

Таким образом, для максимального сохранения каталитической активности каталазы лучше использовать в качестве систем ее доставки СС и ССФ.

ЛИТЕРАТУРА

1. Zámocký M., Koller F. Understanding the structure and function of catalase: clues from molecular evolution and in vitro mutagenesis // Progress in Biophysics and Molecular Biology. – 1999. – V. 72, № 1. – P. 19–66.

2. Trushina D.B., Bukreeva T.V., Kovalchuk M.V., Antipina M.N. CaCO₃ vaterite microparticles for biomedical and personal care applications // Mater Sci. Eng. – 2014. – P. 10–15.

3. Трушина Д. Б. Структура и свойства частиц ватерита с регулируемым размером и их применение в качестве носителей для доставки лекарственных веществ: диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук 01.04.07 // Д. Б. Трушина; МГУ им. М. В. Ломоносова. –2016. – С. 6–33.

УДК 543.42.062, 681.586.5

С.Б. Бушук, канд. физ.-мат. наук., зав. лаб.,
И.Н. Пучковский, науч. сотр.,
С.С. Шавель, науч. сотр.,
(ГНПО «ОЭЛТ», Минск);
П.А. Куликовская, мл. науч. сотр.,
М.А. Ходасевич, д-р физ.-мат. наук, гл.н.с.,
(ИФ НАН Беларуси, г. Минск)

ОДНОВРЕМЕННАЯ КАЛИБРОВКА МЕХАНИЧЕСКОГО НАПРЯЖЕНИЯ И ТЕМПЕРАТУРЫ С ПОМОЩЬЮ ОДИНОЧНОЙ ИЗОТРОПНОЙ ВОЛОКОННОЙ БРЭГГОВСКОЙ РЕШЕТКИ И ЛИНЕЙНЫХ И НЕЛИНЕЙНЫХ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Волоконно-оптические датчики на основе брэгговских решёток широко применяются для мониторинга температуры и механических деформаций в инженерных и строительных конструкциях благодаря высокой чувствительности, компактности и возможности мультиплексирования в одном оптическом волокне [1]. Спектральный отклик таких датчиков определяется положением и формой отражённого брэгговского пика, которые изменяются под действием внешних тепловых и механических воздействий.

Ранее было показано [2], что одновременное измерение темпе-

ратуры и механического напряжения может быть реализовано с использованием одного датчика на основе волоконной брэгговской решётки (ВБР) при анализе полного спектра отражения с применением многопараметрического метода частичных наименьших квадратов (PLS) [3]. Такой подход позволяет отказаться от применения дополнительных температурных датчиков и повысить интегрируемость измерительной системы при мониторинге строительных конструкций. Вместе с тем спектральный отклик брэгговских решёток при одновременном воздействии температуры и механического напряжения может проявлять нелинейные особенности, обусловленные фотоупругими и термооптическими эффектами, а также изменением формы отражённого спектра. В подобных условиях линейные регрессионные модели, включая метод PLS, могут демонстрировать ограниченную точность.

В настоящей работе для повышения точности многопараметрической калибровки предлагается использовать нелинейный метод регрессии на опорные вектора (SVR) [4] и провести сравнительный анализ результатов применения линейного метода PLS и нелинейного метода SVR для калибровки температуры и механического напряжения по спектрам отражения волоконных брэгговских решёток.

Для регистрации спектров отражения волоконных брэгговских решёток использовалось излучение свип-лазера с центральной длиной волны 1060 нм, диапазоном перестройки 100 нм и частотой 400 кГц. Отражённое излучение регистрировалось спектрометром OceanOptics USB2000 в диапазоне длин волн 670–1325 нм. Для повышения отношения сигнал–шум каждый измеренный спектр представлял собой усреднение по 25 последовательным импульсам лазерного излучения. Экспериментальные данные были получены в диапазоне температур от 299 до 398 К при различных значениях механического напряжения в диапазоне 0–5 Гпа (масса подвешенного к волокну груза 0–75 г). Было зарегистрировано 100 спектров отражения ВБР с шагом по температуре 1 К, масса груза задавалась случайным образом с шагом 1 г.

При построении многопараметрических калибровочных моделей методом PLS исходные спектры отражения ВБР проецируются в маломерное пространство латентных переменных, формируемых таким образом, чтобы максимизировать ковариацию между спектральными данными и калибруемыми параметрами – температурой и механическим напряжением. В качестве критерия качества калибровочных моделей использовалось значение среднеквадратичного отклонения оценки зависимой величины RMSEP. Экспериментальные данные были разделены на обучающую и проверочную выборки, содержащие 60 и 40 спектров соответственно. Формирование выборок осуществля-

лось по двум зависимым параметрам: температуре и механическому напряжению. В каждом случае в обучающую выборку включались по два измерения, соответствующие минимальным и максимальным значениям выбранного калибруемого параметра, что обеспечивало нахождение проверочной выборки внутри диапазона обучения. Остальные измерения распределялись между обучающей и проверочной выборками случайным образом. Для повышения статистической надёжности оценки качества моделей для каждого способа формирования выборок было выполнено по пять независимых реализаций разбиения данных. Итоговые значения метрик качества калибровки рассчитывались как средние по всем реализациям.

Для повышения точности многопараметрических калибровочных моделей и снижения избыточности исходных спектральных данных применялся метод выбора спектральных переменных на основе поиска комбинации движущихся окон – scmwiPLS (searching combination moving window interval PLS) [5]. Данный метод позволяет выявлять информативные спектральные интервалы, в наибольшей степени связанные с изменением калибруемых параметров.

Для учёта возможных нелинейных зависимостей между спектрами отражения ВБР и калибруемыми параметрами в работе использовался метод SVR. Отличие метода SVR от PLS, оперирующего в пространствах переменных малой размерности, состоит в так называемом «трюке с ядром» – использовании функции ядра, которая, рассматривая векторы в исходном пространстве переменных, определяет их модифицированное скалярное произведение в пространстве большей размерности и позволяет рассматривать нелинейные регрессионные модели. В работе SVR применялся к спектральным переменным, предварительно отобранном методом scmwiPLS, что обеспечивало сопоставимость линейных и нелинейных моделей.

Таблица – Среднеквадратичное отклонение RMSEP калибровки механического напряжения и температуры разными многопараметрическими моделями

RMSEP	Методы	Формирование выборки по температуре	Формирование выборки по механическому напряжению
Температура, °C	PLS	4,94	4,94
	scmwiPLS	2,91	1,95
	SVR	5,26	5,07
	scmwiPLS+SVR	2,87	2,72
Механическое напряжение, г	PLS	2,31	2,22
	scmwiPLS	2,04	2,03
	SVR	2,78	2,64
	scmwiPLS+SVR	1,69	1,55

Как видно из представленных данных, использование выбора спектральных переменных методом *scmwiPLS* приводит к снижению значения *RMSEP* по сравнению с широкополосными моделями. Нелинейный метод *SVR* без предварительного отбора переменных не демонстрирует устойчивого преимущества по сравнению с *PLS*, тогда как комбинация *scmwiPLS+SVR* обеспечивает наименьшие значения *RMSEP* для обоих калибруемых параметров. На рисунке 1 представлены зависимости оценок температуры и механического напряжения от измеренных величин для лучших калибровочных моделей, соответствующих минимальным значениям *RMSEP*.

Итак, в работе проведено сравнение линейного метода частичных наименьших квадратов и нелинейного метода регрессии на опорные вектора при многопараметрической калибровке температуры и механического напряжения по спектрам отражения одиночной изотропной волоконной брэгговской решётки. Показано, что использование выбора спектральных переменных методом поиска комбинации комбинации движущихся окон повышает точность калибровки для обоих подходов. Наименьшие значения среднеквадратичного отклонения оценки температуры получены при применении линейной калибровки с выбором переменных, а механического отклонения – нелинейной, что указывает на возможность учета различного характера изменения спектрального отклика ВБР при воздействии температуры и механического напряжения при применении методов машинного обучения.

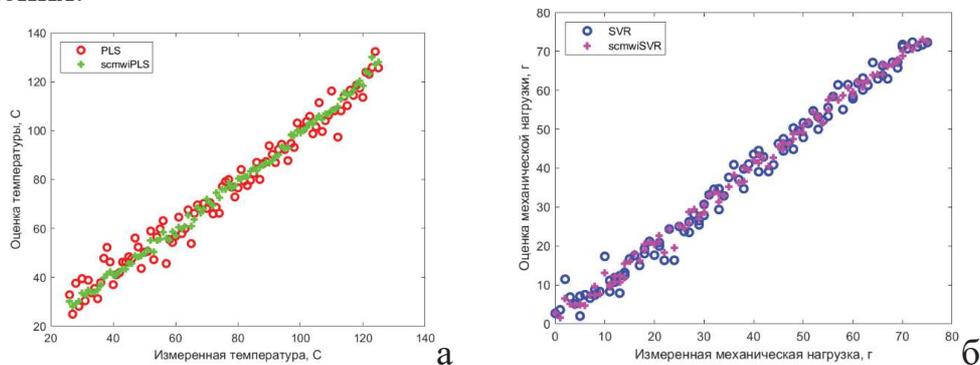


Рисунок 1 – Зависимость оценок температуры методом *scmwiPLS* (а) и механического напряжения методом *scmwiPLS+SVR* (б)

ЛИТЕРАТУРА

1. Albert, J. Tilted fiber Bragg grating sensors / J. Albert, S. L. Y. Shao, C. Caucheteur // *Laser Photonics Reviews*. – 2013. – V. 7, № 1. – P. 83–108.
2. Одновременная калибровка механического напряжения и температуры с помощью одной волоконной брэгговской решетки и

методов машинного обучения / С.Б. Бушук и др // Квантовая электроника. – 2025. – С. 521–525.

3. Geladi, P. Partial Least-Squares Regression: A Tutorial / P. Geladi, B. Kowalski. // *Analytica Chimica Acta*. – 1986. – V. 186. – P. 1–17.

4. Guenther N., Schonlau M. Support Vector Machines // *The Stata Journal: Promoting Communications on Statistics and Stata*. – 2016. – V. 16, – №. 4. – P. 917–937.

5. Ходасевич, М.А. Методы построения обучающего набора для калибровки с помощью флуоресцентной спектроскопии небольших выборок / М.А. Ходасевич, Н.А. Саскевич // *Весці НАН Беларусі, сер. фіз.-мат. навук*. – 2018. – № 1. – С. 77–83.

УДК 543.422:633.88

В.А. Асеев, зав. лаб. (Университет ИТМО, С-Петербург, Россия);

Д.А. Королько, науч. сотр. (ИФ НАН Беларусі, г. Минск);

А.А. Савчук, пом. рук. центра (Университет ИТМО, С-Петербург, Россия);

М.А. Ходасевич, гл. науч. сотр. (ИФ НАН Беларусі, г. Минск)

ВЛИЯНИЕ ВИДА ПРЕДОБРАБОТКИ ЛАЗЕРНЫХ ЭМИССИОННЫХ СПЕКТРОВ НА ТОЧНОСТЬ ЛИНЕЙНЫХ И НЕЛИНЕЙНЫХ МНОГОПАРАМЕТРИЧЕСКИХ КАЛИБРОВОЧНЫХ МОДЕЛЕЙ СОСТАВА БИЛЛОННЫХ СПЛАВОВ

При изучении металлических исторических артефактов пристальное внимание в настоящее время уделяется составу изучаемых объектов. Наиболее распространенным неразрушающим методом исследования в этой области является рентгено-флуоресцентный анализ, который при исследовании, например, биллонных монет (серебряных монет пятисотой и ниже пробы с, как правило, медной лигатурой) позволил уточнить время выпуска этих монет и построить их типологические цепочки, но исследует только приповерхностный слой образцов. Лазерная эмиссионная спектроскопия (LIBS) [1] позволяет проводить послойный анализ материала с высоким пространственным разрешением, а применение многопараметрической обработки данных позволяет существенно повысить точность калибровочных моделей.

Калибровочные модели содержания меди и серебра в исследуемых 13 образцах эталонных биллонных сплавов были построены по 200 лазерным эмиссионным спектрам, зарегистрированным в диапазоне длин волн 336,6–892,7 нм с шагом около 0,3 нм (2048 спектральных переменных) в 10 точках на поверхности каждого образца.

В качестве методов предобработки лазерных эмиссионных спек-