



Применение сетей Колмогорова-Арнольда для решения обратной задачи спектроскопии при создании мультимодального наносенсора ионов металлов на основе углеродных точек

Г.А.Куприянов^{1,2}, И.В.Исаев², К.А.Лаптинский^{1,2}, С.А.Доленко^{1,2}, Т.А.Доленко¹

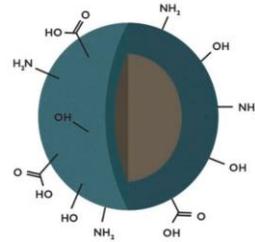
¹Физический факультет Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова, Москва

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

НИИЯФ МГУ, 2 июля 2025

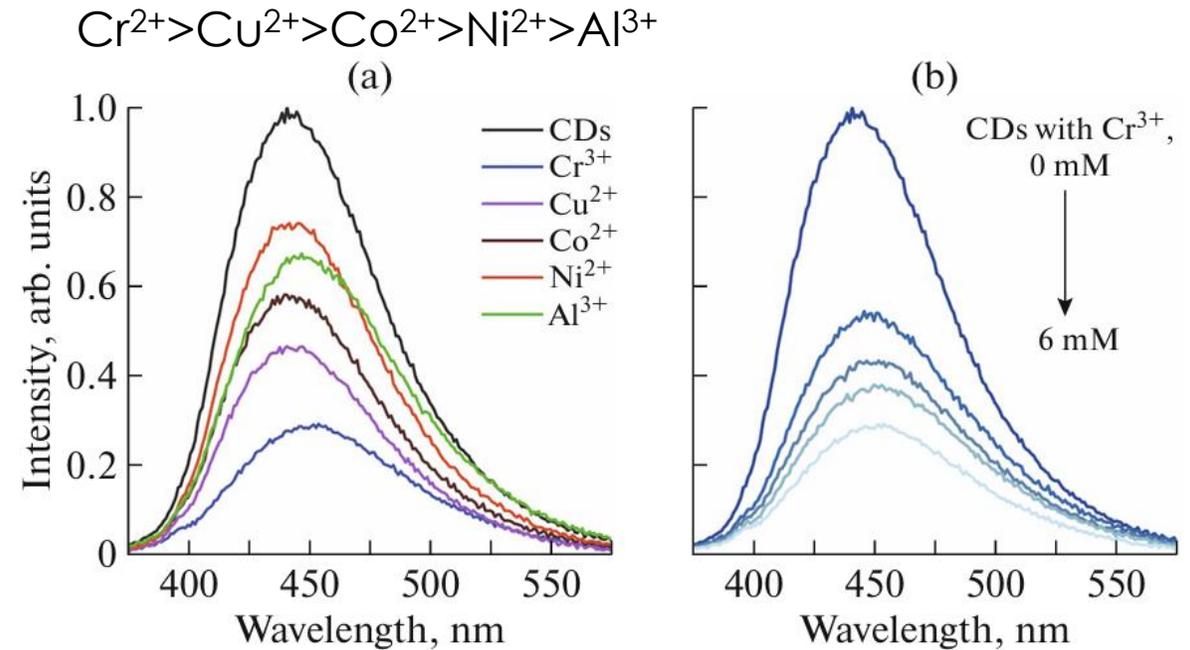
Углеродные точки в жидких средах

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

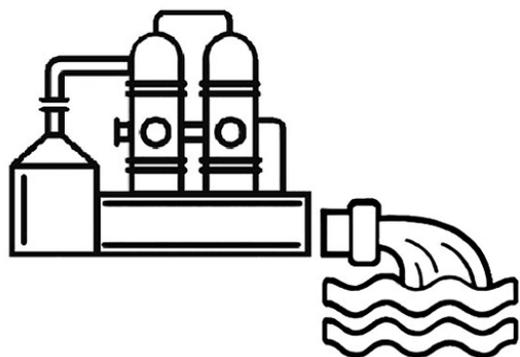


(a): ФЛ УТ в растворе с солями тяжелых металлов в концентрации 6 mM¹

(b): Тушение ФЛ УТ в растворе соли $Cr(NO_3)_3$ в концентрации 0-6 mM¹

Схема применения сенсора на основе УТ

1. Пробоотбор

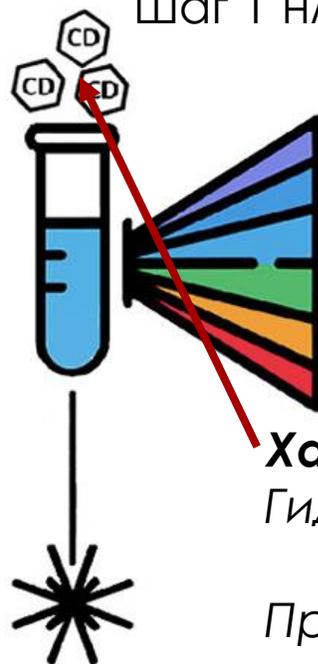


3-мерная сетка концентраций ионов:

Cu^{2+} , Ni^{2+} , Pb^{2+} , Co^{2+} , Al^{3+} , Cr^{3+} , NO_3^-

2. Спектральный анализ образца

$\lambda_{\text{возб}}$: [280, 410] нм; $\lambda_{\text{рег}}$: [375, 576] нм;
шаг 5 нм



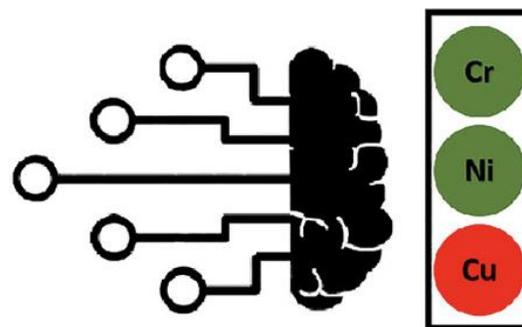
Характеристики УТ:

Гидротермальный метод синтеза:
190 °С, 4 часа.

Прекурсоры: Этилендиамин;
Лимонная кислота.

Концентрация УТ в растворе: 5 мг/л

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



Цель:

Определение концентрации искомых ионов в водных средах по спектрам фотолюминесценции УТ с помощью сетей Колмогорова-Арнольда.

Задачи:

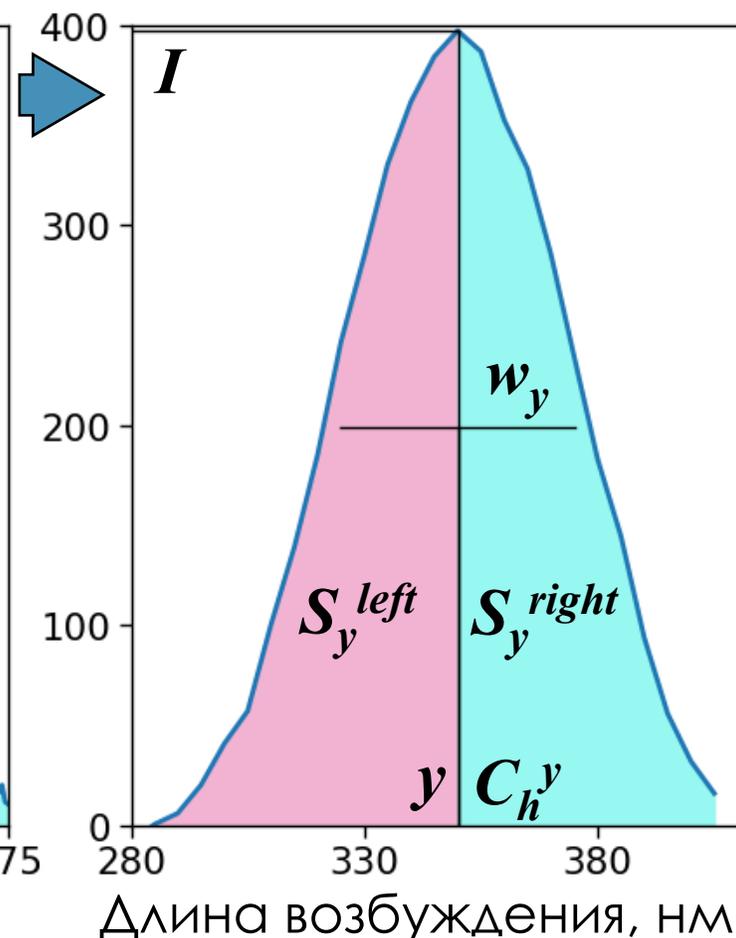
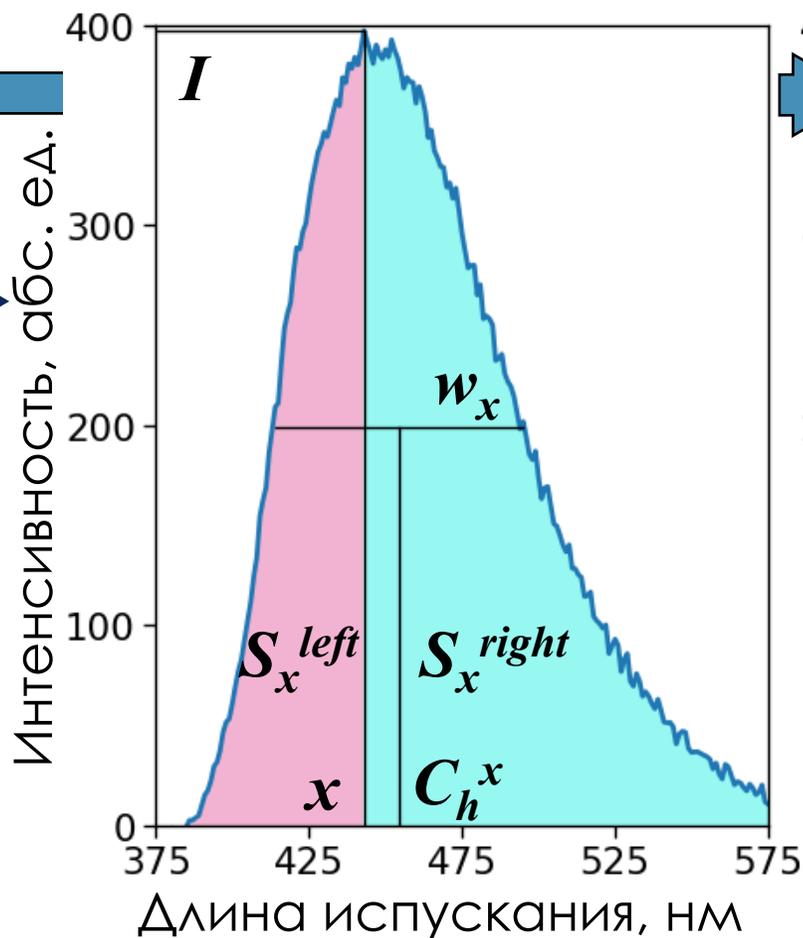
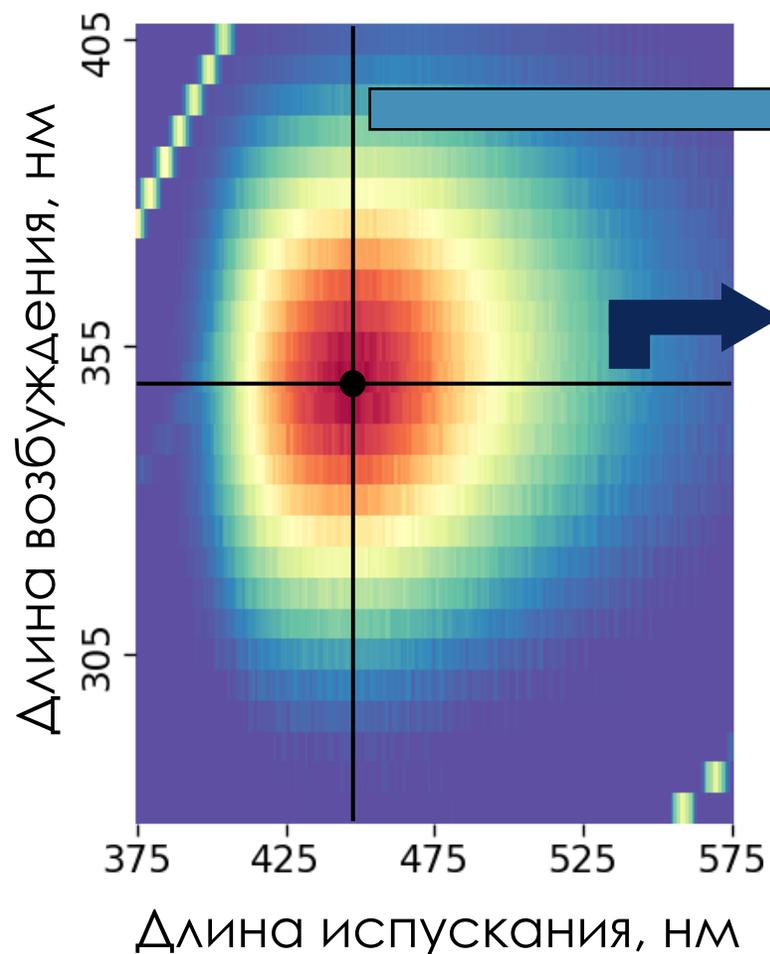
1. Сформировать разные входные признаки спектров.
2. Применить СКА и референсные методы к обратной задаче спектроскопии.
3. Провести сравнительный анализ эффективности алгоритмов.
4. Исследовать интерпретационные возможности СКА.

Обратная задача спектроскопии. Параметризация спектра

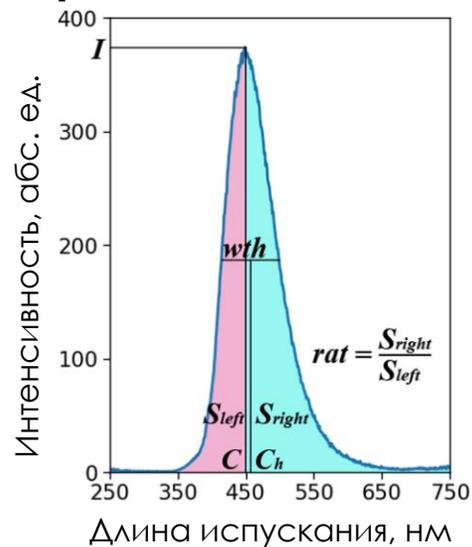
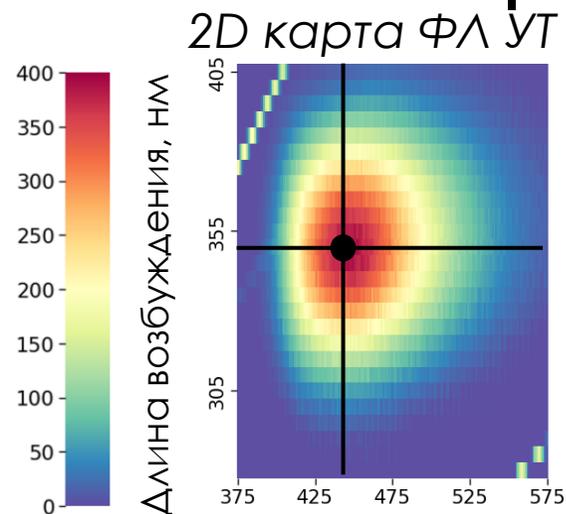
Спектр ФЛ УТ

5 / 18

2D карта ФЛ УТ



Обратная задача спектроскопии. Параметризация спектра



Описание спектра 5-ю величинами:

1. I - Максимальная интенсивность
2. $x(y)$ - Положение максимума
3. $C_h^{x(y)}$ - Положение центра ширины на полувысоте
4. $w_{x(y)}$ - Ширина на полувысоте
5. $S_{x(y)}$ - Интегральная интенсивность
6. $r_{x(y)}$ - Разность площадей правого и левого крыльев спектров.

Теорема Колмогорова-Арнольда

Если $f(\mathbf{x})$ — это непрерывная функция нескольких переменных, то $f(\mathbf{x})$ можно записать в виде конечной композиции непрерывных функций одной переменной и бинарной операции сложения.

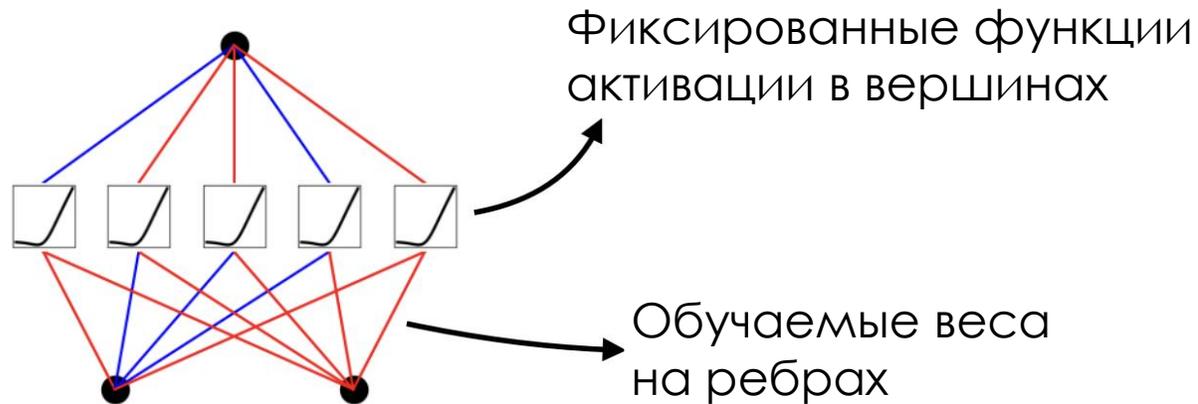
$$f(\mathbf{x}) = \sum_{q=1}^{2n+1} \Phi_q \left(\sum_{p=1}^n \Phi_{q,p}(x_p) \right) \quad \begin{array}{l} \Phi_{q,p}: [0,1] \rightarrow \mathbb{R} \\ \Phi_q: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \end{array}$$

А.Н. Колмогоров: О представлении непрерывных функций нескольких переменных в виде суперпозиций непрерывных функций одного переменного и сложения. 1957

Персептрон и СКА

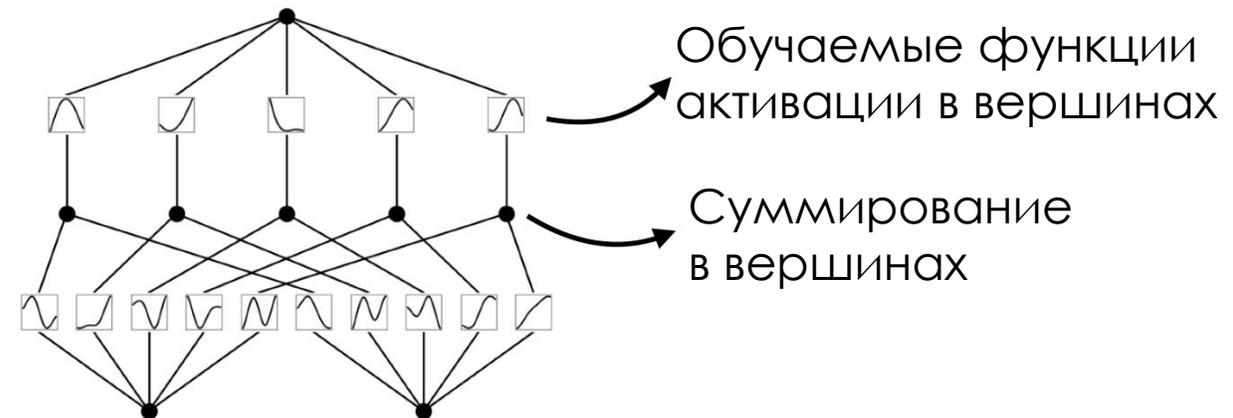
Персептрон

$$f(\mathbf{x}) \approx \sum_{i=1}^{N(\epsilon)} a_i \sigma(\mathbf{w}_i \cdot \mathbf{x} + b_i)$$

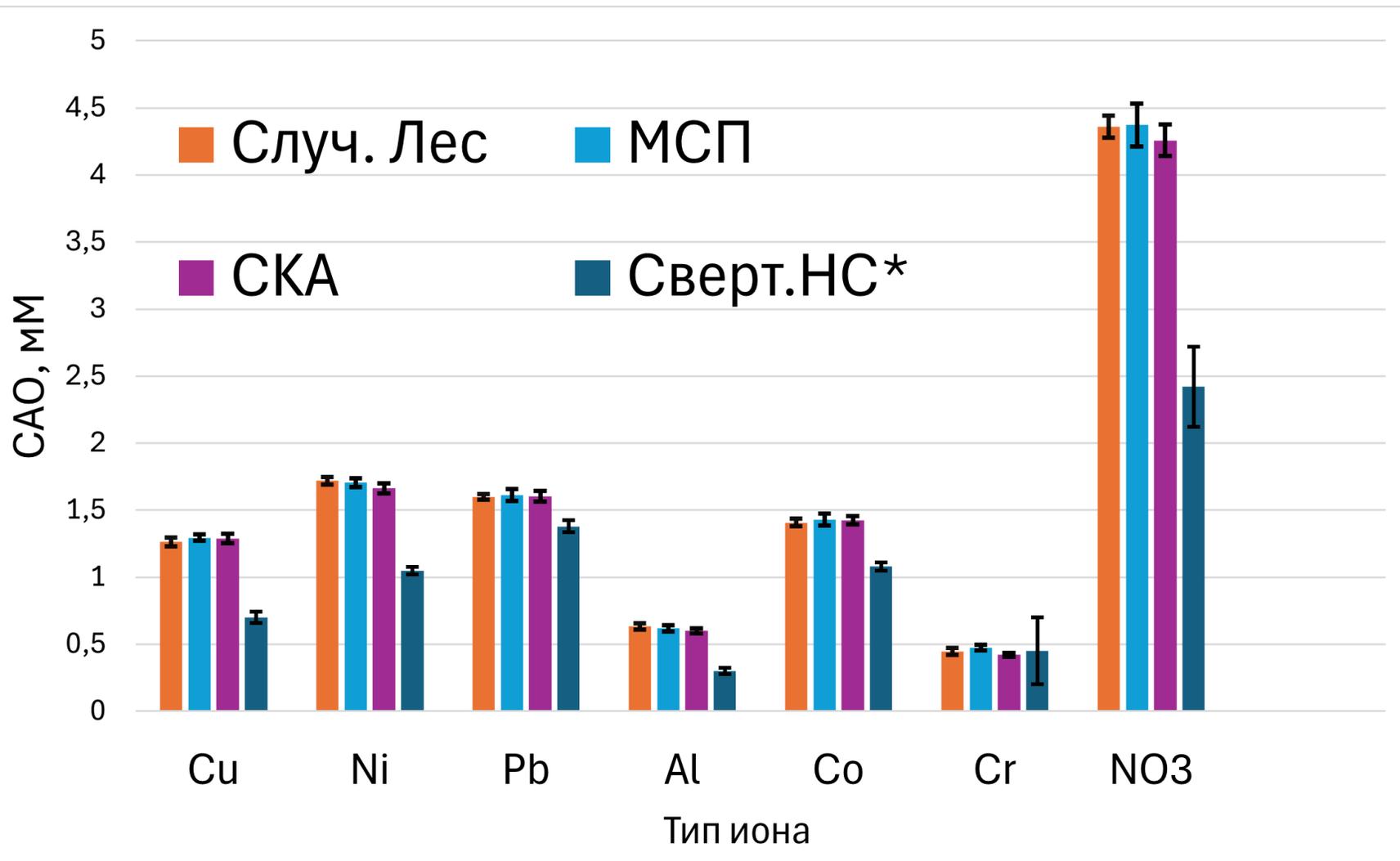


СКА

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{q=1}^{2n+1} \Phi_q \left(\sum_{p=1}^n \phi_{q,p}(x_p) \right)$$



Результаты обучения



Средняя абсолютная ошибка (САО) задается формулой:

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |y_i^{true} - y_i^{pred}|$$

Результат:

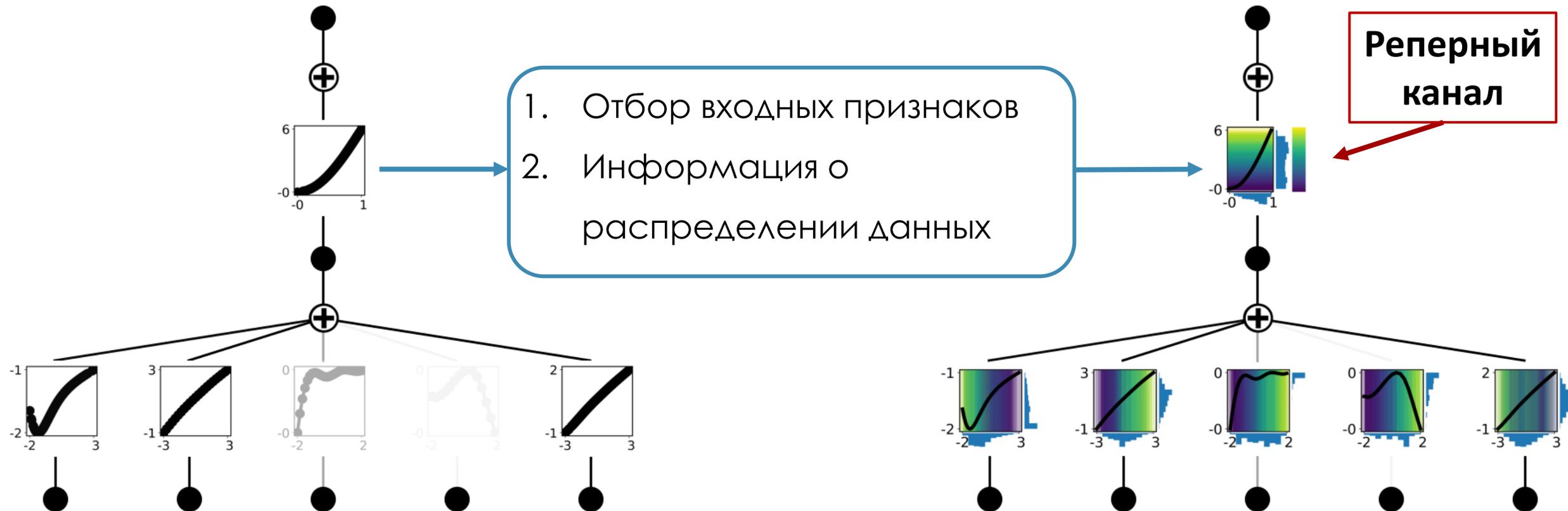
СКА демонстрирует точность *на равне и лучше референсных методов.*

Однако *уступают СНС* на полных картах ФЛ

Интерпретация СКА

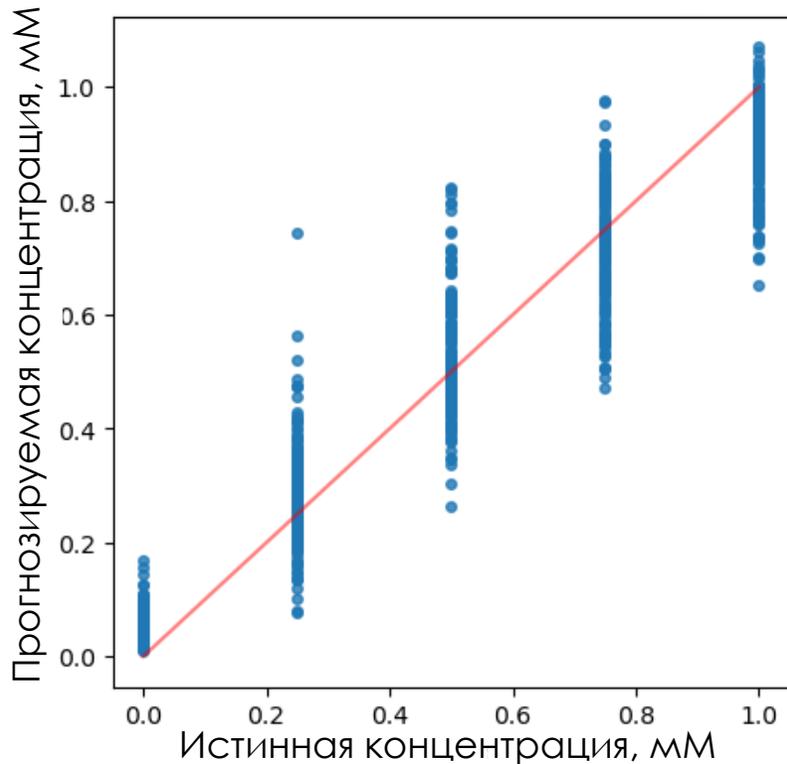
2. Стандартная визуализация СКА

3. Улучшенная визуализация СКА



Интерпретация СКА. Cr^{3+}

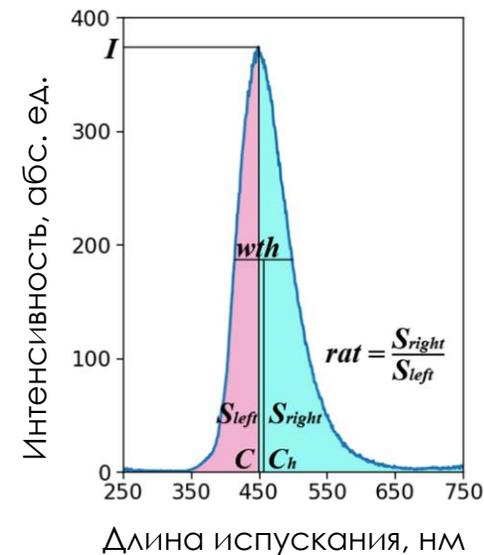
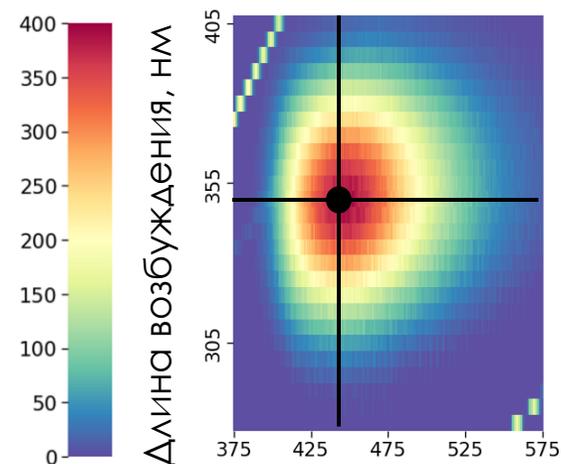
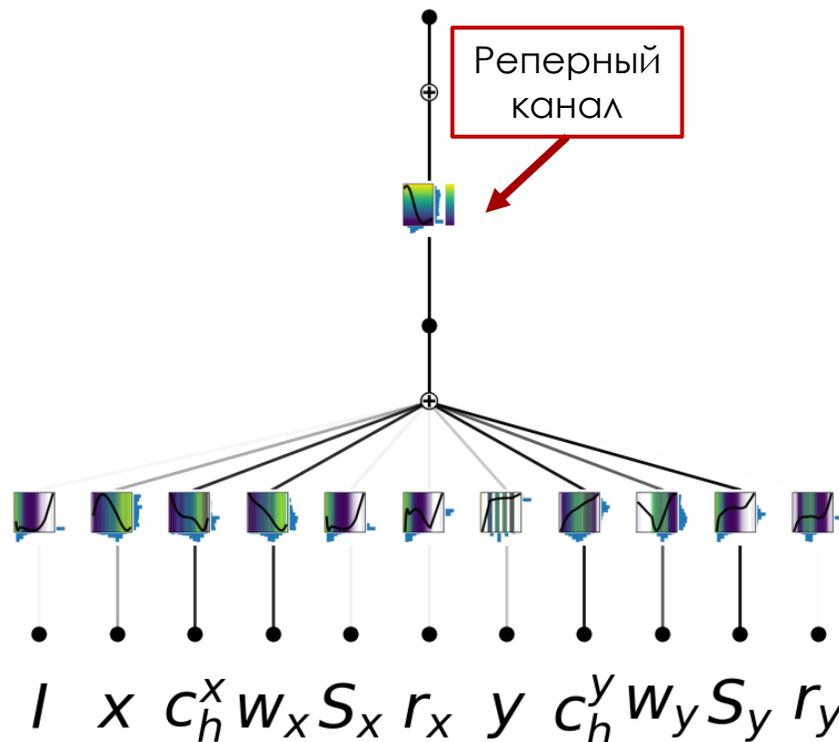
СКО = 0.011 | $R^2 = 0.909$



Средняя квадратичная ошибка
(СКО) задается формулой:

$$\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i^{true} - y_i^{pred})^2}$$

Концентрация Cr^{3+}

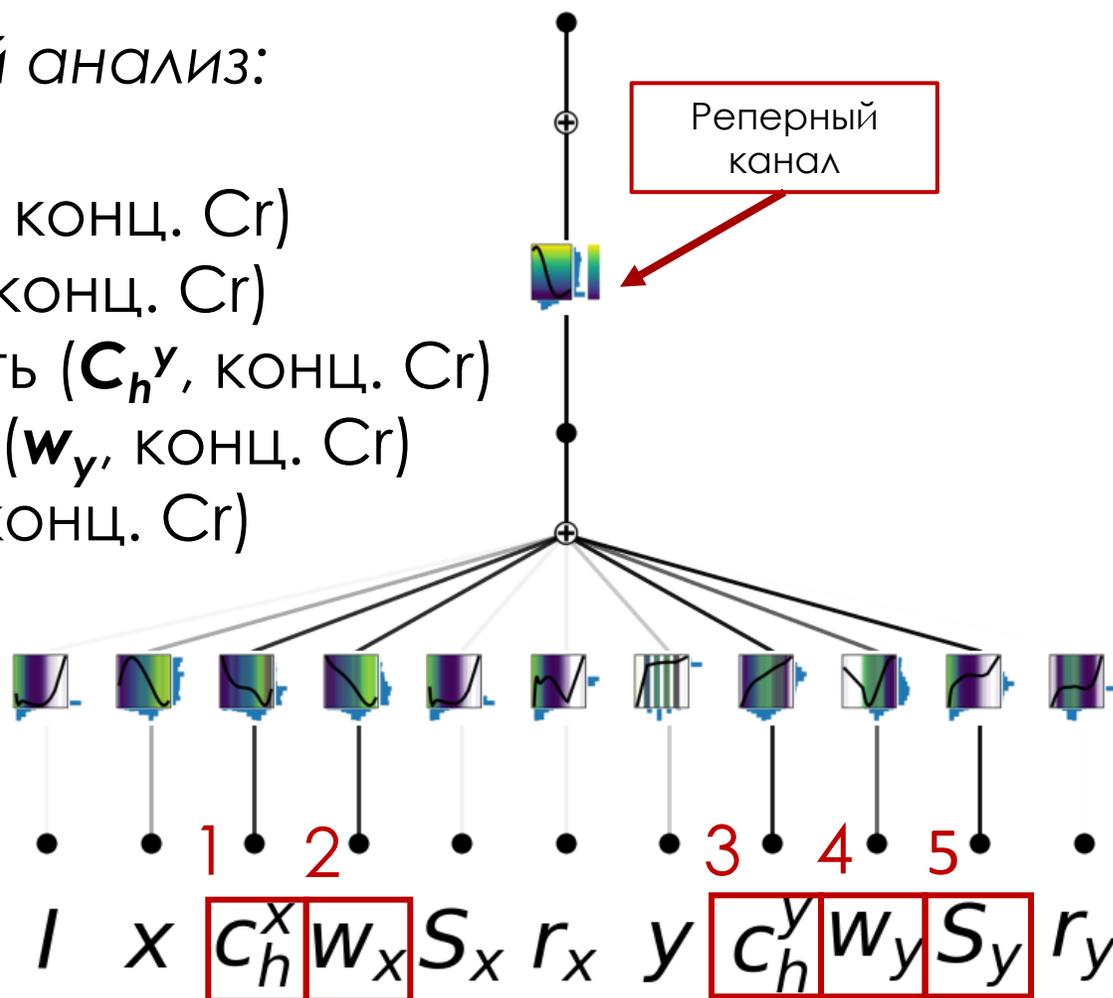


Интерпретация СКА. Cr^{3+}

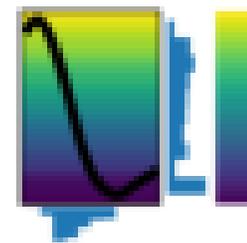
Концентрация Cr^{3+}

Визуальный анализ:

1. Корреляция (\mathbf{C}_h^x , конц. Cr)
2. Корреляция (\mathbf{w}_x , конц. Cr)
3. Парабол-ая зав-ть (\mathbf{C}_h^y , конц. Cr)
4. Анतिकорреляция (\mathbf{w}_y , конц. Cr)
5. Корреляция (\mathbf{S}_y , конц. Cr)



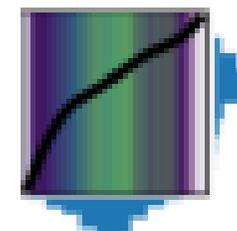
Репер. к.



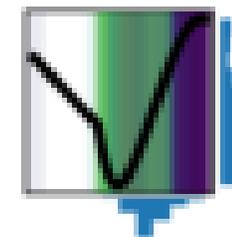
2



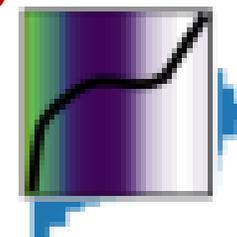
3



4



5

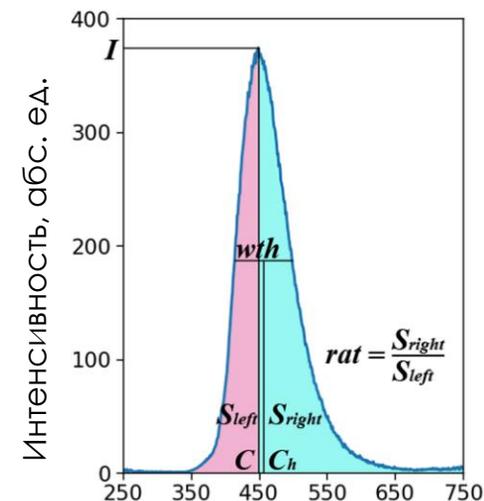
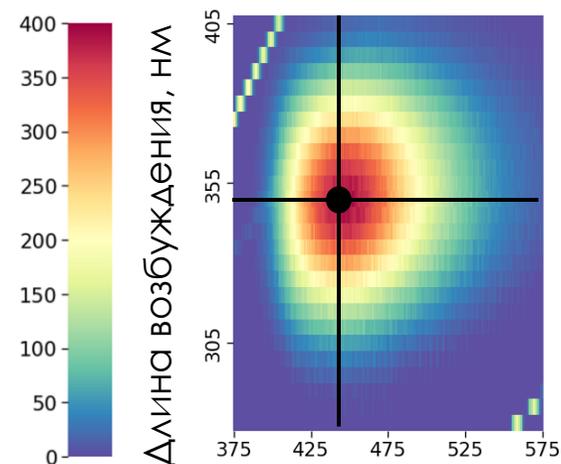
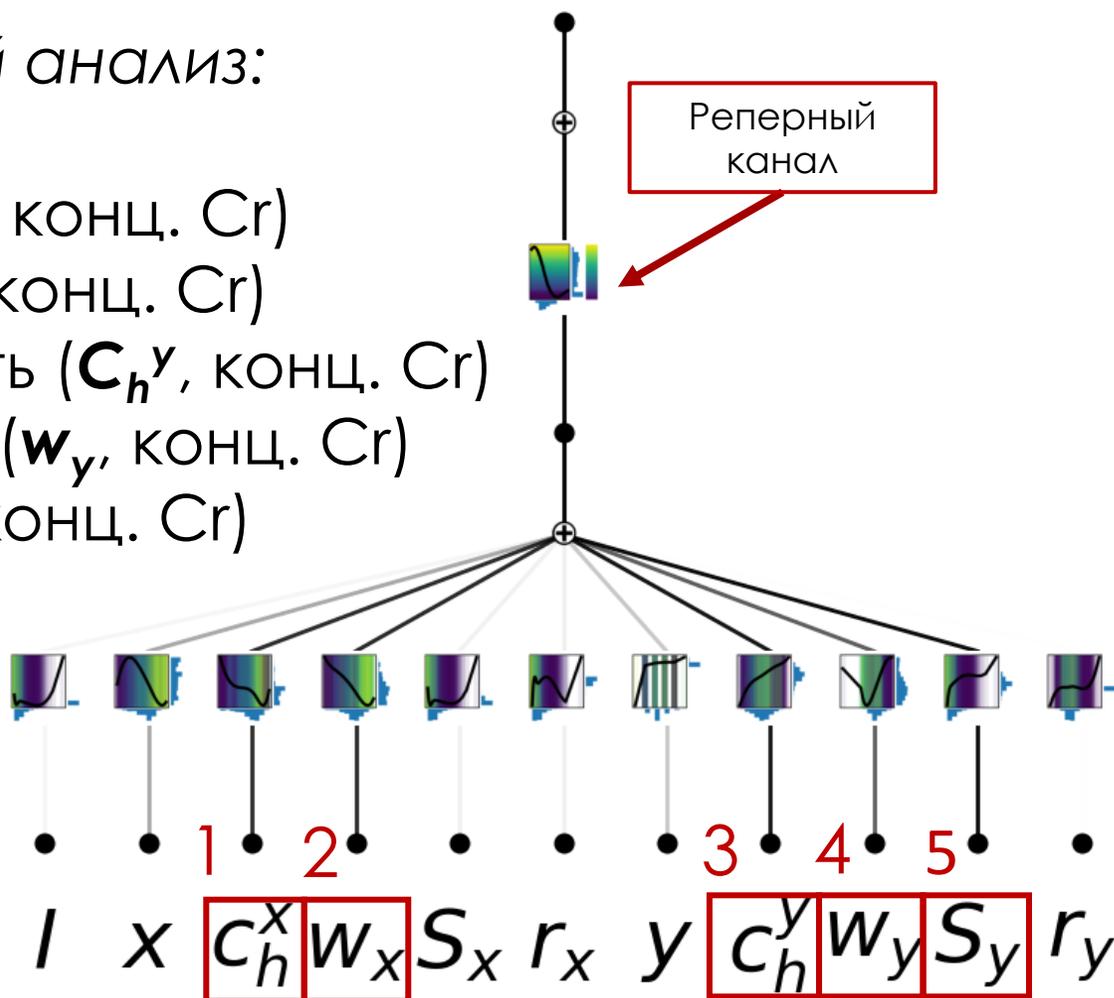


Интерпретация СКА. Cr³⁺

Концентрация Cr³⁺

Визуальный анализ:

1. Корреляция (C_h^x , конц. Cr)
2. Корреляция (w_x , конц. Cr)
3. Парабол-ая зав-ть (C_h^y , конц. Cr)
4. Анतिकорреляция (w_y , конц. Cr)
5. Корреляция (S_y , конц. Cr)

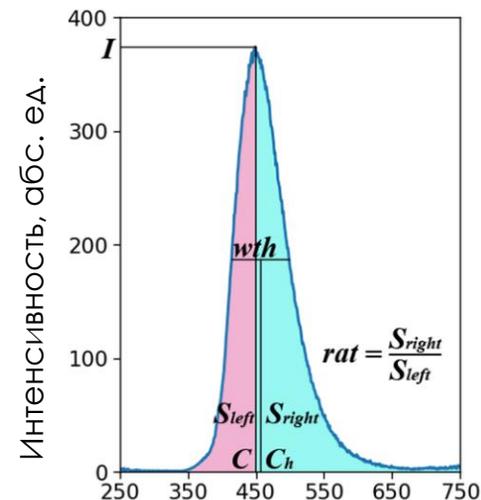
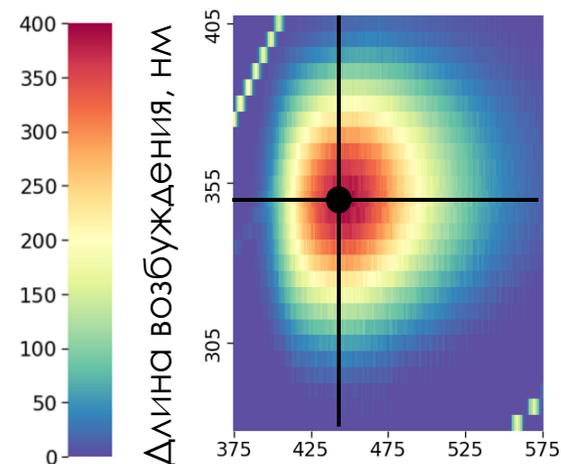
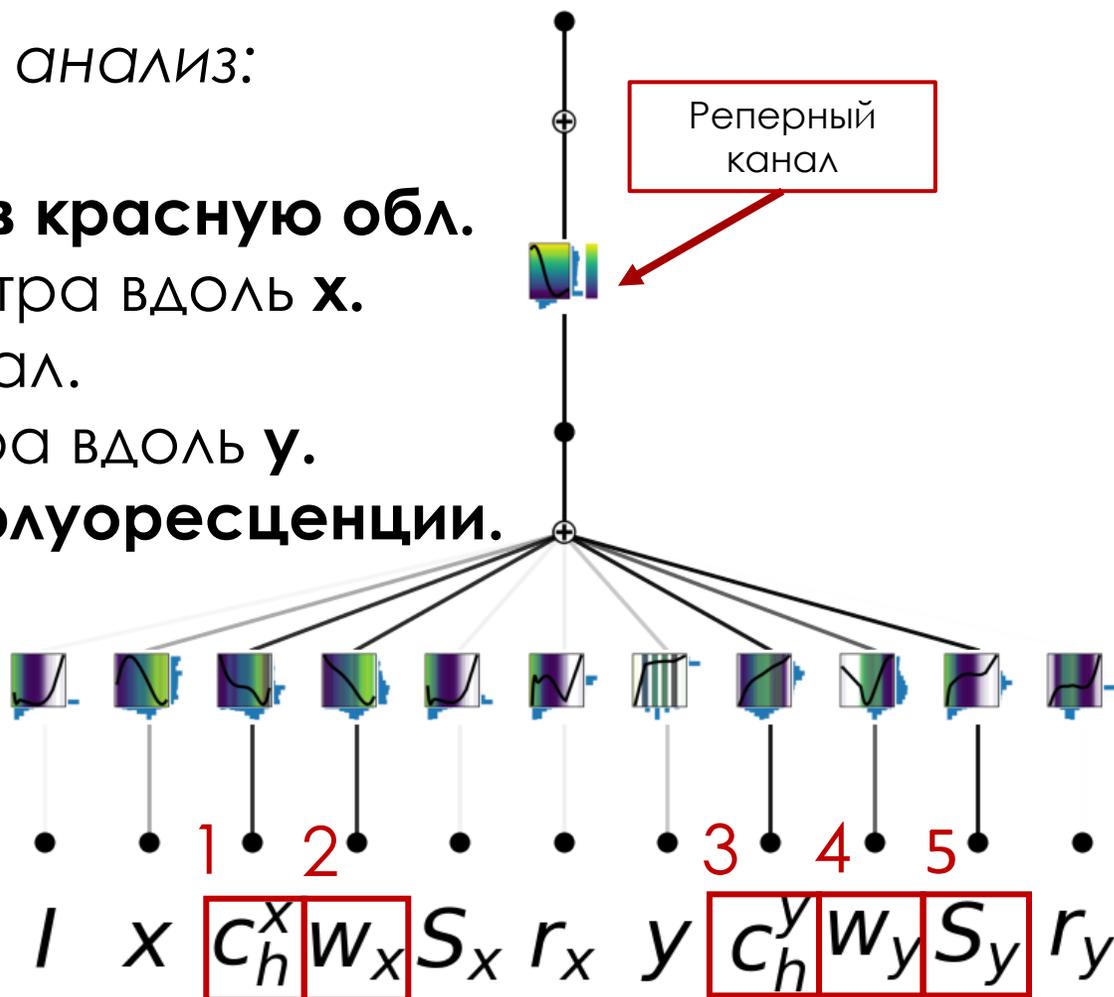


Интерпретация СКА. Cr³⁺

Концентрация Cr³⁺

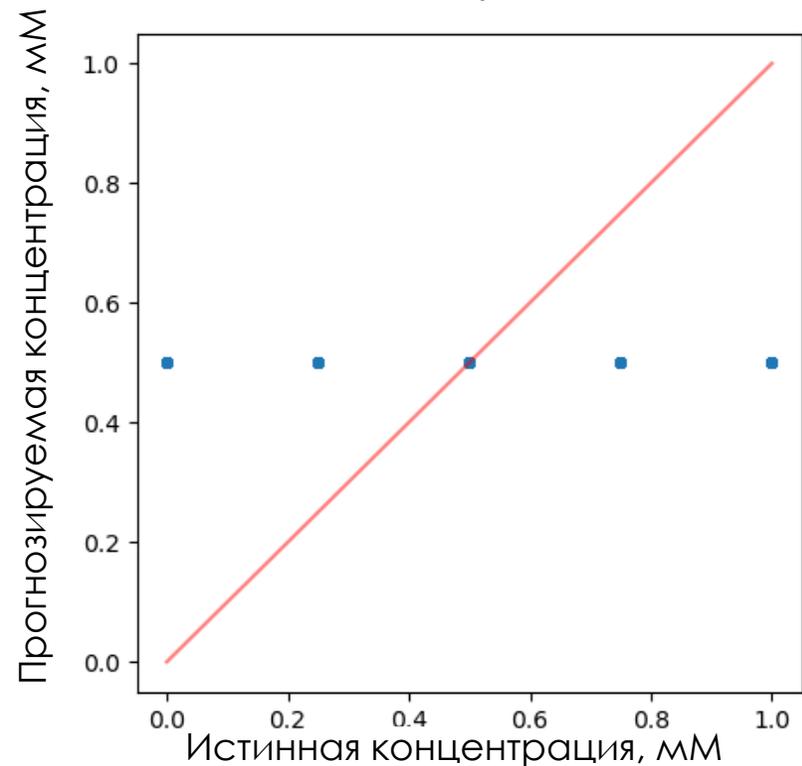
Визуальный анализ:

1. **Сдвиг** спектра в красную обл.
2. Уширение спектра вдоль **x**.
3. Новый инф. канал.
4. Сужение спектра вдоль **y**.
5. Факт **тушения флуоресценции**.



Интерпретация СКА. Ni²⁺

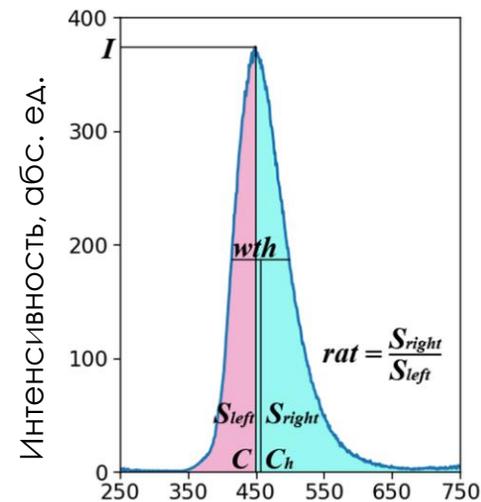
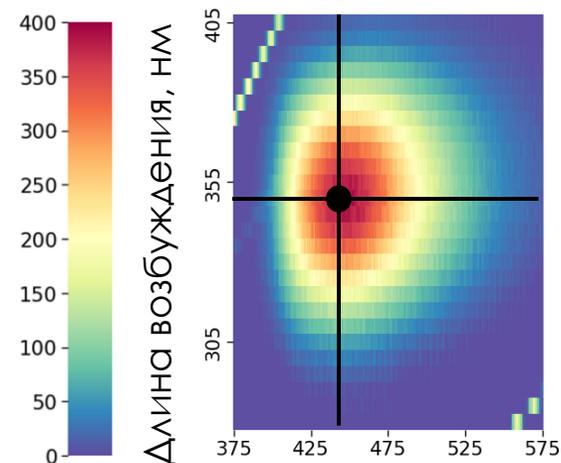
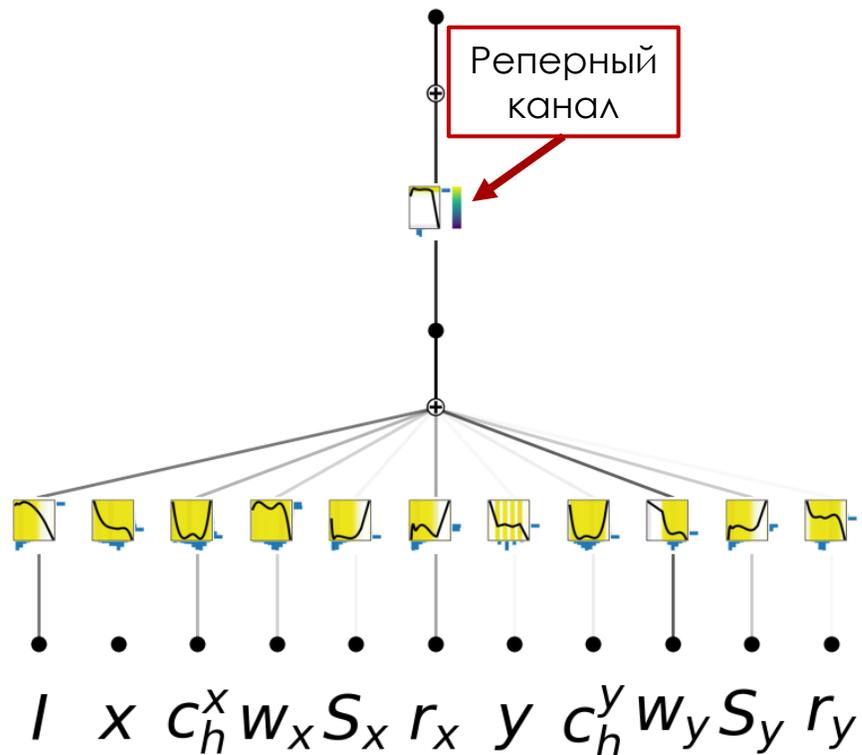
СКО = 0.121 | R² = 0.00



Средняя квадратичная ошибка (СКО) задается формулой:

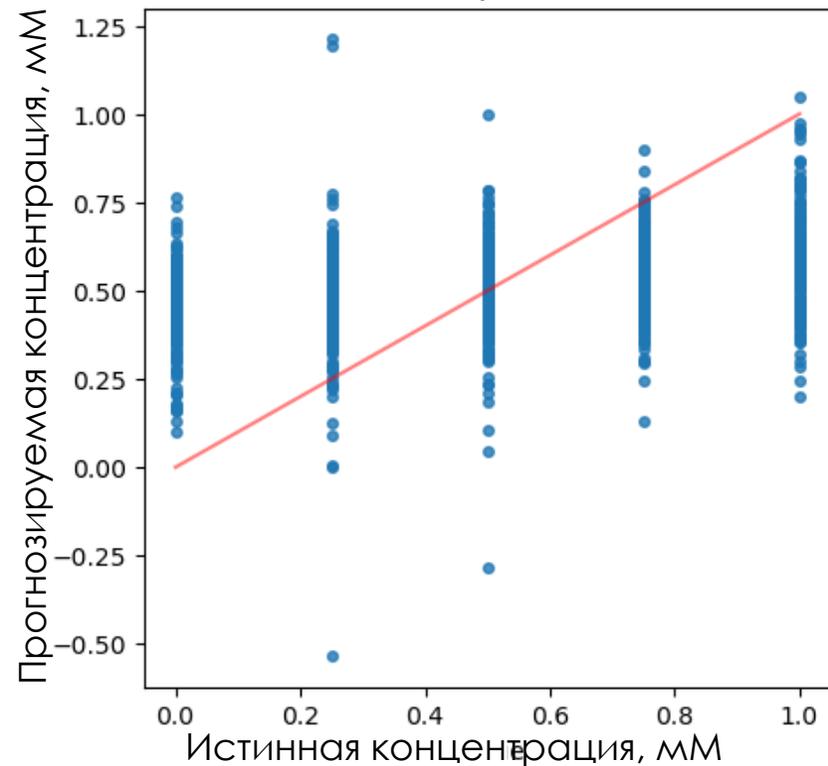
$$\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i^{true} - y_i^{pred})^2}$$

Концентрация Ni²⁺



Интерпретация СКА. Ni²⁺

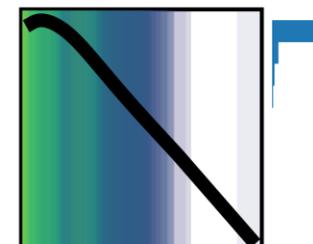
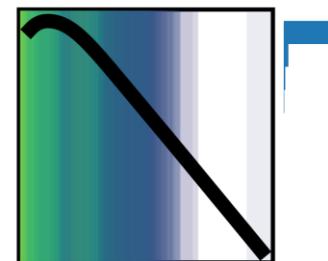
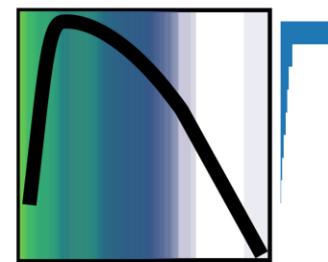
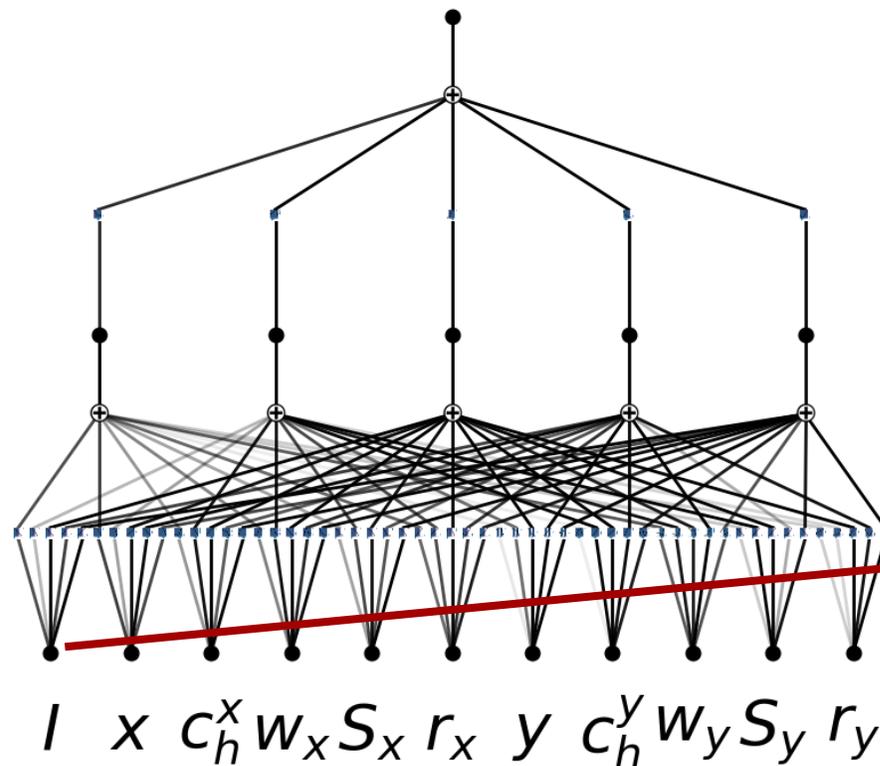
СКО = 0.105 | R² = 0.124



Средняя квадратичная ошибка
(СКО) задается формулой:

$$\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i^{true} - y_i^{pred})^2}$$

Концентрация Ni²⁺



Выводы

- Сети Колмогорова-Арнольда (СКА) – перспективный аналог полносвязных нейронных сетей.
- В обратной задаче спектроскопии СКА не уступает в точности персептрон, случайному лесу и градиентного бустинга;
- Интерпретация СКА позволяет выявлять неочевидные закономерности работы модели и проводить их анализ;
- Интерпретируемость СКА ограничивается сложностью рассматриваемой задачи и используемой архитектуры СКА

Возможность интерпретации СКА на рассматриваемых ионах:

Тип иона	Cu^{2+}	Ni^{2+}	Pb^{2+}	Co^{2+}	Al^{3+}	Cr^{3+}	NO_3^-
	+	-	-	+	+	+	-



Спасибо за внимание!

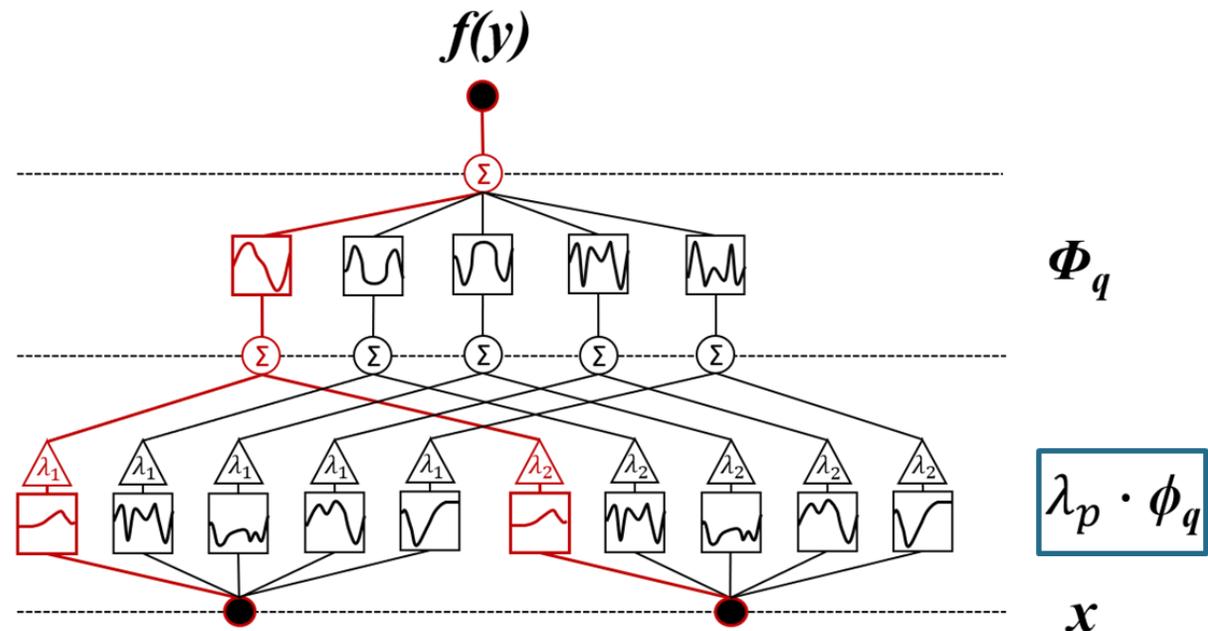
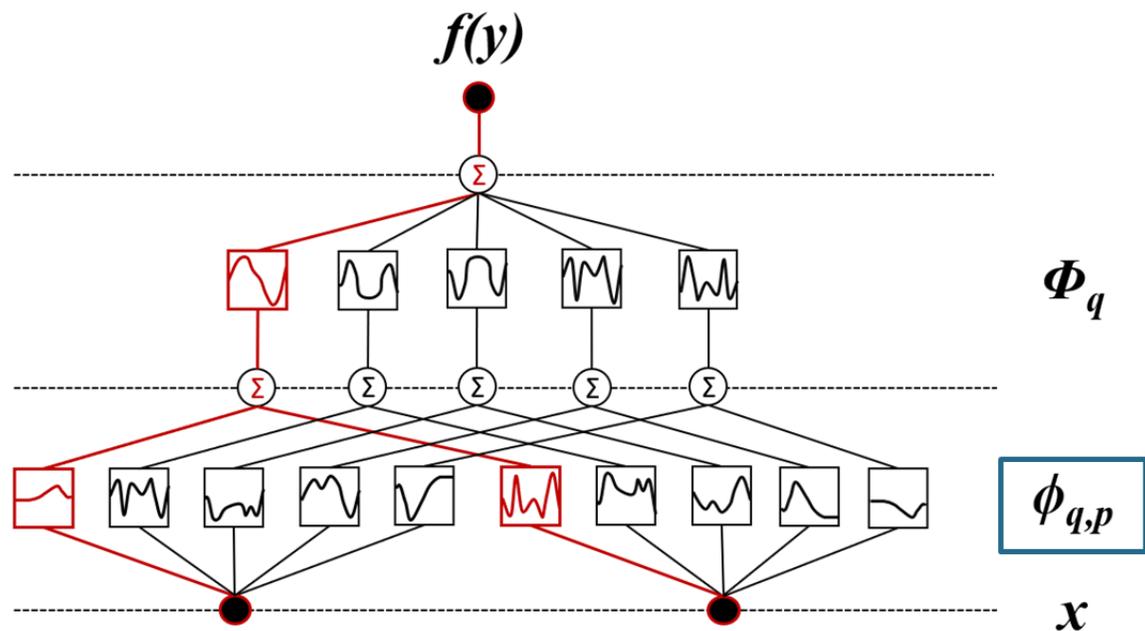
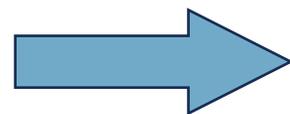
Модифікація СКА: λ-СКА

т. Колмогорова-Арнольда (1957)

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{q=1}^{2n+1} \Phi_q \left(\sum_{p=1}^n \phi_{q,p}(x_p) \right)$$

т. Колмогорова-Арнольда-Кахане¹ (1975)

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{q=1}^{2n+1} \Phi_q \left(\sum_{p=1}^n \lambda_p \cdot \phi_q(x_p) \right)$$

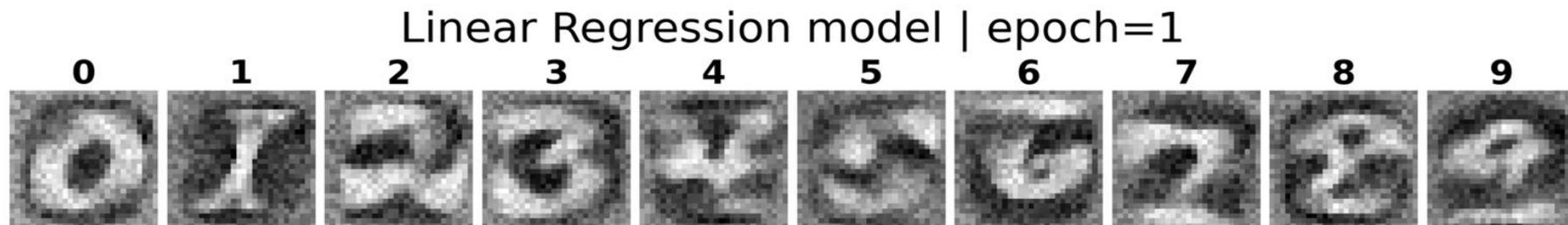
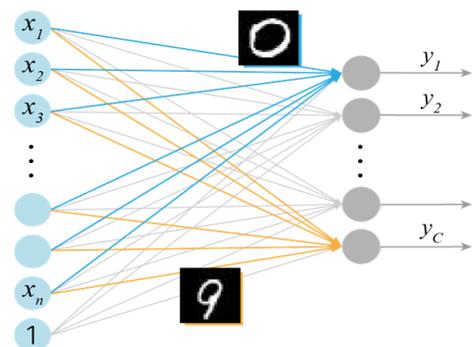


MNIST. Обучение чувствительности λ -СКА

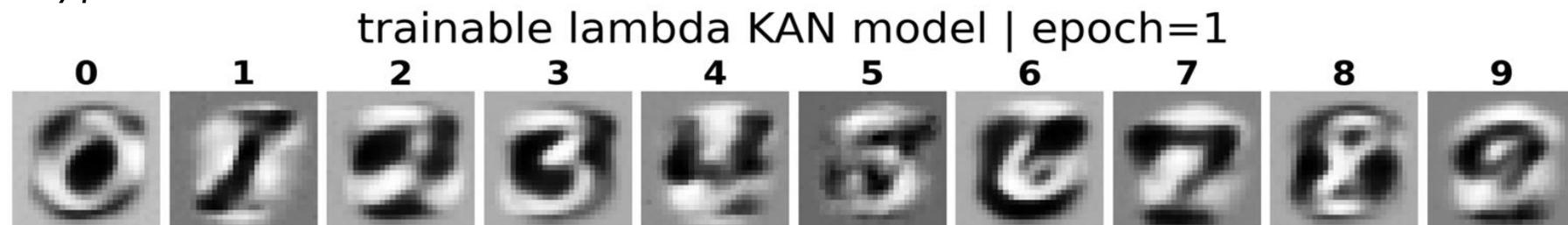
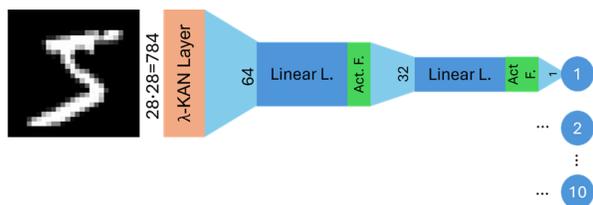
Обучение чувствительности моделей линейной регрессии и обучаемой λ -СКА:

Интерпретация линейного классификатора на задаче MNIST

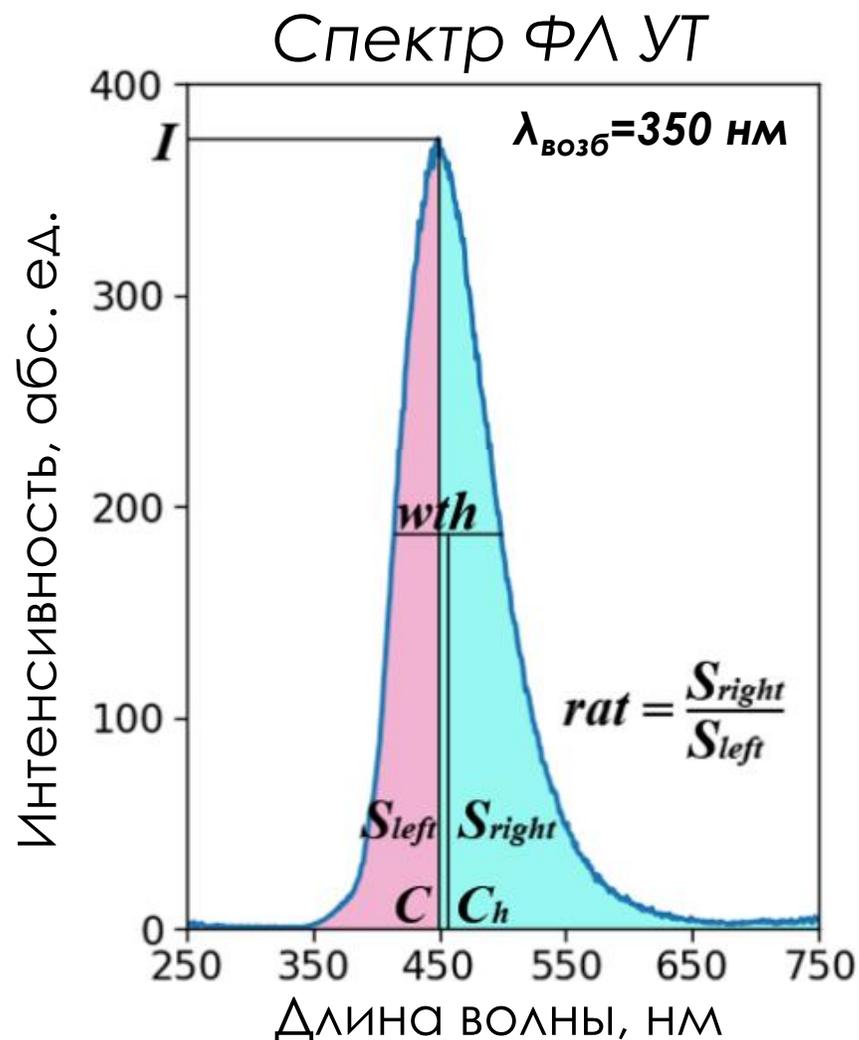
[\[ИСТОЧНИК\]](#)



Интерпретируемая архитектура на основе λ -СКА



Обратная задача спектроскопии. Параметризация спектра

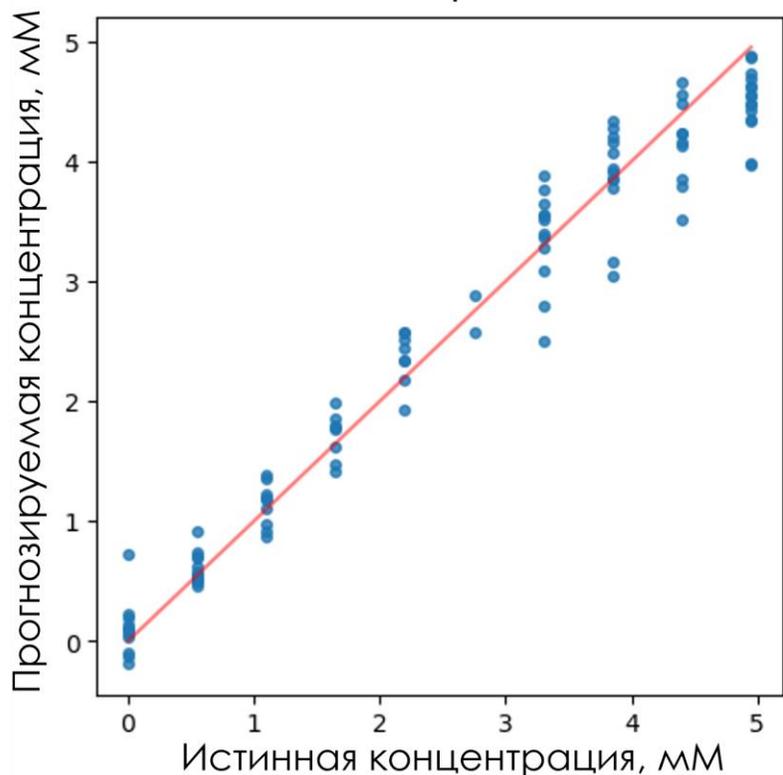


Описание спектра 5-ю величинами:

1. I - Максимальная интенсивность
2. C - Положение максимума
3. wth - Ширина на полувисоте
4. C_h - Положение центра ширины на полувисоте
5. rat - Отношение площадей правого и левого крыла спектров.

Интерпретация СКА. Простая задача

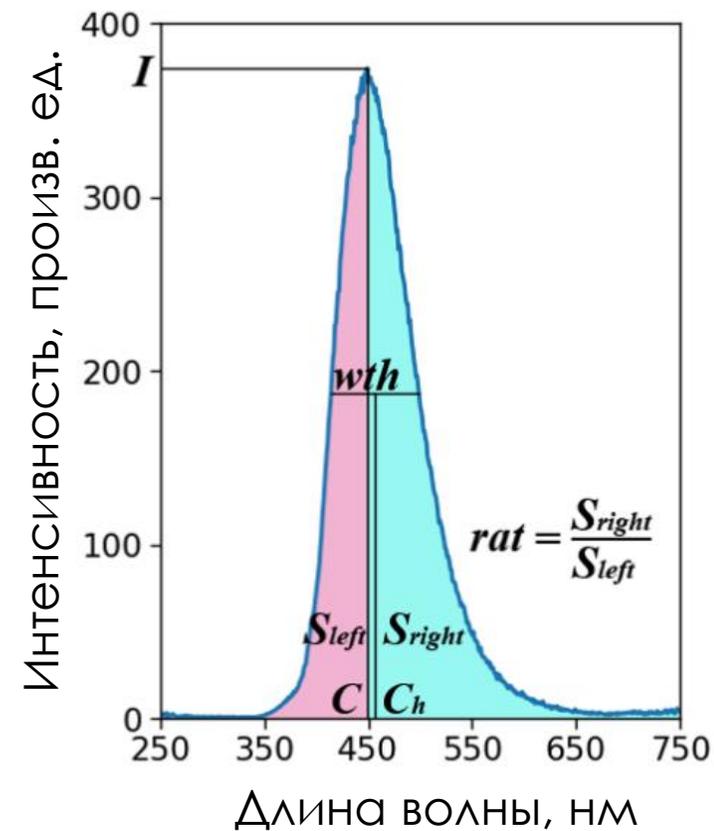
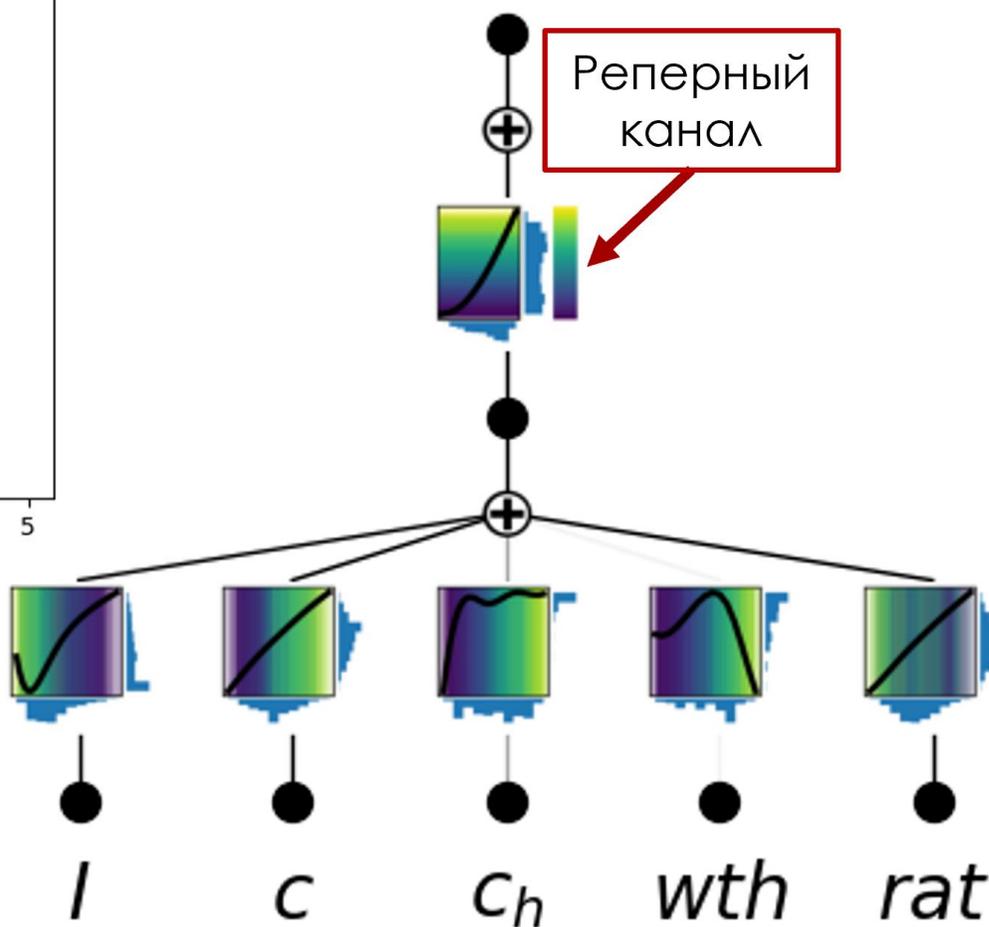
СКО = 0.34 | $R^2 = 0.961$



Средняя квадратичная ошибка (СКО) задается формулой:

$$\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i^{true} - y_i^{pred})^2}$$

Концентрация C_r

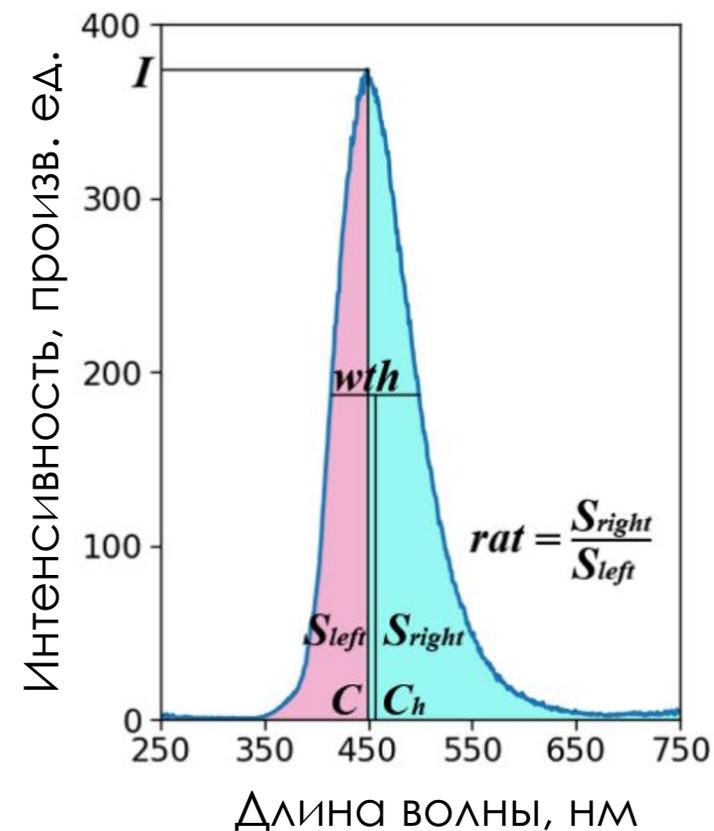
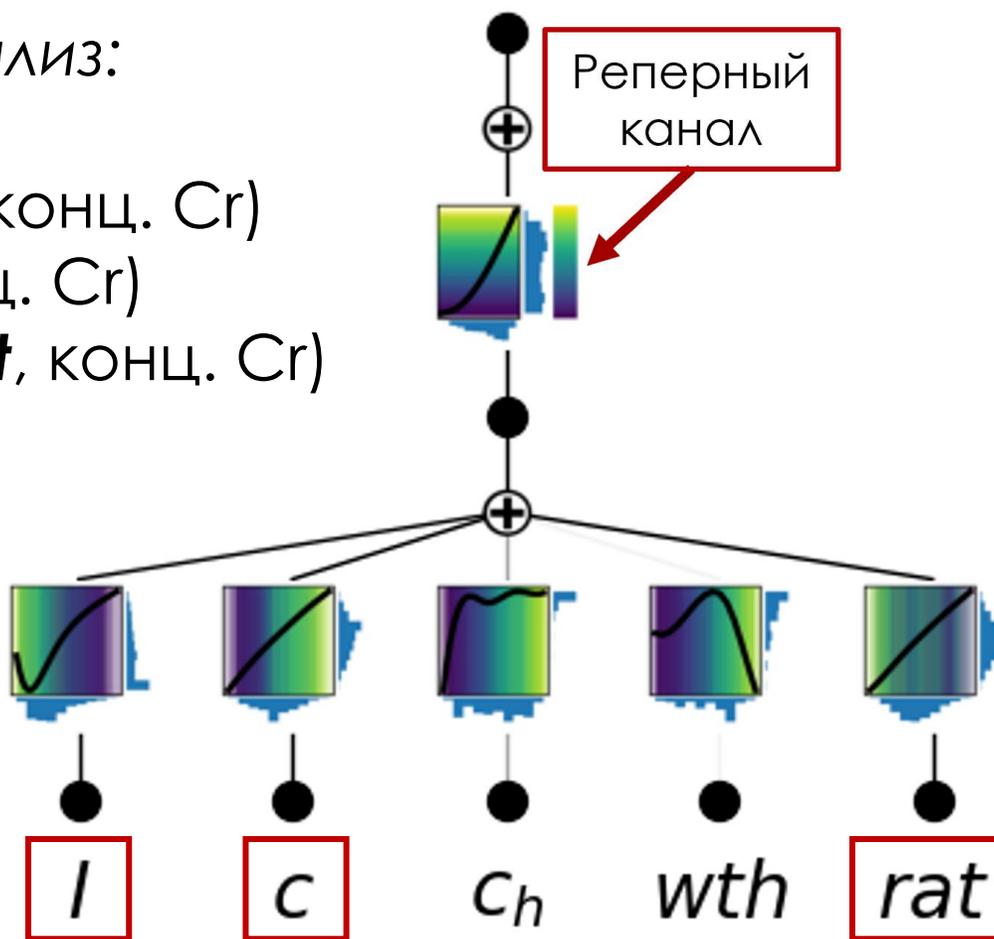


Интерпретация СКА. Простая задача

Концентрация Cr

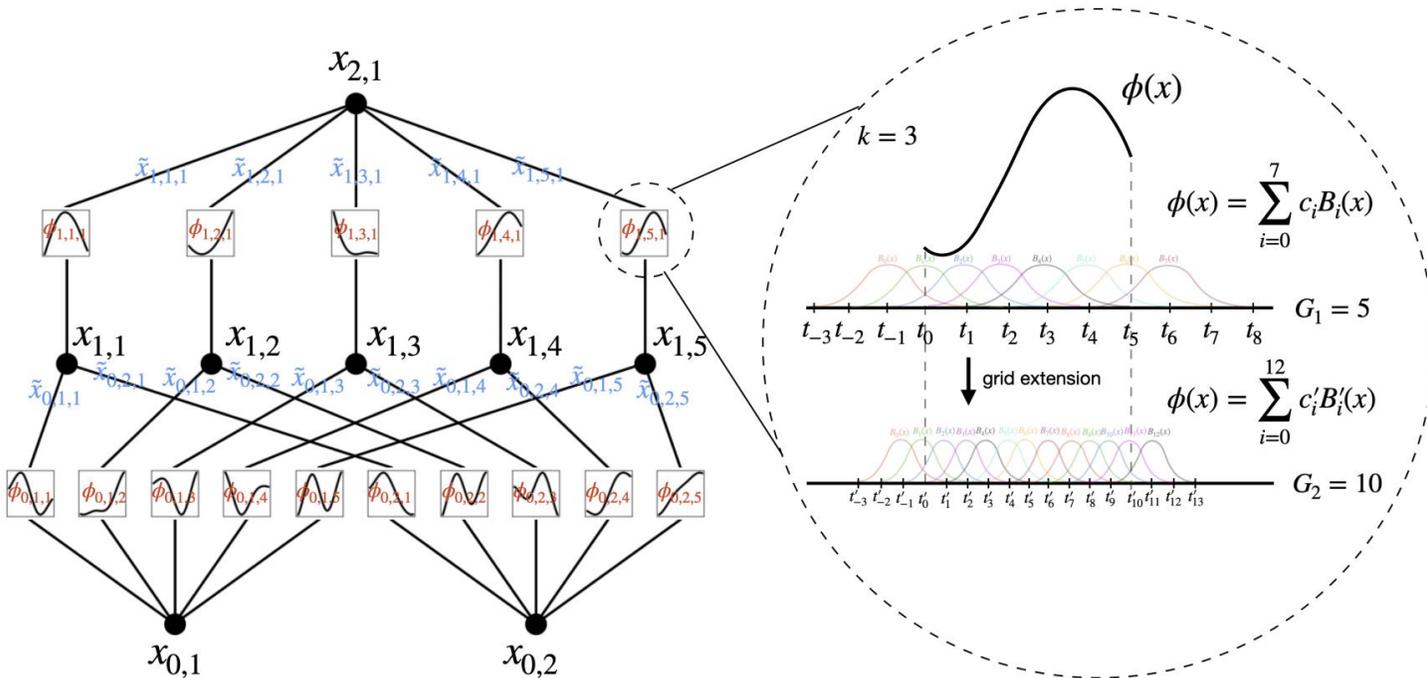
Визуальный анализ:

1. Анतिकорреляция (I , конц. Cr)
2. Корреляция (c , конц. Cr)
3. Анतिकорреляция (rat , конц. Cr)



Функции активации СКА. Базис

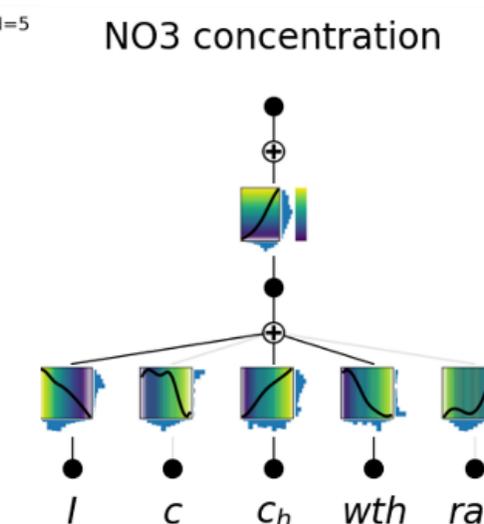
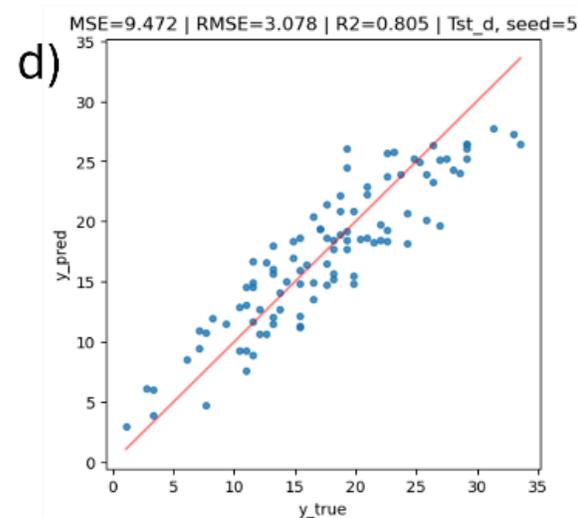
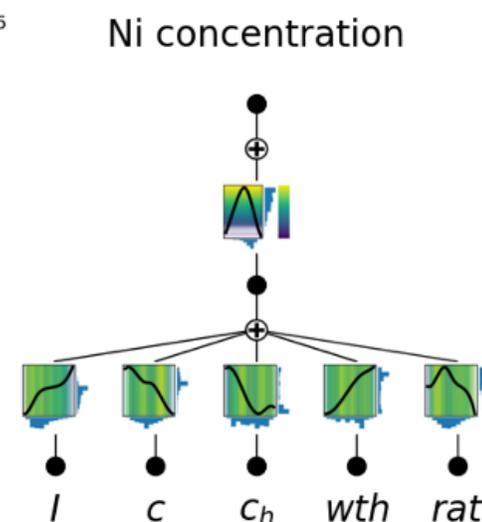
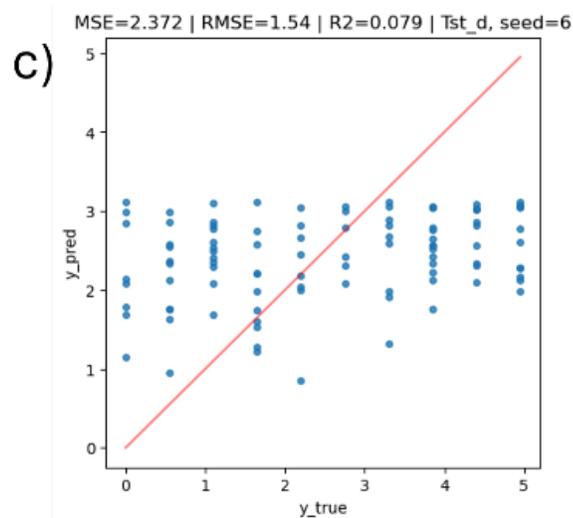
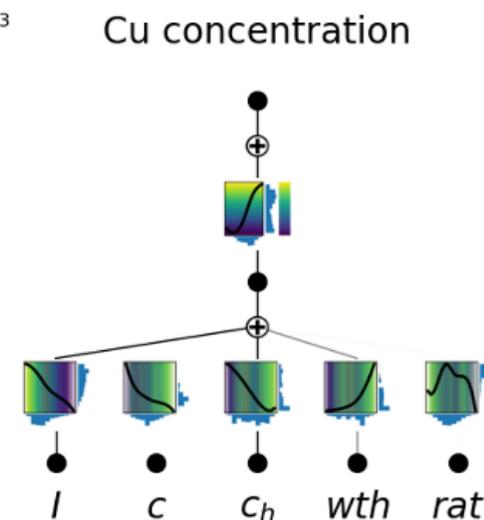
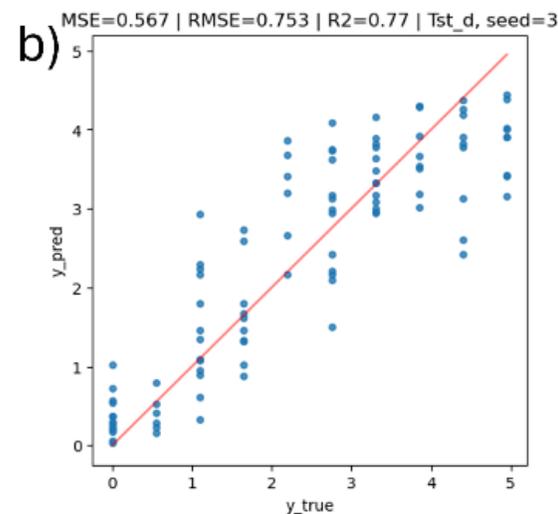
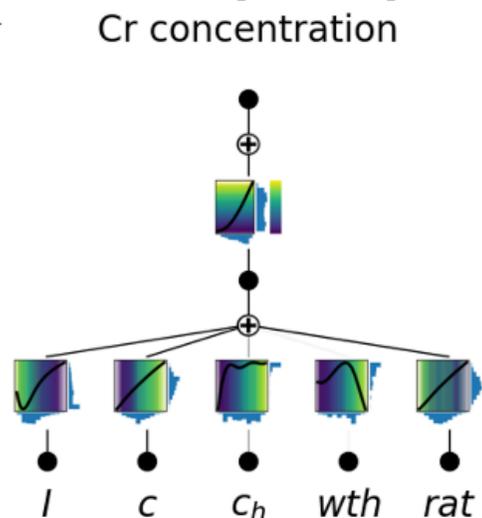
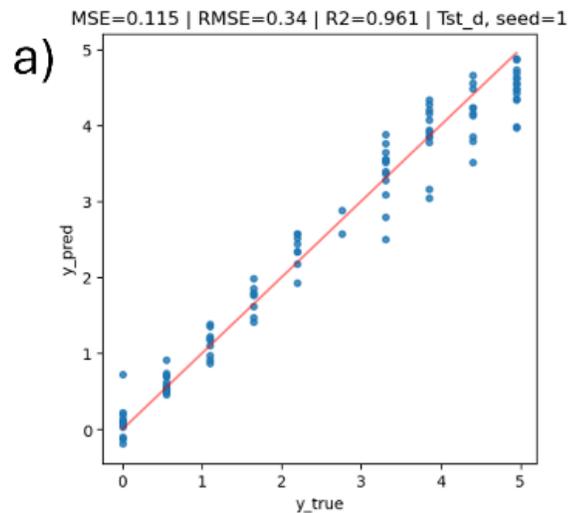
В качестве базиса будем использовать В-сплайны.



Преимущества В-сплайнов в качестве базисных функций:

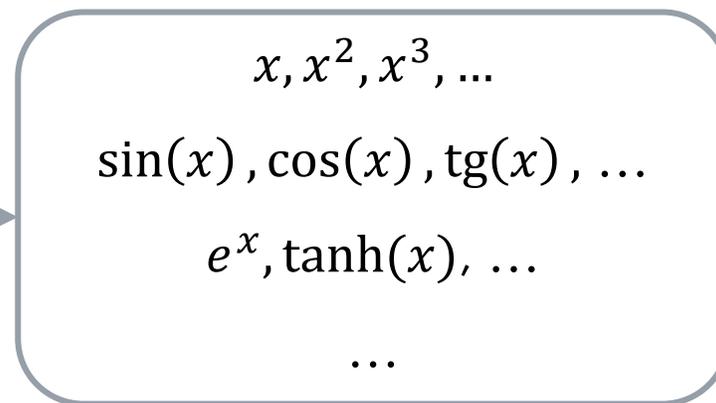
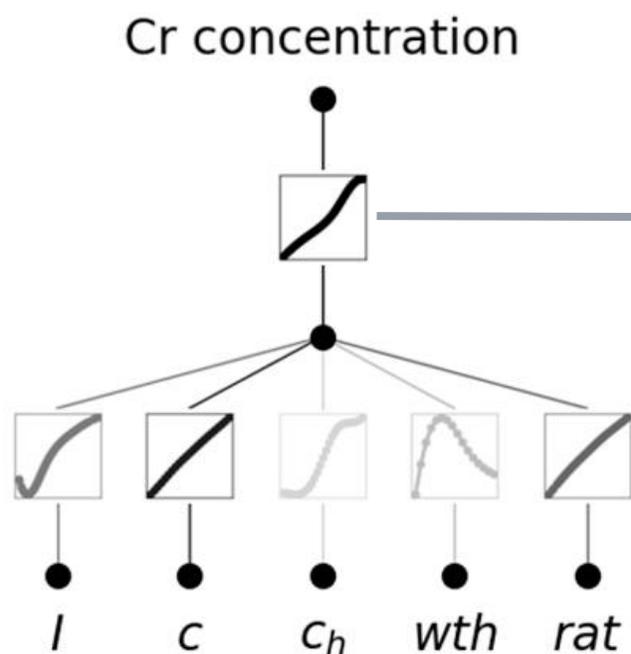
1. Однозначно задаются узлами сетки.
2. Локальность определения
3. Возможность адаптивно изменять точность сетки.

Интерпретация СКА

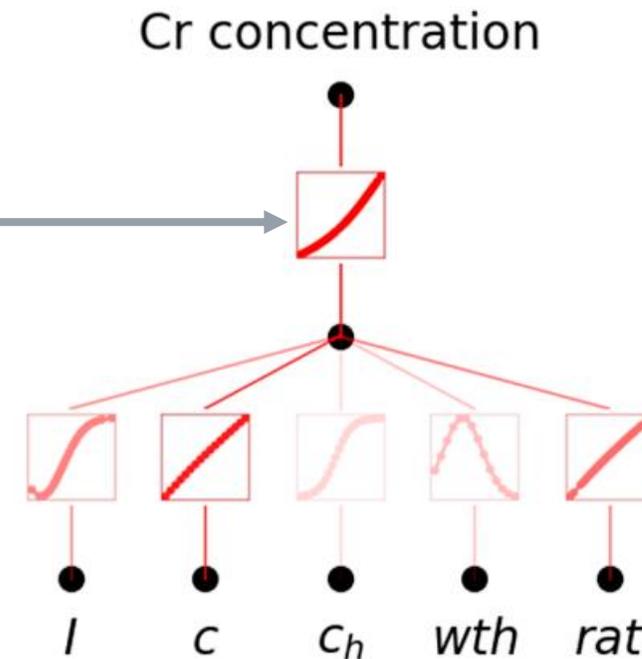


Интерпретация СКА

2. Обученный СКА



3. Аппроксимация актив. функций



4. Приведение к аналитической формуле

$$\begin{aligned} \text{Conc}(\text{Cr}^{3+}) = & 5.02 \cdot \text{atan}(-4.51 \cdot (1 - 0.03 \cdot \mathbf{rat})^4 + 7.16 \cdot (0.11 \cdot \mathbf{C} - 9.74) + 0.13 \cdot \tanh(1.4 \cdot \mathbf{C}_h + 0.21) + 6.82 \\ & + 0.12 \cdot e^{-0.59 \cdot (-\mathbf{wth} - 0.65)^2} - 0.91 \cdot e^{-0.55 \cdot (-0.75 \cdot \mathbf{I} - 1)^2}) + 4.84 \end{aligned}$$

Интерпретация λ -СКА

Основной результат: чувствительность λ -СКА

к входному вектору $x_p \sim \lambda$ -вектору при соблюдении 2 условий:

Условие №1: $\Phi(\dots)$ и $\phi(\dots)$ – независимы.

Условие №2: x_p - имеют близкие распределения

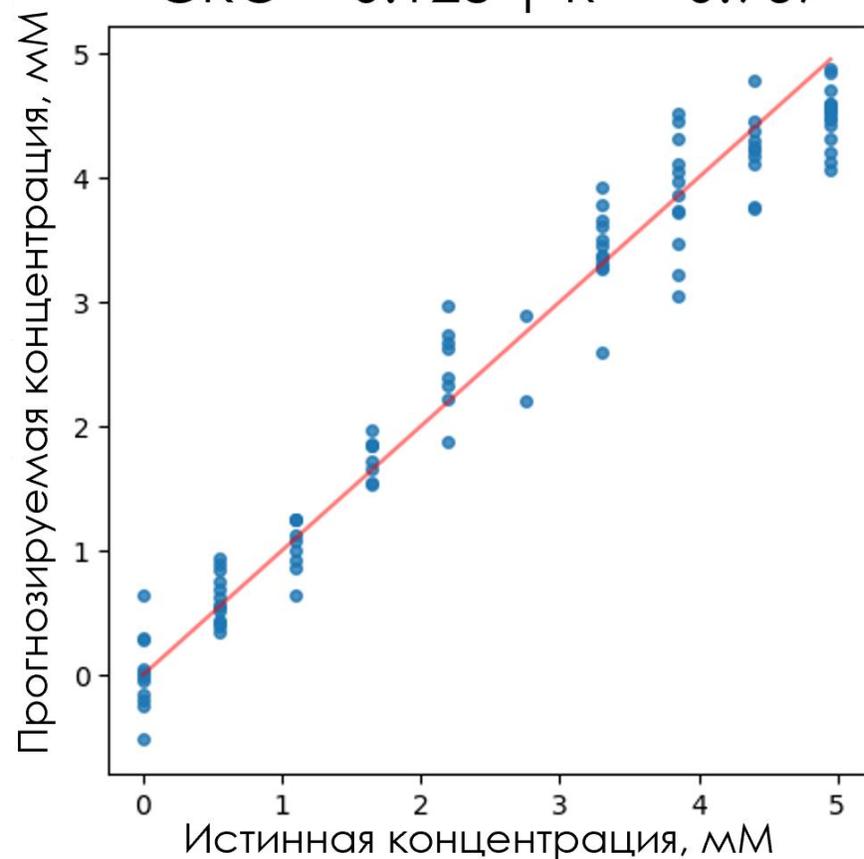
Тогда, дифференцируя модель и усредняя по входному пространству:

$$\left\langle \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i} \right\rangle_X = \lambda_i \cdot \underbrace{\sum_{q=1}^{2n+1} \left\langle \dot{\Phi}_q \left(\sum_{p=1}^n \lambda_p \cdot \Phi_q(x_p) \right) \right\rangle_X}_{\text{Не зависит от } x_i} \cdot \underbrace{\langle \dot{\Phi}_q(x_i) \rangle_X}_{\text{Предполагаем, что } x_i \text{ имеют одинаковое распределение}} \sim \lambda_i$$

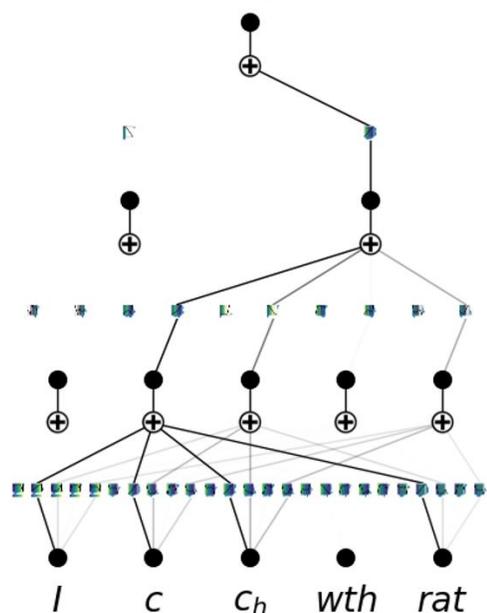
$\left\langle \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i} \right\rangle_X \sim \lambda_i$

Интерпретация λ -СКА. Cr

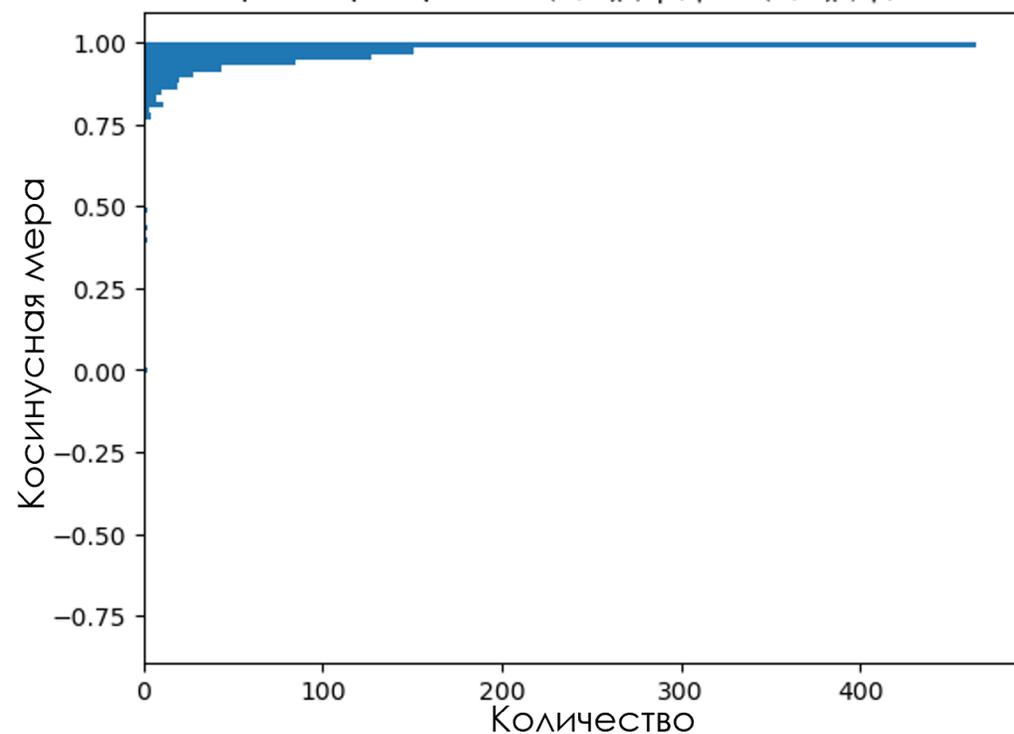
СКО = 0.128 | $R^2 = 0.957$



Концентрация Cr



Гистограмма распределения $\cos(\vec{\lambda}, \vec{\nabla}_x f) | \langle |\cos(\vec{\lambda}, \vec{\nabla}_x f)| \rangle = 0.9488$

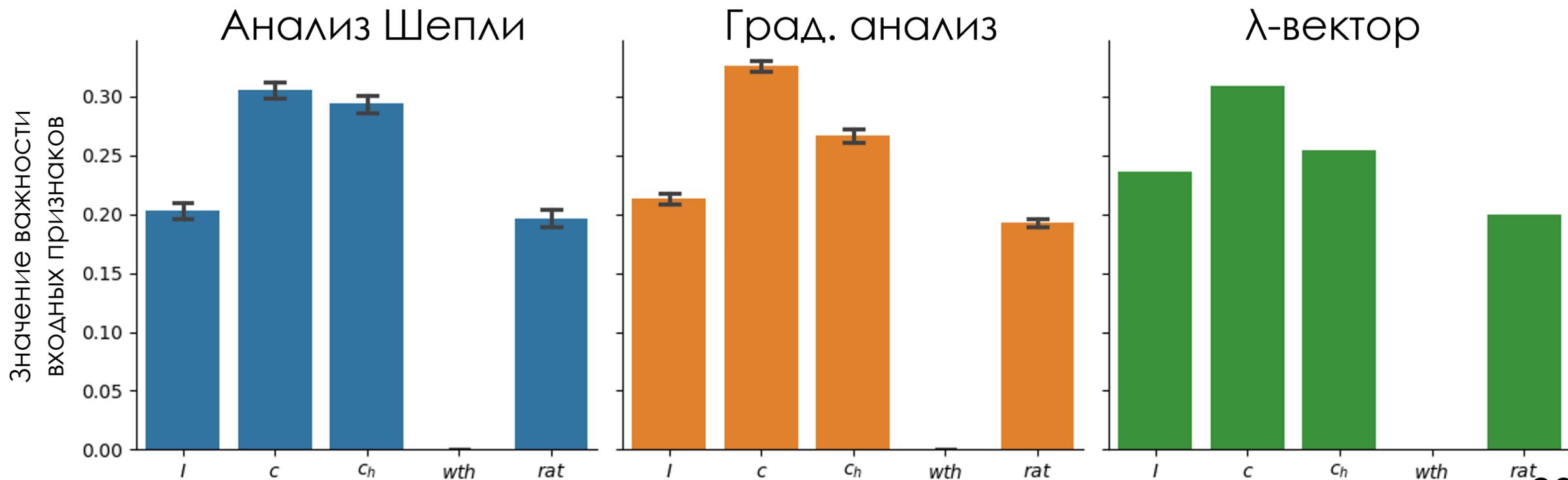


Косинусная мера – косинус угла между λ -вектором и градиентом модели по входным переменным

Интерпретация λ -СКА. Cr

Анализ Шепли – интерпретационный метод, основанный на концепции значений Шепли из теории совместных игр.

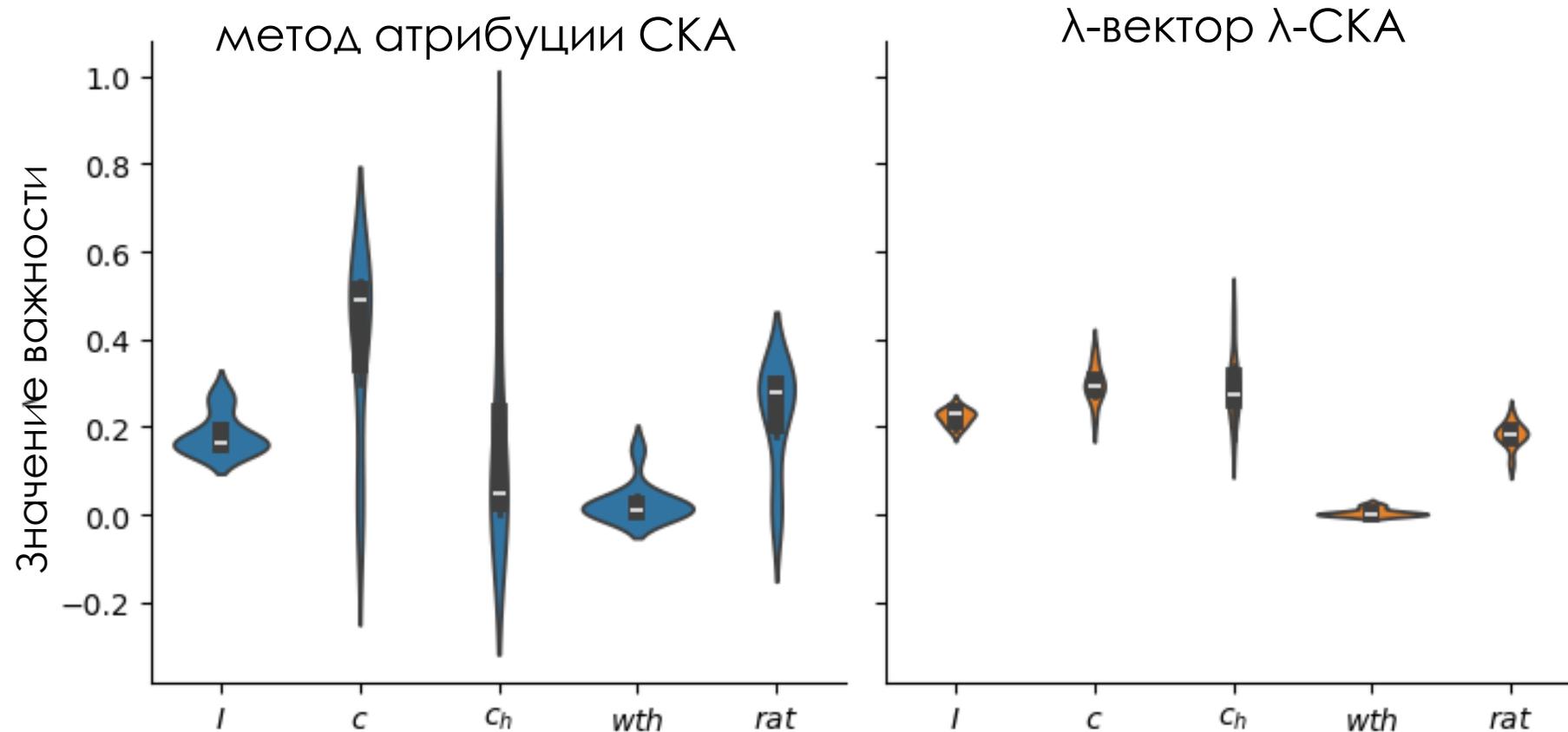
Градиентный анализ – интерпретационный метод, основанный на анализе градиентов модели по входным переменным.



Интерпретация λ -СКА. Cr

Метод атрибуции СКА – метод оценки важности признаков для СКА, предложенный авторами Liu et.al. (<https://arxiv.org/abs/2404.19756>)

Результаты получены на 10 запусках обучения СКА и λ -СКА.



Интерпретация λ -СКА

$$\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_{q=1}^{2n+1} \Phi_q \left(\sum_{p=1}^n \lambda_p \cdot \Phi_q(x_p) \right) = \sum_{q=1}^{2n+1} \frac{\partial}{\partial x_i} \Phi_q \left(\sum_{p=1}^n \lambda_p \cdot \Phi_q(x_p) \right) =$$

$$\sum_{q=1}^{2n+1} \dot{\Phi}_q \left(\sum_{p=1}^n \lambda_p \cdot \Phi_q(x_p) \right) \cdot \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\sum_{p=1}^n \lambda_p \cdot \Phi_q(x_p) \right) =$$

$$\sum_{q=1}^{2n+1} \dot{\Phi}_q \left(\sum_{p=1}^n \lambda_p \cdot \Phi_q(x_p) \right) \cdot \left(\sum_{p=1}^n \lambda_p \cdot \frac{\partial}{\partial x_i} \Phi_q(x_p) \right) =$$

Интерпретация λ-СКА

$$\sum_{q=1}^{2n+1} \dot{\Phi}_q \left(\sum_{p=1}^n \lambda_p \cdot \Phi_q(x_p) \right) \cdot \left(\sum_{p=1}^n \lambda_p \cdot \frac{\partial}{\partial x_i} \Phi_q(x_p) \right) =$$

$$\sum_{q=1}^{2n+1} \dot{\Phi}_q \left(\sum_{p=1}^n \lambda_p \cdot \Phi_q(x_p) \right) \cdot \left(\lambda_i \cdot \dot{\Phi}_q(x_i) \right) =$$

$$\lambda_i \cdot \sum_{q=1}^{2n+1} \dot{\Phi}_q \left(\sum_{p=1}^n \lambda_p \cdot \Phi_q(x_p) \right) \cdot \dot{\Phi}_q(x_i) = \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i}$$

Интерпретация λ-СКА

$$\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i} = \lambda_i \cdot \sum_{q=1}^{2n+1} \dot{\Phi}_q \left(\sum_{p=1}^n \lambda_p \cdot \Phi_q(x_p) \right) \cdot \dot{\Phi}_q(x_i)$$

Независимость Φ и ϕ
([Xing Liu](#))

$$\left\langle \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i} \right\rangle_X = \lambda_i \cdot \left\langle \sum_{q=1}^{2n+1} \dot{\Phi}_q \left(\sum_{p=1}^n \lambda_p \cdot \Phi_q(x_p) \right) \cdot \dot{\Phi}_q(x_i) \right\rangle_X \equiv$$

$$\left\langle \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i} \right\rangle_X = \lambda_i \cdot \sum_{q=1}^{2n+1} \left\langle \dot{\Phi}_q \left(\sum_{p=1}^n \lambda_p \cdot \Phi_q(x_p) \right) \right\rangle_X \cdot \langle \dot{\Phi}_q(x_i) \rangle_X =$$

Интерпретация λ -СКА

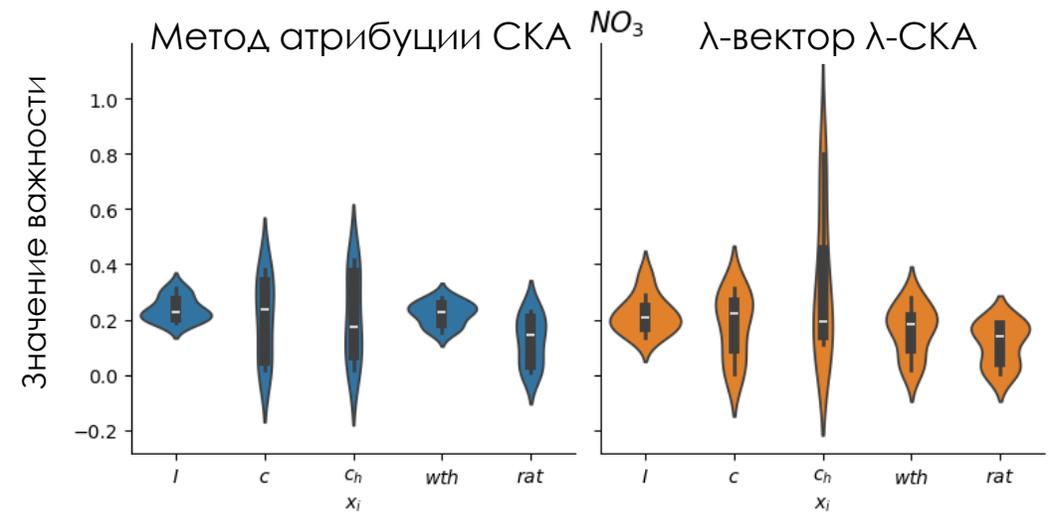
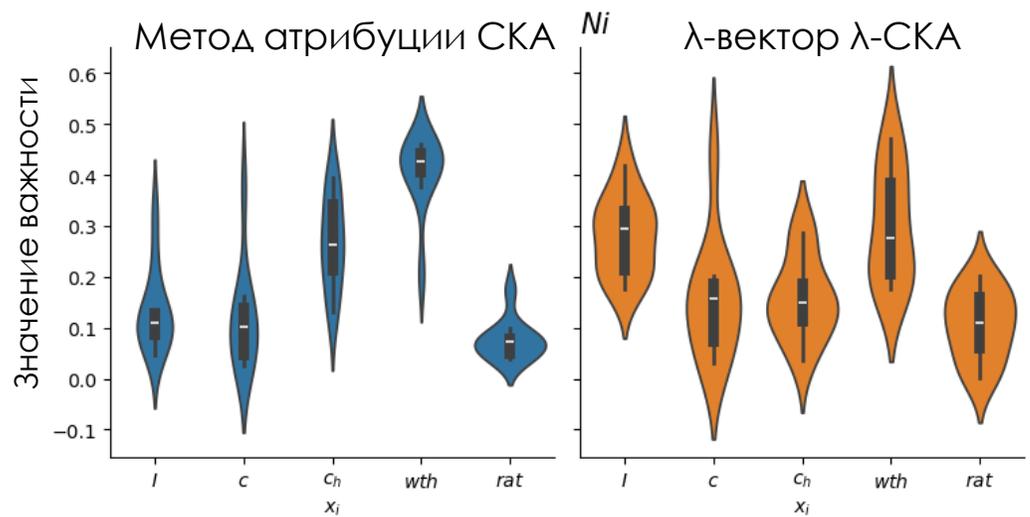
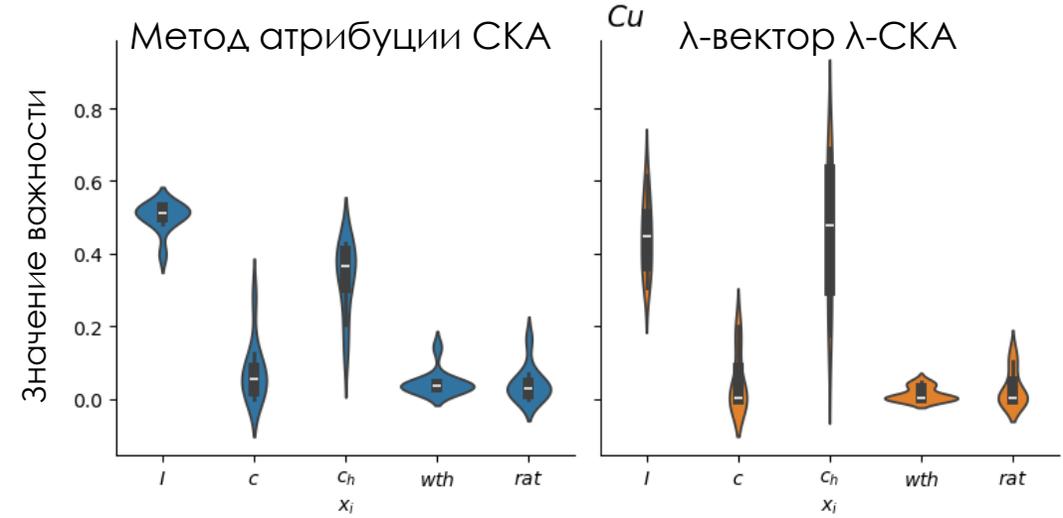
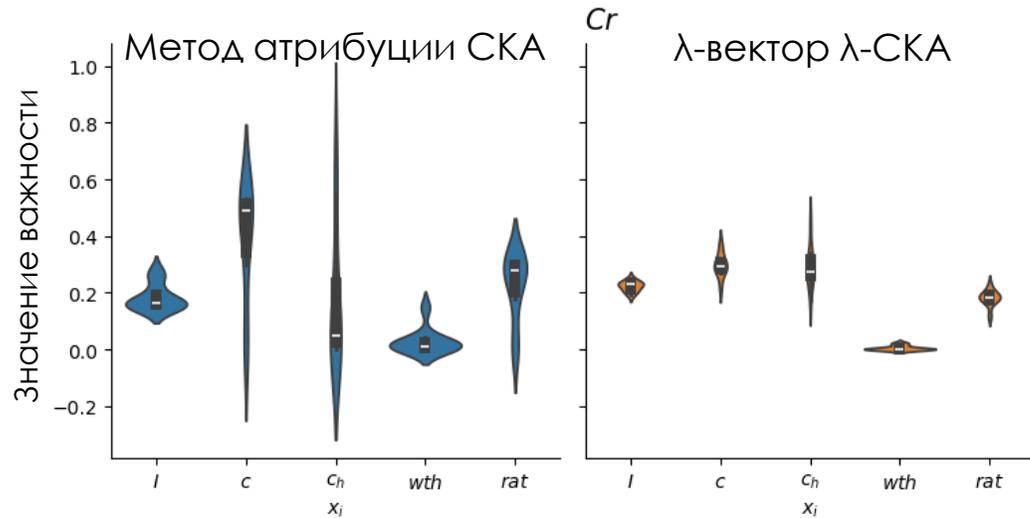
$$\left\langle \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i} \right\rangle_X = \lambda_i \cdot \sum_{q=1}^{2n+1} \underbrace{\left\langle \dot{\Phi}_q \left(\sum_{p=1}^n \lambda_p \cdot \Phi_q(x_p) \right) \right\rangle_X}_{\text{Не зависит от } x_i} \cdot \underbrace{\langle \dot{\Phi}_q(x_i) \rangle_X}_{\text{Предполагаем, что } x_i \text{ имеют одинаковое распределение}} \sim \lambda_i$$

$$\left\langle \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i} \right\rangle_X \sim \lambda_i$$

В итоге, λ_i характеризует чувствительность модели к x_i

$$\left\langle \left| \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i} \right| \right\rangle_X \sim |\lambda_i| \quad \left\langle \left(\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i} \right)^2 \right\rangle_X \sim (\lambda_i)^2$$

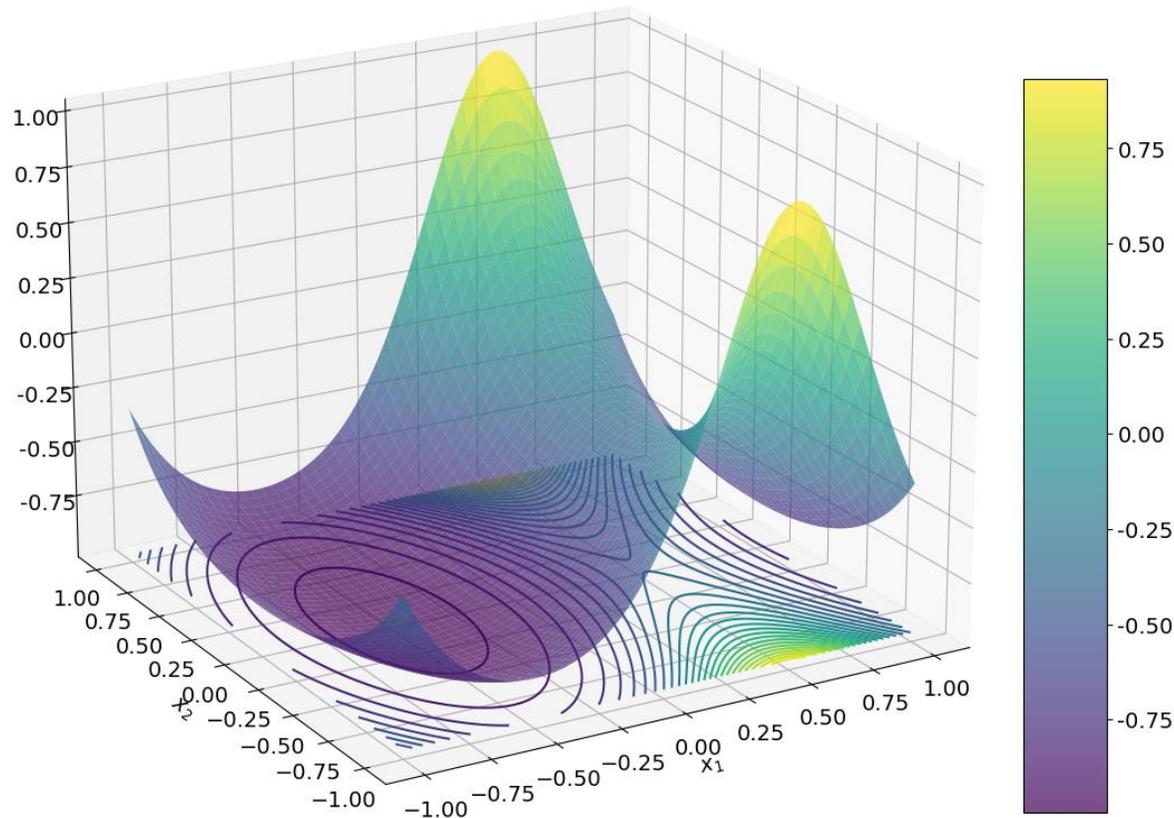
Интерпретация λ -СКА. Все ионы



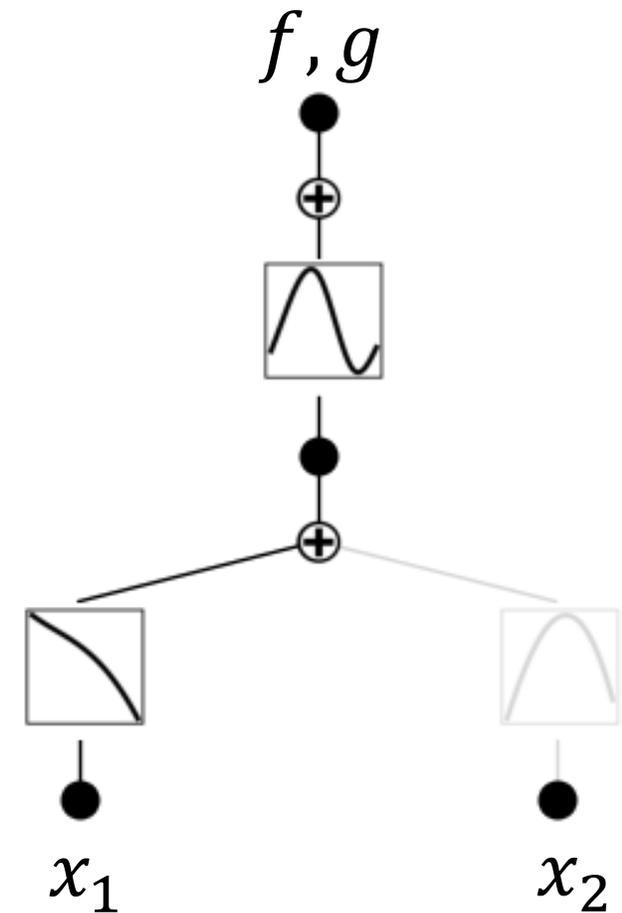
КАН на простейших задачах

Тестовая функция 2-ух переменных:

$$f(x_1, x_2) = \exp(\sin(\pi \cdot x_1) + x_2^2)$$



Простейшая СКА
с одним скрытым слоем



Варьируем число нейронов в скрытом слое

