

В данной работе рассматривается возможность одновременного определения значений pH и температуры жидкой среды по спектрам флуоресценции (ФЛ) углеродных точек (УТ) с применением методов машинного обучения: линейной регрессии, метода проекций на латентные структуры, искусственных нейронных сетей (многослойных персептронов), случайного леса (СЛ) и градиентного бустинга.

2. Материалы и методы

Флуоресценцию приготовленных водных суспензий УТ возбуждали излучением диодного лазера (405 нм) и регистрировали с помощью спектрометра CCS200. Температура образца в кювете варьировалась от 22 °C до 81 °C с использованием элементов Пельтье, расположенных на двух противоположных гранях кюветы. Контроль/измерение температуры осуществляли с помощью термопары, помещенной непосредственно в суспензию. Для изучения влияния значения pH суспензии на ФЛ УТ были приготовлены образцы суспензий УТ с различными значениями pH – от 5 до 9.21. Для изменения значений pH использовали водные растворы NaOH и 37% HCl. Измерения pH водных суспензий УТ проводили с помощью ионометрического преобразователя Аквилон И-500, оснащенного pH-электродом (pH InLab Nano (Mettler Toledo)).

Было получено 5600 спектров ФЛ водных суспензий УТ с различными значениями pH и температуры. Весь набор спектров состоял из 15 серий, каждая из которых соответствовала фиксированному значению pH. В каждой серии с одинаковым pH температура суспензий варьировалась от 22 до 81 °C с неравномерным шагом, равным сотым долям градуса.

В работе применялись разнообразные алгоритмы машинного обучения: 1) Линейная регрессия в линейном базисе с предварительным шкалированием данных [1]; 2) Метод проекций на латентные структуры – линейная регрессия в пространстве главных компонент задачи с учетом меток [2]; 3) Случайный лес – алгоритм машинного обучения, представляющий собой комитет решающих деревьев, в рамках которого строятся несколько сотен деревьев решений по обучающим бутстреп-выборкам [3]; 4) Градиентный бустинг - метод, идея которого заключается в итеративном построении функции аппроксимации, представляющей линейную комбинацию ансамбля частных моделей (решающих деревьев), каждая из которых построена с учетом информации об ошибках, полученных на предыдущей итерации [4]; 5) Многослойные перцептроны – полносвязные нейронные сети с одним или несколькими скрытыми слоями [5]. Все использованные алгоритмы были реализованы с помощью библиотек Keras и Scikit Learn [4] на языке Python.

В рамках применения алгоритмов машинного обучения к полученной базе данных для каждой модели был произведен подбор оптимальных параметров, и был проведен сравнительный анализ решений обратной задачи с помощью различных методов.

3. Заключение

Алгоритмы машинного обучения являются мощным инструментом для решения прикладных обратных задач оптической спектроскопии в области биомедицины – с их помощью успешно удалось выделить флуоресцентный сигнал наночастиц и с его помощью одновременно определить температуру и рН жидкой среды.

Многослойные перцептроны прекрасно справились с решением обратной задачи одновременного определения температуры и водородного показателя среды по спектрам флуоресценции суспензий. С их помощью средняя абсолютная ошибка определения температуры и рН составила 1.36 ± 0.16 °C и 0.010 ± 0.003 соответственно.

Полученные результаты свидетельствуют о возможности создания многофункционального наносенсора на базе УТ, работающего в широком температурном диапазоне (22 – 81°C) и обеспечивающего точность определения рН, на порядок превышающую точность наноразмерных аналогов.

4. Благодарности

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проект № 20-32-70150). Вклад О.Е. Сармановой (программирование и обучение нейронных сетей) поддержан Фондом развития теоретической физики и математики «БАЗИС» (проект № 19-2-6-6-1).

Авторы работы выражают благодарность Томской А.Е. за синтез углеродных точек.

5. Литература

- [1] Weisberg, S. Applied linear regression / S. Weisberg. – Hoboken, USA: John Wiley & Sons, Inc., 2005. – 19 p.
- [2] Wehrens, R. The pls package: principal component and partial least squares regression in R / R. Wehrens, B.H. Mevik // Journal of Statistical Software. – 2007. – Vol. 18(2). – P. 1-23.
- [3] Biau, G. A random forest guided tour / G. Biau, E. Scornet // Test. – 2016. – Vol. 25(2). – P. 197-227.
- [4] Géron, A. Hands-on machine learning with Scikit-Learn, Keras, and Tensor Flow: Concepts, tools, and techniques to build intelligent systems / A. Géron. – Sebastopol, USA: O'Reilly Media, 2019. – 197 p.
- [5] Haykin, S. Neural Networks: A Comprehensive Foundation / S. Haykin. – Hamilton, Canada: McMaster University, 1999. – 219 p.