**Сеть Колмогорова-Арнольда как интерпретируемый искусственный интеллект
в задаче разработки мультимодального фотолюминесцентного
наносенсора ионов металлов на основе углеродных точек**

***Г.А. Куприянов***

*Студент, 5 курс специалитета*

*физический факультет, Московский государственный университет*

*имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

*E-mail: kupriyanovga@my.msu.ru*

Углеродные точки (УТ) представляют собой относительно новый класс углеродных наноматериалов, обладающих такими свойствами, как стабильная и чувствительная к изменениям окружающей среды фотолюминесценция (ФЛ), нетоксичность, биосовместимость, химическая стабильность, дешевизна и экологичность синтеза [1]. Их интенсивная и стабильная люминесценция, зависящая от параметров окружения, делает УТ идеальными кандидатами для использования в качестве наносенсоров, способных эффективно контролировать содержание токсичных веществ в жидких средах [2]. Такие сенсоры могут быть мультимодальными, т.е. способными одновременно определять несколько параметров среды, тем самым повышая скорость диагностики химических веществ в многокомпонентных системах. Перечисленные выше свойства УТ позволяют создавать на их основе эффективные мультимодальные сенсоры для определения, например, концентраций ионов металлов в технических, сточных водах и биосистемах. В данной работе рассматривается решение 4-параметрической обратной задачи фотолюминесцентной спектроскопии: одновременное определение концентрации нескольких типов ионов тяжелых металлов в воде по спектрам люминесценции УТ.

Для разработки подобного наносенсора необходимо научиться распознавать и выделять влияние каждого из искомых параметров на ФЛ наночастиц, то есть решать многопараметрическую обратную задачу фотолюминесцентной спектроскопии. Такие задачи успешно решаются с помощью искусственных нейронных сетей, причём чаще всего используются многослойные персептроны и свёрточные нейронные сети [3, 4, 5]. Однако, в последнее время активное развитие получила и привлекла внимание научного сообщества альтернативная архитектура – сеть Колмогорова-Арнольда (СКА). Основываясь на теореме Колмогорова-Арнольда о представлении функции многих переменных в виде сумм и суперпозиций функций одной переменной [6], СКА осуществляет эффективный поиск таких функций одной переменной [7]. СКА показал превосходство над МНС на широком наборе тестовых задач [7], а также на задачах вычислительной физики и машинного зрения [8, 9]. Наши эксперименты по применению СКА для решения рассматриваемой обратной задачи люминесцентной спектроскопии по наносенсорике УТ также показали их эффективность по сравнению с другими моделями машинного обучения [10].

Особый интерес заслуживают интерпретационные возможности СКА. Визуализация СКА в качестве графа с активационными функциями в вершинах и совокупный анализ этих функций, полученных в процессе обучения, позволяет судить о том, на основании каких выявленных закономерностей СКА решает конкретную задачу. Так, используя факт тушения флуоресценции ионами металлов, удалось показать физическую обусловленность работы СКА при предсказании концентраций ионов меди и нитрат-ионов. Однако, сильная корреляция входных признаков может привести к противоречивой интерпретации СКА, как это произошло с предсказанием концентрации катиона хрома. Для борьбы с этим эффектом предложен метод последовательного анализа обработки моделью поднаборов данных, упорядоченных по одному из входных признаков.

Автор работы является стипендиатом *Фонда развития теоретической физики и математики «Базис»* и *Некоммерческого Фонда развития науки и образования «Интеллект».*

**Литература**

1. Jorns M. et al.: Nanomaterials, 11(6), 1448, 2021. https://doi.org/10.3390/nano11061448
2. А.А. Корепанова, и др. Влияние кислотности и основности растворителя на оптические свойства углеродных точек. Оптика и спектроскопия, 132(3), стр. 247-253, 2024.

DOI: 10.61011/OS.2024.03.58144.23-24

1. O.E. Sarmanova et al.: Decoding Fluorescence Excitation-Emission Matrices of Carbon Dots Aqueous Solutions with Convolutional Neural Networks to Create Multimodal Nanosensor of Metal Ions. Machine learning in natural science, pp.202-209, 2023.

DOI: 10.3103/S0027134923070287

1. G. N. Chugreeva et al.: Application of Convolutional Neural Networks for Creation of Photoluminescent Carbon Nanosensor for Heavy Metals Detection. Optical Memory and Neural Networks, 32(2), pp. 244-251, 2023.

DOI: 10.3103/s1060992x23060036

1. O. E. Sarmanova et al.: Applications of Fluorescence Spectroscopy and Machine Learning Methods for Monitoring of Elimination of Carbon Nanoagents from the Body. Optical Memory and Neural Networks, 32(1), pp. 20-33, 2023.

DOI: 10.3103/S1060992X23010046

1. А.Н. Колмогоров: О представлении непрерывных функций нескольких переменных в виде суперпозиций непрерывных функций одного переменного и сложения. Изд. Акад. Наук СССР 108, 179-182, 1956.
2. Liu, Z. et al. KAN: Kolmogorov-Arnold Networks. arXiv:2404.19756v4 (2024).
DOI: 10.48550/arXiv.2404.19756.
3. Yizheng Wang et. al.: Kolmogorov–Arnold-Informed neural network: A physics-informed deep learning framework for solving PDEs based on Kolmogorov–Arnold Networks. arXiv:2406.11045v1.
4. Xingyi Yang, Xinchao Wang: Kolmogorov-Arnold Transformer.
arXiv:2409.10594.
5. G.A. Kupriyanov, et al.: Solution of an Inverse Problem of Optical Spectroscopy using Kolmogorov-Arnold Networks. Optical Memory and Neural Networks, 33(suppl.3), S475-S482, 2024. DOI: 10.3103/S1060992X24700747