

Определение содержания вредных примесей в воде с помощью лазерной спектроскопии комбинационного рассеяния и методов машинного обучения

К.А. Лаптинский^{✉1}, С.А. Буриков^{1,2}, А.М. Вервальд², А.А. Гуськов^{1,2},
И.В. Пластинин¹, О.Э. Сарманова^{1,2}, Л.С. Утегенова², Т.А. Доленко^{1,2*}

¹НИИ ядерной физики им. Д.В. Скобельцына,
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова
119991, г. Москва, Ленинские горы, 1, стр. 2

²Физический факультет, Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова
119991, г. Москва, Ленинские горы, 1, стр. 2

Поступила в редакцию 31.08.2023;
после доработки 04.10.2023;
принята к печати 29.01.2024

В ходе технологического развития общества неизбежно возникает проблема нарушения экологического состояния окружающей среды, например в водоемах. Для своевременного реагирования на изменения концентраций различных загрязнителей в природных водоемах необходимо разработать экспрессный дистанционный метод. Создание такого метода возможно на основе спектроскопии комбинационного рассеяния света, однако в ходе разработки возникает большое количество различных сложностей, в частности касающихся способа предобработки полученных данных. В настоящей статье представлены результаты применения методов машинного обучения для разработки дистанционного метода определения по спектрам комбинационного рассеяния света типа и концентрации растворенных ионов в водных средах. Использование искусственных нейронных сетей позволило идентифицировать и одновременно определить концентрации каждого из восьми ионов (Zn^{2+} , Cu^{2+} , Li^{+} , Fe^{3+} , Ni^{2+} , NH_4^{+} , SO_4^{2-} , NO_3^{-}) в многокомпонентной водной смеси с погрешностями, удовлетворяющими потребностям экологического мониторинга природных и сточных вод. Обнаружено существенное влияние способа предобработки спектров комбинационного рассеяния на результат решения обратной спектроскопической задачи. Полученные результаты могут использоваться для решения многопараметрической обратной задачи качественного и количественного определения ионов в воде.

Ключевые слова: спектроскопия комбинационного рассеяния, диагностика сточных вод, методы машинного обучения, предобработка спектров, искусственные нейронные сети; Raman spectroscopy, wastewater diagnostics, machine learning method, spectra preprocessing, artificial neural network.

Введение

На сегодняшний день все более актуальной становится задача непрерывного мониторинга состояния сточных вод. Связано это в первую очередь с урбанизацией и активным развитием промышленного производства. Основным источником поступления токсичных металлов в природные водо-

емы является их прямое загрязнение технологическими производственными средами и сток с суши. Только воды рек ежегодно приносят в океан свыше 320 Мт железа [1]. В водных объектах Российской Федерации наиболее часто детектируется превышение предельно допустимых концентраций меди, цинка, никеля и марганца, при этом наиболее загрязненными оказываются участки рек на границе с Норвегией, Украиной, Казахстаном и Китаем [2]. Загрязнение окружающей среды тяжелыми металлами приводит к увеличению заболеваемости населения хроническими дерматозами, экземами, атипичными дерматитами и токсидермами [3]. Дополнительную опасность представляет то, что металлы могут реагировать с биологическими системами, теряя один или несколько электронов и образуя катионы металлов, обладающие высоким сродством с нуклеофильными участками жизненно важных макромолекул

* Кирилл Андреевич Лаптинский (laptinskiy@physics.msu.ru); Сергей Алексеевич Буриков (sergey.burikov@gmail.com); Алексей Михайлович Вервальд (alexey.vervald@physics.msu.ru); Артем Алексеевич Гуськов (artemguskov99@mail.ru); Иван Владимирович Пластинин (plastinin_ivan@mail.ru); Ольга Эдуардовна Сарманова (oe.sarmanova@physics.msu.ru); Луиза Салаватовна Утегенова (utegenova.ls20@physics.msu.ru); Татьяна Альдефонсовна Доленко (tdolenko@mail.ru).

(в частности, цепочек ДНК). Дисфункция желудочно-кишечного тракта и почек, расстройства нервной системы, поражения кожи, сосудов, дисфункция иммунной системы, врожденные дефекты и рак — примеры токсического воздействия тяжелых металлов [4, 5]. Так, экспериментальные и эпидемиологические исследования показали, что никель является канцерогеном [6], а основной источник попадания этого металла в организм человека — питьевая вода [7]. Одновременное воздействие двух или более металлов может иметь кумулятивный эффект [8].

Из вышесказанного следует важность мониторинга качественного и количественного состава водных сред для своевременного реагирования на превышение предельно допустимых концентраций вредных примесей, в первую очередь тяжелых металлов. Имеющиеся на сегодняшний день методы аналитической химии позволяют с высокой точностью определять концентрации вредных примесей, в частности катионов тяжелых металлов. Однако они требуют длительной пробоподготовки, высокой квалификации персонала, проводящего анализ, и, что самое важное, не обеспечивают дистанционного и экспрессного анализа проб. Оптические методы, например спектроскопия комбинационного рассеяния света (КРС), способны обеспечить быстрый качественный и количественный анализ водной среды [9, 10] и дистанционные измерения [11–13].

Предпосылкой к успешному решению обратной задачи спектроскопии — определению солевого состава пробы по полученному спектру КРС — является то, что многие ионы имеют собственные характеристические полосы в спектрах КРС (например, сульфаты и нитраты [14]), а наличие и концентрацию простых ионов, не имеющих собственных полос КРС, можно установить по деформации формы полосы валентных колебаний ОН-групп молекул воды [15, 16].

Очевидно, что при наличии в исследуемой пробе одновременно нескольких компонентов выделить влияние каждого из растворенных ионов на валентную полосу ОН-групп традиционными методами не представляется возможным. Это обусловлено, с одной стороны, тем, что деформация валентной полосы воды при добавлении различных ионов носит слабо специфичный характер (например, добавление ионов металлов Са, Mg, Al приводит к смещению положения максимума валентной полосы воды в область больших волновых чисел, и однозначно определить качественный состав пробы без априорной информации не представляется возможным), а с другой — взаимодействием ионов не только с молекулами воды, но и друг с другом, что также отражается на изменении формы спектра [17]. Поэтому для решения поставленной обратной многопараметрической задачи необходимо применение современных методов обработки данных — методов машинного обучения (ММО), а именно, искусственных нейронных сетей (ИНС), которые хорошо зарекомендовали себя в решении задач распознавания образов и различных обратных задач оптической спектроскопии [17–20].

Целью настоящего исследования является разработка метода идентификации ионов-загрязнителей (катионы лития, аммония, железа (III), никеля, меди и цинка, а также сульфат- и нитрат-анионы) в многокомпонентном водном растворе и определения концентрации каждого из них по спектрам комбинационного рассеяния света с помощью искусственных нейронных сетей.

Материалы и методы

Объекты исследования — водные растворы солей $\text{Zn}(\text{NO}_3)_2$, ZnSO_4 , $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$, CuSO_4 , LiNO_3 , $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3$, NiSO_4 , $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$, $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$, NH_4NO_3 (производство «Баумлюкс», Россия). В качестве растворителя использовалась деионизованная вода (удельное сопротивление 18,2 МОм·см), полученная с помощью системы очистки воды Millipore Simplicity UV.

Было приготовлено 3744 раствора солей в деионизованной воде в различных концентрациях (12 однокомпонентных растворов, 252 двухкомпонентных раствора, содержащих любые два из исследованных ионов, 1080 трехкомпонентных, 1590 четырехкомпонентных, 726 пятикомпонентных и 84 шестикомпонентных раствора). Диапазон изменения концентрации каждой соли в приготовленных растворах варьировался от 0 до 0,9 М, что соответствует в среднем диапазону изменения концентраций исследуемых ионов в технологических водных средах заводов по производству цветных металлов [21]. Использование одновременно и сульфатов, и нитратов одних и тех же катионов позволило исключить однозначное определение концентрации катиона по анализу собственной колебательной полосы одного и того же аниона.

Далее были получены спектры КРС каждого из 3744 приготовленных водных растворов солей. Регистрация спектров КРС проводилась на установке, в которой для возбуждения сигнала КРС использовался непрерывный Nd:YAG-лазер (твердотельный лазер с диодной накачкой, 532 нм, ширина линии 0,1 нм, средняя мощность лазерного излучения 500 мВт, производство «Лазервариоркурс», г. Рязань). Спектры регистрировались с помощью системы, состоящей из монохроматора Acton 2500i (фокусное расстояние 500 мм, решетка 900 штр./мм) и CCD-камеры (1024 × 256 Sincerity, Horiba Jobin Yvon) в двух диапазонах с центрами 560 нм (соответствует диапазону волновых чисел 37–1770 см^{-1}) и 650 нм (2775–4019 см^{-1}). Использование таких окон регистрации спектров позволяет получить сигнал как в области «отпечатков пальцев», так и в области валентных колебаний ОН-групп молекул воды. Для подавления сигнала неупругого рассеяния применялся краевой фильтр Semrock 532 nm EdgeBasic (BLP01-532R-25). Для каждого образца регистрировались последовательно 10 спектров КРС (без усреднения), время измерения одного спектра составляло 3 с.

Результаты и обсуждение

В процессе решения обратной задачи спектроскопии — определения концентрации ионов в многокомпонентных водных растворах по спектрам КРС с помощью ММО — проводился поиск оптимального метода предобработки спектров для достижения с помощью ИНС наибольшей точности решения задачи.

На рис. 1 приведены спектры КРС некоторых исследуемых растворов в диапазоне от 300 до 1800 см^{-1} , в котором находятся характеристические полосы сульфат- (955–1020 см^{-1}) и нитрат-ионов (1020–1100 см^{-1}).

Ионный состав образца 929: $\text{Cu}^{2+} = 0,44 \text{ M}$; $\text{Li}^+ = 0,12 \text{ M}$; $\text{Fe}^{3+} = 0,43 \text{ M}$; $\text{Ni}^{2+} = 0,24 \text{ M}$; $\text{NH}_4^+ = 0,60 \text{ M}$; $\text{SO}_4^{2-} = 0,54 \text{ M}$; $\text{NO}_3^- = 2,30 \text{ M}$;

образца 979: $\text{Cu}^{2+} = 0,44 \text{ M}$; $\text{Li}^+ = 0,23 \text{ M}$; $\text{Fe}^{3+} = 0,22 \text{ M}$; $\text{Ni}^{2+} = 0,24 \text{ M}$; $\text{NH}_4^+ = 0,60 \text{ M}$; $\text{SO}_4^{2-} = 0,54 \text{ M}$; $\text{NO}_3^- = 1,77 \text{ M}$;

образца 2489: $\text{Zn}^{2+} = 0,47 \text{ M}$; $\text{Li}^+ = 0,12 \text{ M}$; $\text{Ni}^{2+} = 0,97 \text{ M}$; $\text{NH}_4^+ = 0,2 \text{ M}$; $\text{SO}_4^{2-} = 1,07 \text{ M}$; $\text{NO}_3^- = 1,05 \text{ M}$,

образца 2509: $\text{Zn}^{2+} = 0,47 \text{ M}$; $\text{Li}^+ = 0,12 \text{ M}$; $\text{Fe}^{3+} = 0,22 \text{ M}$; $\text{Ni}^{2+} = 0,97 \text{ M}$; $\text{NH}_4^+ = 0,20 \text{ M}$; $\text{SO}_4^{2-} = 1,07 \text{ M}$; $\text{NO}_3^- = 1,70 \text{ M}$.

Спектры получены для растворов, в которых концентрации сульфат-ионов одинаковы, а концентрации прочих ионов различаются. Видно, что ин-

тенсивности характеристических полос сульфатов существенно отличаются, несмотря на одинаковую концентрацию анионов SO_4^{2-} в растворах (значения отношений интегральных интенсивностей характеристических полос SO_4^{2-} приведены на рис. 1).

Одна из причин этого эффекта — появление пьедестала при регистрации спектров КРС (рис. 1, *а* и *в*), обусловленного: 1) темновым током CCD-камеры; 2) крылом релеевского рассеяния; 3) фоновыми засветками, которые по какой-то причине не были вычтены программным обеспечением на этапе вычитания фона при записи спектров. Однако даже вычитание пьедестала не приводит к равенству соотношения интенсивностей характеристических полос (рис. 1, *б*, *г*). Поэтому необходимо либо искать способы предобработки спектров, корректирующие эти соотношения, либо надеяться, что ММО в процессе обучения будут учитывать указанные особенности регистрации спектров.

Рассмотрим спектры КРС образцов № 929 и 979. В обоих растворах концентрация иона SO_4^{2-} одинаковая и составляет 0,54 М. Если бы не описанные искажения спектров, отношение интегральных интенсивностей характеристической полосы симметричных валентных колебаний группы SO_4^{2-} с максимумом 980 см^{-1} равнялось бы отношению концентраций сульфат-ионов в этих растворах, т.е. единице. Однако наблюдаемое отношение составляет

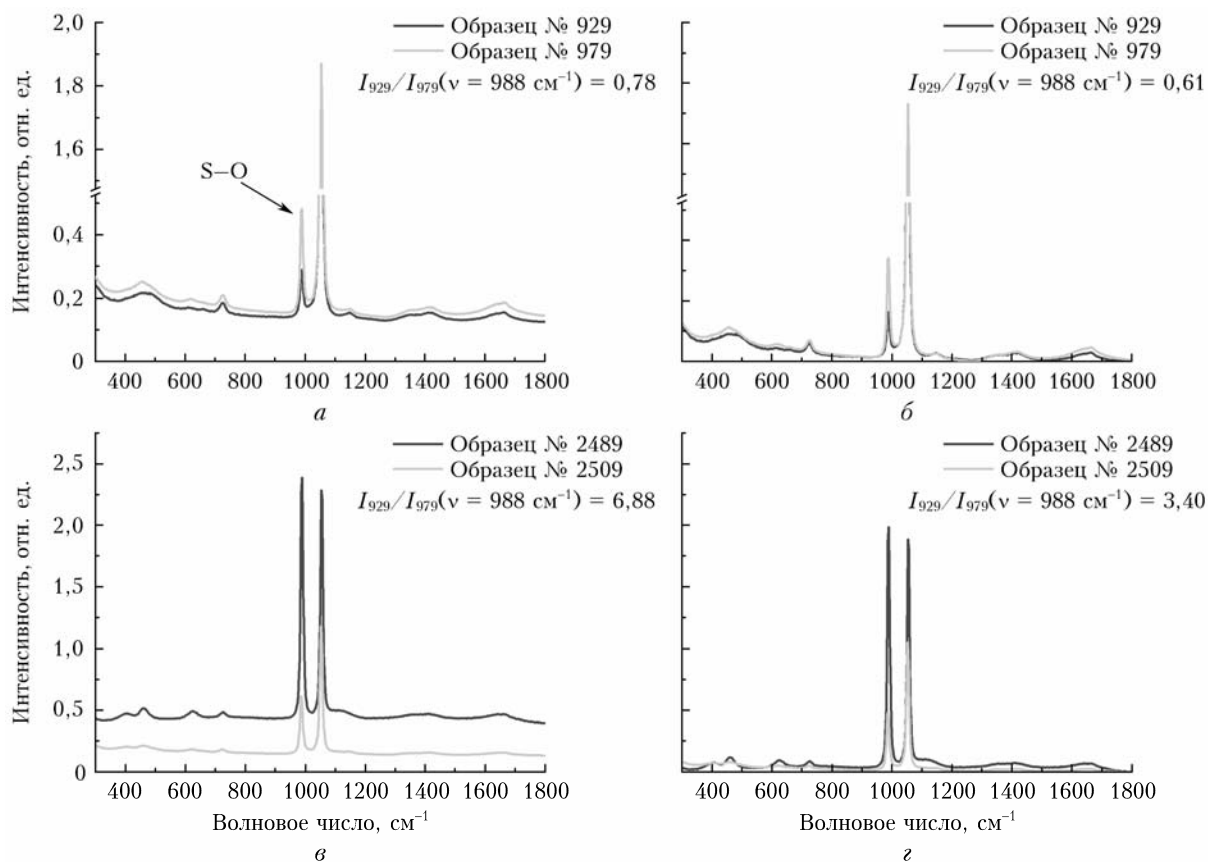


Рис. 1. Спектры КРС водных растворов исследуемых проб до (*а*, *в*) и после (*б*, *г*) вычитания пьедестала

0,78 (рис. 1, *а*). Для корректировки спектров КРС была проведена их предобработка пятью разными способами:

- 1) без обработки (М);
- 2) вычитание пьедестала — вычитание минимального значения сигнала (БП);
- 3) вычитание пьедестала и корректировка на оптическое поглощение растворов (ОП). Каждое значение интенсивности КРС в конкретном спектральном канале было скорректировано на оптическое поглощение по формуле

$$I_{\text{скор}} = 10^{\text{опт. погл.}} \cdot I_{\text{набл.}}$$

Данная процедура оправдана, поскольку некоторые из исследуемых ионов интенсивно поглощают в оптическом диапазоне (например, Fe^{3+} , Cu^{2+} , Ni^{2+});

- 4) вычитание пьедестала и нормировка на площадь валентной полосы воды (ВП). В основе

этой нормировки лежит предположение о том, что, несмотря на изменение концентрации ионов в растворе, количество молекул воды в растворе столь велико, что его можно считать неизменным по сравнению с количеством ионов. Таким образом, площадь валентной полосы становится внутренним репером, позволяющим учесть такие источники зашумленности спектров, как случайное изменение мощности возбуждающего излучения, изменение угла рассеяния света в образце за счет изменения концентрации и т.д. [22];

- 5) вычитание пьедестала и корректировка на поглощение и на площадь валентной полосы воды (ОП_ВП).

На рис. 2 показан вид характеристических полос иона SO_4^{2-} для образцов № 929 и 979, полученных указанными способами предобработки данных.

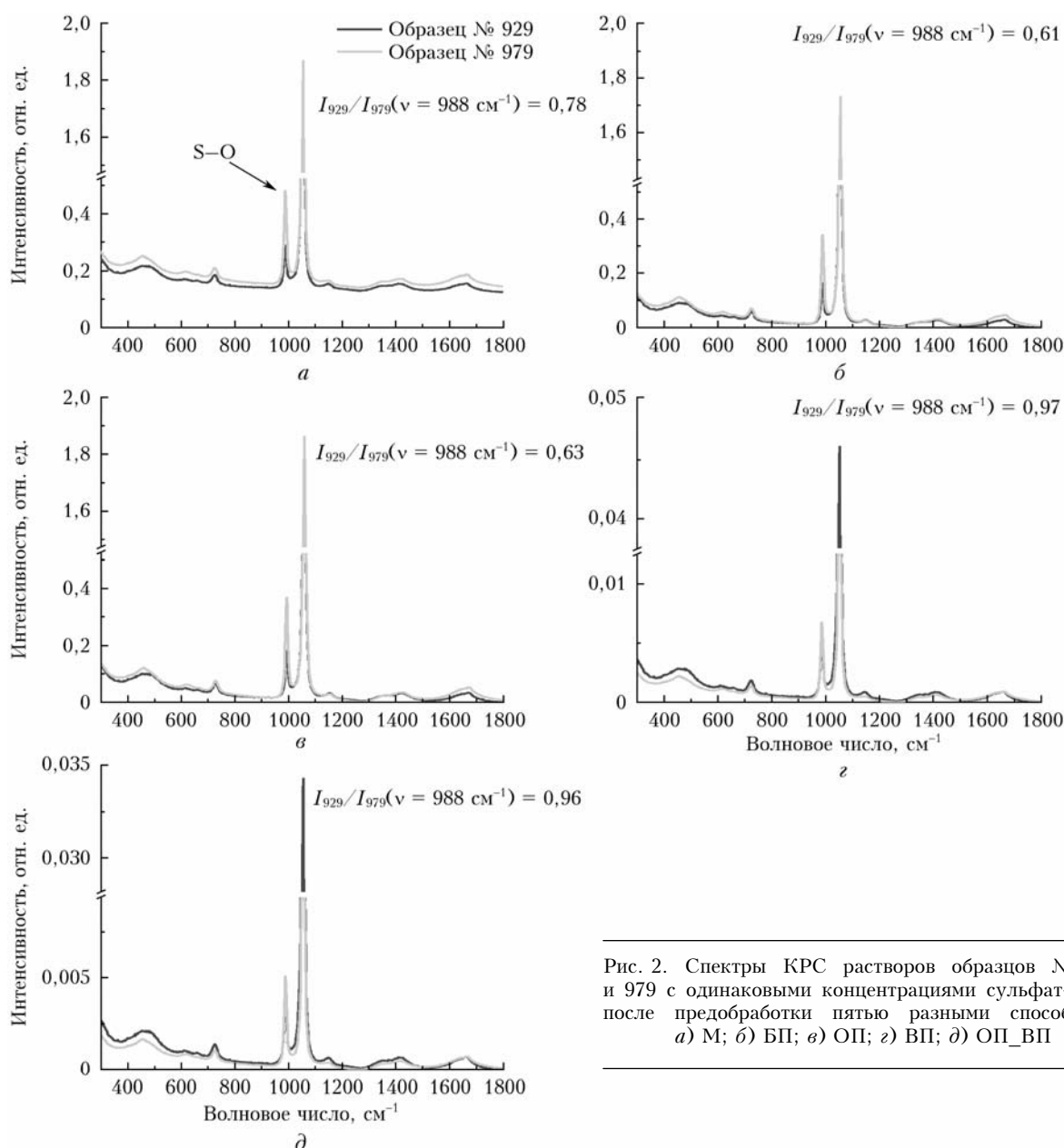


Рис. 2. Спектры КРС растворов образцов № 929 и 979 с одинаковыми концентрациями сульфат-иона после предобработки пятью разными способами: а) М; б) БП; в) ОП; г) ВП; д) ОП_ВП

Сравнительный анализ изменения отношения интегральных интенсивностей характеристических полос сульфат-иона в результате различных способов предобработки спектров (рис. 2) показал, что лучший результат обеспечивает нормировка каждого спектра на площадь его валентной полосы, поскольку в этом случае полученное значение отношения интегральных интенсивностей наиболее близко к истинному (т.е. к единице).

Полученный вывод об оптимальном методе предобработки спектральных данных основывался на традиционном анализе спектроскописта: изучении поведения характеристик формы, положения и интенсивности спектров. Однако при использовании ММО для решения обратных задач спектроскопии вывод может быть совершенно иным: он зависит от того, на основании какого анализа нейросеть принимает свое решение. Можно предположить, что использованная ранее оценка качества применения того или иного способа обработки спектра в виде отношения интенсивностей характеристических полос КРС ионов при нейросетевом подходе будет несостоятельной. Поэтому ИНС применялась для всех пяти типов спектров КРС (предобработанных способами 1–5) растворов солей с целью сравнительного анализа способов предобработки спектрального материала.

Для каждого варианта предобработки все полученные спектры водных растворов солей разбивались случайным образом на три набора: тренировочный, валидационный и тестовый, — в соотношении 70% : 20% : 10% соответственно. Наибольший набор применялся для обучения ИНС — подстройки весовых коэффициентов нейронов в слоях. Валидационный набор использовался для своевременной остановки обучения сети и предотвращения таким образом переобучения модели. Если в течение 500 эпох обучения средняя квадратичная ошибка на валидационном наборе не уменьшалась, то обучение останавливалось и выбиралась сеть с наименьшей ошибкой. С помощью тестового набора оценивалось качество решения обратной задачи на независимых данных, не использованных в ходе обучения нейронной сети. Для дополнительного предотвращения переобучения ИНС и устранения влияния способа разбиения исходного набора данных на решение задачи был применен метод кросс-валидации: исходный массив спектров разбивался случайным образом пять раз.

Для решения задачи по определению концентраций ионов солей использовались многослойные перцептроны (МСП) с двумя скрытыми слоями и 64 и 16 нейронами в них. Все сети имели один выход, соответствующий концентрации одного конкретного иона. Это означает, что каждая сеть была натренирована выделять признаки и закономерности в данных, которые позволяют идентифицировать конкретный тип иона и определять его концентрацию. Результаты решения обратной задачи для различ-

ных способов предобработки спектров представлены на рис. 3.

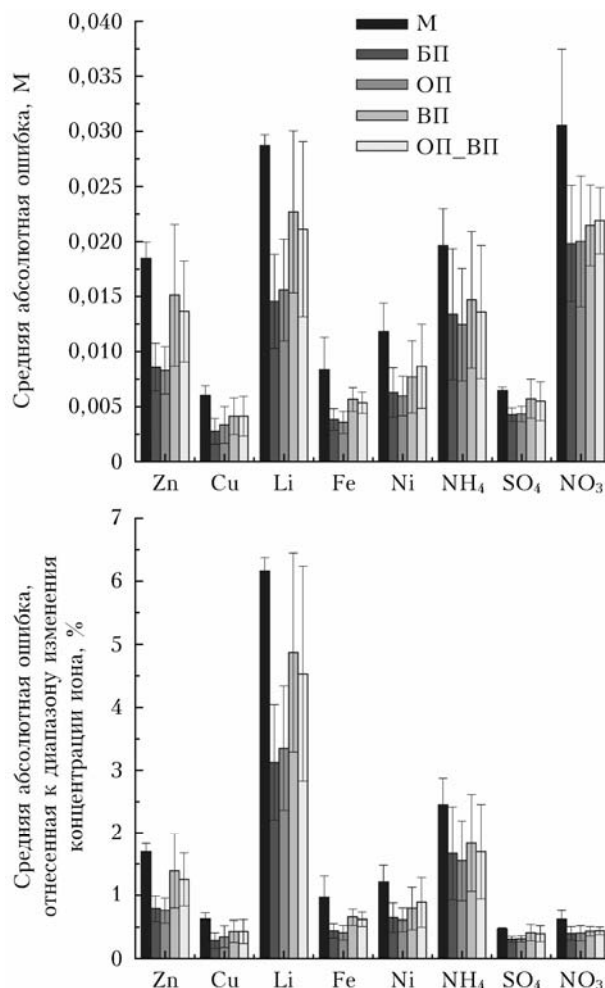


Рис. 3. Результаты применения МСП для определения концентрации ионов в водных растворах по их спектрам КРС с различной предобработкой

Как следует из полученных результатов, для всех ионов при решении обратной задачи по определению их концентрации с помощью КРС-спектроскопии и МСП лучшим способом предобработки является либо БП, либо ОП. ИНС, обученные на спектрах, нормированных на площадь полосы валентных колебаний ОН-групп (ВП и ОП_ВП), показали более низкое качество решения обратной задачи.

Таким образом, результаты поиска оптимальных способов предобработки спектральных данных для достижения более высокой точности определения концентрации ионов в водных растворах с помощью ИНС свидетельствуют о том, что ММО «учитывают в своей работе» не только физические принципы явлений. Лучшие результаты решения поставленной обратной задачи КРС-спектроскопии представлены в таблице.

Полученные погрешности измерения концентрации исследованных ионов в многокомпонентных водных растворах по их спектрам КРС с помощью

Качество решения обратной задачи по определению состава многокомпонентных растворов с помощью спектроскопии КРС

Ион	Средняя абсолютная ошибка, мМ
Zn ²⁺	8,59
Cu ²⁺	2,76
Li ⁺	14,56
Fe ³⁺	3,83
Ni ²⁺	6,30
NH ₄ ⁺	13,37
SO ₄ ²⁻	4,28
NO ₃ ⁻	19,82

ИНС полностью удовлетворяют потребностям диагностики технологических и природных водных сред.

Заключение

Представлены результаты разработки дистанционного метода определения типа и концентрации растворенных ионов в водных средах по их спектрам комбинационного рассеяния света. Исследовались многокомпонентные водные растворы, содержащие соли тяжелых металлов Zn(NO₃)₂, ZnSO₄, Cu(NO₃)₂, CuSO₄, LiNO₃, Fe(NO₃)₃, NiSO₄, Ni(NO₃)₂, (NH₄)₂SO₄, NH₄NO₃ с варьируемой концентрацией от 0 до 0,9 М. Обнаружено существенное влияние способа предобработки спектров комбинационного рассеяния на результат решения обратной спектроскопической задачи. Наилучшим способом предобработки являются либо вычитание пьедестала, либо корректировка на оптическое поглощение. Использование методов машинного обучения (искусственных нейронных сетей) на полученной базе спектроскопических данных позволило идентифицировать и одновременно определить концентрации каждого из восьми ионов в воде (Zn²⁺, Cu²⁺, Li⁺, Fe³⁺, Ni²⁺, NH₄⁺, SO₄²⁻, NO₃⁻) с погрешностями, удовлетворяющими потребностям экологического мониторинга природных и сточных вод, а также диагностики технологических сред.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ (МК-2143.2022.4).

Список литературы

1. Зилов Е.А. Гидробиология и водная экология: учеб. пособие. Иркутск: Иркут. ун-т, 2007. 147 с.
2. Тихомирова В., Смирнова П. Загрязнение поверхностных и сточных вод Российской Федерации тяжелыми металлами // Междунар. науч.-исслед. журн. 2022. Т. 10. С. 1–5.
3. Бактыбаева З.Б., Сулейманов Р.А., Валеев Т.К., Рахматуллин Н.Р. Эколого-гигиеническая оценка загрязнения поверхностных и подземных вод в Зауралье республики Башкортостан // Здоровье населения и среда обитания. 2017. Т. 7, № 292. С. 14–17.
4. Costa M. Review of arsenic toxicity, speciation and polyadenylation of canonical histones // Toxic. Appl. Pharmacology. 2019. V. 375. P. 1–4.
5. Azevedo E., Dias C., Dantas R., Sadok D., Fernandes S., Simoes R., Kamienski C. Profiling core opera-

- tions for elasticity in cloud environments // 2012 IEEE Latin America Conference on Cloud Computing and Communications (LatinCloud), Porto Alegre, Brazil, 2012. P. 43–48.
6. Guo H., Liu H., Wu H., Cui H., Fang J., Zuo Z., Deng J., Li Y., Wang X., Zhao L. Nickel carcinogenesis mechanism: DNA damage // Intern. J. Mol. Sci. 2019. V. 20, N 19. P. 4690.
7. Rehman K., Fatima F., Waheed I., Akash M. Prevalence of exposure of heavy metals and their impact on health consequences // J. Cell. Biochem. 2017. V. 119, N 1. P. 157–184.
8. Cobbina S., Chen Y., Zhou Z., Wu X., Zhao T., Zhang Z., Feng W., Wang W., Li Q., Wu X., Yang L. Toxicity assessment due to sub-chronic exposure to individual and mixtures of four toxic heavy metals // J. Hazard. Mat. 2015. V. 294. P. 109–120.
9. Li Z., Deen M., Kumar S., Selvaganapathy P. Raman spectroscopy for in-line water quality monitoring – instrumentation and potential // Sensors. 2014. V. 14, N 9. P. 17275–17303.
10. Li Z., Wang J., Li D. Applications of Raman spectroscopy in detection of water quality // Appl. Spectrosc. Rev. 2015. V. 51, N 4. P. 333–357.
11. Шаманаев В.С. Гидрооптические сигналы поляризационного самолетного лидара при зондировании однородной толщи морской воды // Оптика атмосф. и океана. 2020. Т. 33, № 7. С. 516–521; Shamanaev V. Hydrooptical signals of an airborne polarization lidar for sensing the homogeneous sea water depth // Atmos. Ocean. Opt. 2020. V. 33. P. 616–621.
12. Климкин А.В., Карапузилов А.А., Коханенко Г.П., Курак А.Н., Осипов К.Ю., Пономарев Ю.Н., Чжан Ш. Использование длинноволнового диапазона для дистанционного зондирования атмосферного аэрозоля // Оптика атмосф. и океана. 2020. Т. 33, № 3. С. 205–208; Klimkin A., Karapuzikov A., Kokhanenko G., Kuryak A., Osipov K., Ponomarev Yu., Zhang S. Use of the long-wave range for remote sensing of atmospheric aerosols // Atmos. Ocean. Opt. 2020. V. 33. P. 383–386.
13. Пацаева С.В., Доленко Т.А., Буриков С.А., Южаков В.И. Дистанционное определение содержания органических растворителей в бинарных смесях методом спектроскопии комбинационного рассеяния // Оптика атмосф. и океана. 2014. Т. 27, № 4. С. 284–290; Pat-saeva S.V., Dolenko T.A., Burikov S.A., Yuzhakov V.I. Remote measurements of concentration of organic solvents in binary mixtures using Raman spectroscopy // Atmos. Ocean. Opt. 2014. V. 27, N 4. P. 291–296.
14. Mosier-Boss P., Lieberman S. Detection of nitrate and sulfate anions by normal raman spectroscopy and SERS of cationic-coated, silver substrates // Appl. Spectrosc. 2000. V. 54, N 8. P. 1126–1135.
15. Burikov S., Dolenko T., Velikotnyi P., Sugonyaev A., Fadeev V. The effect of hydration of ions of inorganic salts on the shape of the Raman stretching band of water // Opt. Spectrosc. 2005. V. 98, N 2. P. 235–239.
16. Ahmed M., Namboodiri V., Singh A., Mondal J., Sarkar S. How ions affect the structure of water: A combined Raman spectroscopy and multivariate curve resolution study // J. Phys. Chem. B. 2013. V. 117, N 51. P. 16479–16485.
17. Лаптинский К., Буриков С., Сарманова О., Вервальд А., Утегенова Л., Пластинин И., Доленко Т. Диагностика вредных примесей в водных средах с помощью спектроскопических методов и алгоритмов машинного обучения // Опт. и спектроскоп. 2023. Т. 131, № 6. С. 810–816.

18. Qi Y., Hu D., Jiang Y., Wu Z., Zheng M., Chen E., Liang Y., Sadi M., Zhang K., Chen Y. Recent progresses in machine learning assisted Raman spectroscopy // *Adv. Opt. Mat.* 2023. V. 11, N 14.
19. Zhang W., Kasun L., Wang Q., Zheng Y., Lin Z. A review of machine learning for near-infrared spectroscopy // *Sensors*. 2022. V. 22, N 24. P. 9764.
20. Dolenko S., Burikov S., Dolenko T., Efitorov A., Gushchin K., Persiantsev I. Neural network approaches to solution of the inverse problem of identification and determination of partial concentrations of salts in multi-component water solutions // *Lec. Notes Comp. Sci.* 2014. V. 8681. P. 805–812.
21. Долина Л. Современная техника и технологии для очистки сточных вод от солей тяжелых металлов. Днепропетровск: Континент, 2008. 227 с.
22. Dolenko T., Burikov S., Vervald E., Efitorov A., Lapinskiy K., Sarmanova O., Dolenko S. Improvement of reliability of molecular DNA computing: Solution of inverse problem of Raman spectroscopy using artificial neural networks // *Laser Phys.* 2017. V. 27, N 2. P. 025203.

K.A. Lapinskiy, S.A. Burikov, A.M. Vervald, A.A. Guskov, I.V. Plastinin, O.E. Sarmanova, L.S. Utegenova, T.A. Dolenko. Estimation of the concentrations of harmful impurities in water using laser Raman spectroscopy and machine learning methods.

In the course of technological development of society, the problem of violation of the ecological state of the environment inevitably arises, in particular in water reservoirs. In order to properly respond to the changes in the concentrations of various pollutants in natural water reservoirs, it is necessary to develop an express remote method. The creation of such a method is possible on the basis of Raman spectroscopy. However, during its development, a large number of various difficulties arise, in particular regarding the method of preprocessing the obtained data. The paper presents the results of using machine learning methods to develop a remote method for determining the type and concentration of dissolved ions in aqueous media from Raman spectra. The use of artificial neural networks made it possible to identify and simultaneously determine the concentration of each of the eight ions (Zn^{2+} , Cu^{2+} , Li^{+} , Fe^{3+} , Ni^{2+} , NH_4^{+} , SO_4^{2-} , and NO_3^{-}) in a multicomponent aqueous mixture with errors, which meet the needs of environmental monitoring of natural and waste waters. A significant influence of the method of preprocessing Raman spectra on the result of solving the inverse spectroscopic problem is discovered. The results can be used for solution of the multiparameter inverse problem of qualitative and quantitative determination of ions in water.