Письма в ЖЭТФ, том 124, вып. 7, с. 523 – 529 © 2026 г. 10 октября

Нейросетевое определение температуры воды по спектрам комбинационного рассеяния

А. Павлов[+1)], *Д. Деримедведь*[+*×], *Н. Минаев*[+], *Е. Мареев*[+]

[+]*Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", 119333 Москва, Россия*

[*]*Московский государственный технический университет имени Н. Э. Баумана, 105005 Москва, Россия*

[×]*Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ", 115409 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 5 августа 2026 г.
После переработки 27 августа 2026 г.
Принята к публикации 1 сентября 2026 г.

Разработан подход для бесконтактной термометрии воды на основе спектроскопии комбинационного рассеяния и машинного обучения. Нейронная сеть, состоящая из одного сверточного слоя и пяти остаточных блоков (ResNet), восстанавливает температуру по O–H полосе комбинационного рассеяния (3000–3800 $см^{-1}$) в диапазоне 30–95 °C. Средняя абсолютная ошибка (MAE) составляет 0.4 °C, что почти на порядок лучше классического метода на основе двухцветной аппроксимации (MAE = 3.9 °C). Классический подход демонстрирует выраженный гистерезис при многократных циклах нагрев/охлаждение, связанный с запаздыванием восстановления физико-химических свойств воды при быстром нагреве/охлаждении в то время как нейросетевой метод остается независимым от стадии цикла. Достигнутая точность близка к предельной точности используемой термопары (±0.2 °C), что указывает на потенциал метода при использовании более точных эталонов.

DOI: 10.7868/S3034576626100039

1. Введение. Бесконтактная термометрия воды является важным инструментом для широкого круга задач, от мониторинга климатических изменений в океане и экологического контроля до промышленных процессов и биомедицинских исследований [1], включая диагностику биотканей, где термические параметры служат индикаторами воспалений или лазерной терапии. Одним из перспективных бесконтактных методов определения температуры воды является спектроскопия комбинационного рассеяния [2, 3], которая, в том числе, может быть использована для диагностики солености и других свойств воды [4, 5]. Полоса O–H валентных колебаний вблизи 3500 $см^{-1}$ имеет сложную форму с двумя ярко выраженными пиками, которая возникает из-за перестройки водородных связей и изменения распределения водяных кластеров [6]. Особый интерес представляет вклад компоненты, соответствующей льдоподобной структуре воды в области 3200 $см^{-1}$, которая может служить индикатором структурных изменений, в том числе при формировании скин-слоя в воде [7]. Традиционные методы анализа [2, 8] обычно достигают температурного разрешения от ±0.2 °C до ±1 °C в идеальных лабораторных условиях. В первых работах по термометрии воды методом комбинационной спектроскопии, в частности, в работе [3] и работе [9], была достигнута точность около 0.5 °C в лабораторных условиях и 2 °C – в полевых. Однако эти методы основывались на калибровке по одному циклу и не учитывали возможный гистерезис при многократных нагревах и охлаждениях. В то же время известно, что свойства воды могут демонстрировать гистерезисное поведение при циклическом изменении температуры. Так, в работе [10] методом ультразвуковой спектроскопии было показано существование гистерезиса скорости ультразвука в дистиллированной и обработанной воде, метаноле, этаноле и глицерине при нескольких температурных циклах в диапазоне 5–50 °C. Авторы связали наблюдаемый гистерезис с изменением плотности и сжимаемости сред, а также с образованием и растворением газовых пузырьков [10]. С другой стороны, в работе [11] с помощью метода ядерного магнитного резонанса (ЯМР-релаксометрии) был обнаружен структурный гистерезис, проявляющийся в изменении скорости растворения органических веществ, который был обусловлен задержкой восстановления водородных связей при изменении температуры. Авторы показали, что гистерезис более выражен в системах с большим числом водородных

[1)]e-mail: mareev.evgeniy@physics.msu.ru

связей [11]. Кроме того, аналогичные эффекты наблюдались для воды и водных растворов электролитов методом оптической кавитации [12], где гистерезис вероятности кавитации связывался с изменением концентрации газонаполненных субмикропузырьков вблизи гидрофобных и гидрофильных поверхностей. Таким образом, гистерезисные явления в воде и водных системах являются многообразными и могут иметь различную физическую природу. В практических сценариях, включающих многократные тепловые циклы нагрева/остывания, наличие кавитационных пузырьков, растворенных газов или незначительных загрязнений, спектр комбинационного рассеяния может изменяться таким образом, что эти эффекты не могут быть описаны простыми параметрическими моделями, что приводит к значительному гистерезису и снижению точности. Машинное обучение хорошо подходит для поиска скрытых нелинейных зависимостей и анализа больших наборов данных, что делает его эффективным инструментом в спектроскопии [13], а также для восстановления спектров воды и ее поляризуемости [14, 15]. Альтернативные подходы к повышению эффективности регистрации включают использование бесселевых лазерных пучков для усиления сигнала вынужденного комбинационного рассеяния в воде [16]. Ранее уже предпринимались попытки адаптировать нейронные сети для определения температуры и солености воды с помощью комбинационного рассеяния, однако данные подходы использовали сравнительно небольшой набор данных и проводились в рамках одного цикла нагрева, а точность составляла около 1 °C [5, 17]. В настоящей работе мы впервые систематически исследуем гистерезис температуры воды, определяемой по спектрам комбинационного рассеяния, при многократных циклах нагрева и охлаждения. Мы представляем метод на основе нейронной сети, который восстанавливает температуру воды непосредственно по ее спектру комбинационного рассеяния. При обучении нейронной сети на данных, охватывающих множество циклов нагрева и охлаждения, она становится инвариантной к зависящим от цикла артефактам, которые препятствуют классической калибровке. Мы достигаем средней абсолютной ошибки (MAE) 0.4 °C в диапазоне 30–95 °C, что на порядок лучше классического подхода, основанного на измерении отношения между пиками в тех же экспериментальных условиях. Примечательно, что нейросетевой подход не демонстрирует гистерезиса, что делает его пригодным для применений, где среда подвергается многократному и сложному температурному воздействию.

2. Экспериментальная установка. Для восстановления температуры воды по спектрам комбинационного рассеяния была использована схема со сбором сигнала в обратном направлении. Схема экспериментальной установки показана на рис. 1. В качестве источника возбуждения использовался наносекундный импульсный лазер (Tech-527, "ЛАЗЕР-КОМПАКТ", Россия) с длиной волны 527 нм, длительностью импульса 4 нс, частотой следования 1 кГц и энергией в импульсе до 50 мкДж, что потенциально может быть использовано для достижения временного разрешения при использовании двух синхронизованных лазеров [18]. Ранее похожие подходы применялись для реконструкции нелинейного профиля давления ультразвукового пучка в воде [19]. Лазерный пучок фокусировался с помощью объектива с числовой апертурой 0.32 через окошки из лейкосапфира в кювету, выполненную из нержавеющей стали, на которой был установлен нагреватель в медном корпусе. Кювета заполнялась дистиллированной водой. Сигнал комбинационного рассеяния собирался в обратном направлении, при этом для подавления рассеянного лазерного излучения использовалось дихроичное зеркало. Пиковая интенсивность в перетяжке не превышала 10^9 Вт/см^2, отсутствие оптического пробоя контролировалось визуально и с помощью спектрометра.

Спектры комбинационного рассеяния регистрировались спектрометром OceanInsight Flame, работающим в диапазоне 3000–3800 см$^{-1}$ со спектральным разрешением ~ 0.8 см$^{-1}$. Время накопления одного спектра составляло 0.25 с, что совпадало с частотой сбора данных с калиброванной термопары K-типа (ООО "Тесей", г. Калуга), установленной непосредственно в кювету; данные с термопары регистрировались с помощью модуля на микросхеме MAX6675 (Maxim Integrated Products) с точностью ± 0.25 °C. Кювета подвергалась пяти последовательным циклам нагрева и охлаждения в интервале от 30 до 95 °C. Нагрев проводился со скоростью примерно 0.5 °C/мин с помощью встроенных нагревателей; охлаждение осуществлялось естественным путем при отключенном нагревателе. Температура и спектры комбинационного рассеяния регистрировались одновременно с частотой 4 Гц, что позволило получить набор данных из ~ 60000 пар "спектр–температура". Для количественной оценки эффективности различных методов определения температуры воды по спектрам комбинационного рассеяния мы сравнили классический подход, предложенный Oh и др. [2] (двухцветный метод), с разработанной

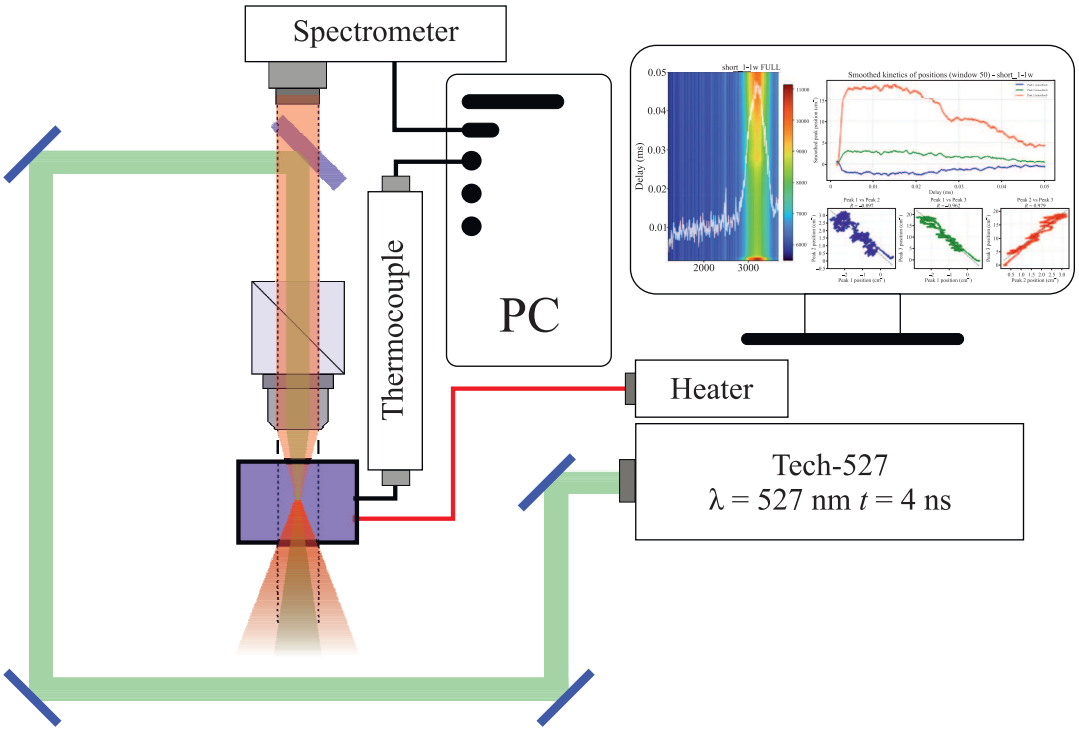

Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема экспериментальной установки

нами нейросетевой архитектурой (Conv1D + 5 блоков ResNet). Оба метода тестировались на одном и том же наборе данных, включающем 60 000 спектров, полученных в процессе пяти циклов нагрев–охлаждение в диапазоне 30–95 °C.

Используемая нейросеть состояла из начального одномерного сверточного слоя (Conv1D) и пяти остаточных блоков (ResNet). Сверточный слой содержит 64 фильтра с размером ядра 3, извлекая локальные спектральные признаки из нормализованной интенсивности сигнала комбинационного рассеяния (3000–3800 $см^{-1}$, 1024 спектральных канала). Каждый остаточный блок последовательно удваивает количество каналов (64 → 128 → 256 → 512 → 1024), затем следует глобальное среднее пулирование и объединение в полносвязный выходной слой. Модель обучалась с использованием оптимизатора AdamW (скорость обучения 0.001, затухание весов 0.01) с функцией потерь среднеквадратичной ошибки (MSE), размером пакета 16 и ранней остановкой (patience 100 эпох) по MSE на валидации. Обучение проводилось на графическом процессоре NVIDIA GeForce RTX 3090. Полученный набор данных был случайным образом разделен на обучающую (Train) – 70 %, валидационную (Validation) – 15 % и тестовую (Test) – 15 % выборки; все метрики для нейронной сети рассчитывались по тестовому датасету, который не использовался в процессе обучения.

Для сравнения мы реализовали классический метод, основанный на аппроксимации спектра комбинационного рассеяния двумя пиками (двухцветный метод), как это описано у Oh и др. [2], используя отношение амплитуд и ширин пиков от 3000 до 3350 $см^{-1}$ и от 3350 до 3800 $см^{-1}$:

$$R = \frac{H_1}{H_2} \cdot \frac{W_1}{W_2}, \tag{1}$$

где H – амплитуды пиков, а W – ширины. Аппроксимация осуществлялась двумя Гауссовыми пиками. На рисунке 2 представлены примеры аппроксимации спектров воды двухцветным методом для двух температур: 30 и 80 °C. Далее полученные пары данных $R(T)$ аппроксимировались полиномом второго порядка по всем циклам нагрева/охлаждения.

3. Результаты и обсуждение. В рамках создания датасета для определения температуры мы провели 5 циклов нагрев–остывания, параллельно измеряя температуру и спектр комбинационного рассеяния. Изменение формы полосы O–H валентных колебаний (3000–3800 $см^{-1}$) при увеличении температуры выражается в перераспределении интенсивности между низкочастотной (3000–3350 $см^{-1}$) и высокочастотной (3350–3800 $см^{-1}$) областями, как это

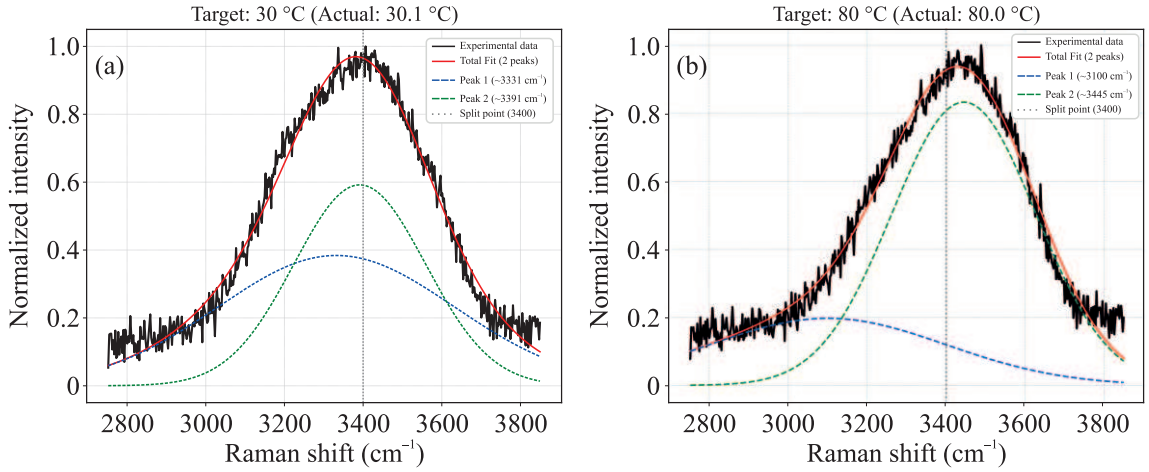

Рис. 2. (Цветной онлайн) Результат аппроксимации спектров комбинационного рассеяния воды двухцветным методом для двух температур: 30 °C (a) и 80 °C (b)

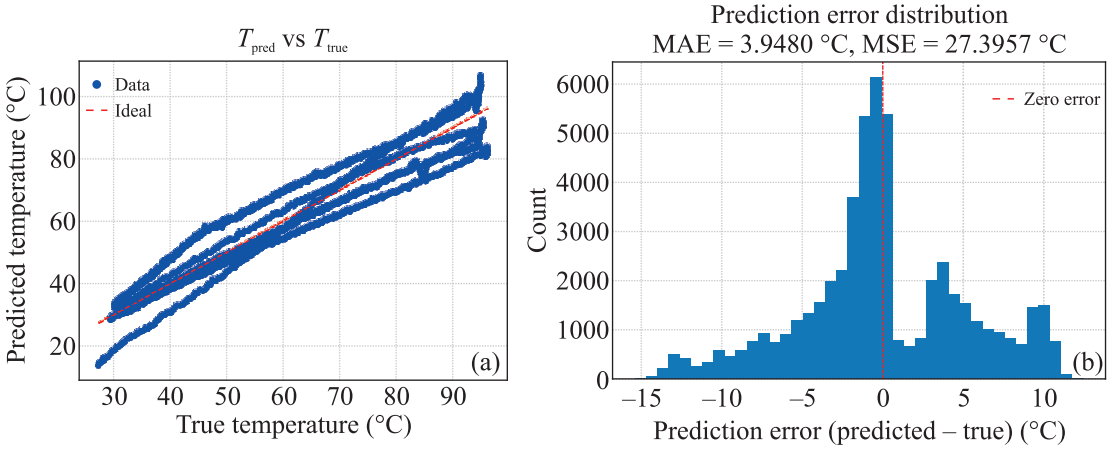

Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость $T_{\text{pred}}(T_{\text{true}})$ (a) и гистограмма распределения ошибок для "классического" подхода (b) [2]

представлено на рис. 2. Отношение площадей этих двух пиков использовалось в качестве температурного маркера в рамках двухцветной методики, а калибровочная кривая строилась по всем циклам нагрев/остывание, см. рис. 3.

В рамках классического метода стандартное отклонение составляет 5.2 °C, средняя абсолютная ошибка (MAE) 3.95 °C, а среднеквадратичная ошибка (MSE) 27.4 °C^2. На рисунке 3 представлены график зависимости предсказанной температуры от истинной $T_{\text{pred}}(T_{\text{true}})$ и соответствующая гистограмма ошибок для классического метода. В данных зависимостях отчетливо наблюдается гистерезис: восстановленные значения температуры, полученные на разных циклах (особенно на повторных нагревах и охлаждениях), систематически расходятся. Например, при истинной температуре 80 °C (измеренной термопарой) двухцветный метод может предсказывать как 75 °C (на циклах охлаждения), так и 85 °C (на некоторых повторных нагревах). Этот гистерезис, как уже было отмечено во введении, вероятно, связан со структурой водородных связей. При относительно быстром нагреве и остывании структура водородных связей не успевает полностью перестроиться, в результате в большинстве физико-химических свойств воды может наблюдаться гистерезис [10, 11, 20, 21]. Классическая калибровка, выполненная только по первому циклу, не способна учесть такие артефакты: например, если провести калибровку по одному циклу охлаждения, то MAE упадет до 0.25 °C (см. рис. 4), что немного лучше точности, продемонстрированной авторами исходной методики.

В отличие от классического подхода, разработанная нейронная сеть обучалась сразу на всех пяти циклах нагрева и охлаждения, что позволило ей вы-

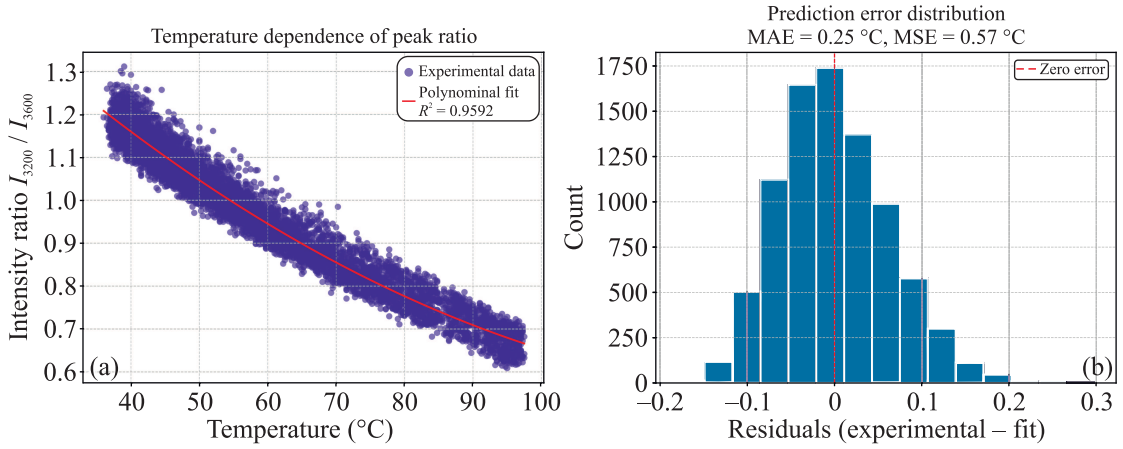

Рис. 4. (Цветной онлайн) Аппроксимация отношения ширин линий по одному циклу охлаждения (a) и гистограмма распределения ошибок для одного цикла охлаждения в рамках "классического" подхода (b) [2]

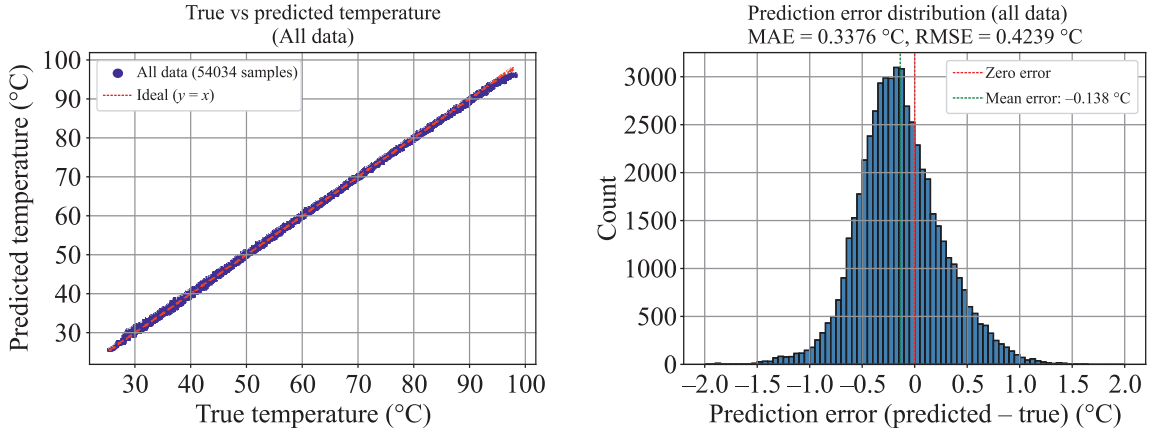

Рис. 5. (Цветной онлайн) Зависимость $T_{\text{pred}}(T_{\text{true}})$ (a) и гистограмма распределения ошибок для нейросетевого подхода (b)

учить инвариантное представление спектра, не зависящее от циклических артефактов. На рисунке 5 приведены аналогичные рис. 3 графики для нейросетевого подхода. Ключевое отличие заключается в отсутствии гистерезиса; гистограмма ошибок имеет Гауссову форму, свидетельствуя о случайном, несистематическом характере остаточных ошибок. Метрики на тестовой выборке демонстрируют высокую точность: средняя ошибка близка к нулю, стандартное отклонение составляет 0.69 °C, а средняя абсолютная ошибка (MAE) достигает 0.38 °C при среднеквадратичной ошибке (MSE) 0.48 °C^2.

Таким образом, нейросетевой подход превосходит классический метод более чем на порядок по точности и полностью устраняет гистерезис, связанный с многократными тепловыми циклами. Учитывая, что точность определения температуры с помощью термопары меньше, чем 0.25 °C, реальная точность работы нейросети с более точными приборами может быть еще выше.

4. Заключение. Продемонстрирован метод бесконтактной термометрии воды на основе спектроскопии комбинационного рассеяния и нейросетевого подхода. В отличие от ранних работ, где высокая точность (порядка 0.5 °C) достигалась лишь в статических условиях и при однократной калибровке, в настоящей работе впервые систематически исследован гистерезис при многократных циклах нагрева-охлаждения и предложен метод, устойчивый к этим артефактам. Использование архитектуры с одним сверточным слоем и пятью остаточными блоками (Conv1D + ResNet) позволило достичь средней абсолютной ошибки (MAE) 0.38 °C в диапазоне температур 30–95 °C при измерении на тестовой выборке, не участвовавшей в обучении. Это более чем на порядок превосходит точность классического двухцветного метода (MAE = 3.95 °C) в лабораторных экспериментальных условиях. Ключевым преимуществом нейросетевого подхода является его устойчивость к многократным циклам нагрев–

охлаждение. В то время как классический метод демонстрирует выраженный гистерезис, обусловленный не мгновенным существованием отдельных кавитационных пузырьков (время жизни которых порядка 0.1 с), а медленными процессами изменения физико-химических свойств и газового состава воды и адсорбционно-десорбционными явлениями на стенках кюветы, что согласуется с работами по гистерезису в водных системах [10–12], нейронная сеть, обученная на всех пяти циклах, полностью исключает эту проблему. Гистограмма ошибок нейросетевого метода имеет гауссову форму, что указывает на случайный, несистематический характер остаточных отклонений. Важно отметить, что достигнутая точность (0.38 °C) близка к предельной точности использованной термопары (±0.25 °C). Это позволяет предположить, что применение более прецизионных эталонных датчиков температуры может повысить точность предложенного подхода.

Разработанный подход создает основу для создания термометров воды на основе спектроскопии комбинационного рассеяния или других сред, которые могут найти применение в мониторинге температуры океанических вод, контроле охлаждающих жидкостей на промышленных объектах (включая атомные электростанции), диагностике протекания химических и каталитических реакций, а также в биомедицинских исследованиях, где требуется бесконтактное измерение температуры биотканей, содержащих воду. Помимо водных систем, спектроскопия комбинационного рассеяния успешно применяется для количественного анализа сложных органических сред, например, растительных масел и биологически активных добавок [22].

Финансирование работы. Работа в части разработки нейронных сетей выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда # 23-73-00039. Двухцветная методика восстановления температуры выполнена при поддержке государственного задания Курчатовского комплекса кристаллографии и фотоники Национального исследовательского центра "Курчатовский институт".

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. Я. Кинг, В. Муравьев, "Исследования состава атмосферы с помощью безопасного для глаз лидара", Фотоника **13**, 642 (2019) [W. King and V. Muravyev, "Eye-safe Atmospheric Lidar Measurements", Photonics Russia **13**, 642 (2019)].
2. M.-K. Oh, H. Kang, N. E. Yu, B. H. Kim, J. Kim, J. Lee, and G. W. Hyung, "Ultimate sensing resolution of water temperature by remote Raman spectroscopy", Appl. Opt. **54**, 2639 (2015).
3. D. A. Leonard, B. Caputo, and F. E. Hoge, "Remote sensing of subsurface water temperature by Raman scattering", Appl. Opt. **18**, 1732 (1979).
4. С. М. Першин, А. П. Брысев, М. Я. Гришин, В. Н. Леднев, А. Ф. Бункин, Р. В. Клопотов, "Диагностика локального временного профиля ультразвукового пучка в воде с помощью спектроскопии комбинационного рассеяния", Письма в ЖЭТФ **112**, 464 (2020) [S. M. Pershin, A. P. Brysev, M. Ya. Grishin, V. N. Lednev, A. F. Bunkin, and R. V. Klopotov, "Raman Spectroscopy Diagnostics of the Local Time Profile of an Ultrasound Beam in Water", JETP Lett. **112**, 464 (2020)].
5. T. A. Dolenko, I. V. Churina, V. V. Fadeev, and S. M. Glushkov, "Valence band of liquid water Raman scattering: some peculiarities and applications in the diagnostics of water media", J. Raman Spectrosc. **31**, 863 (2000).
6. Q. Sun, "The Raman OH stretching bands of liquid water", Vib. Spectrosc. **51**, 213 (2009).
7. С. М. Першин, Е. В. Степанов, Д. Г. Артемова, М. Я. Гришин, П. С. Смерчанский, Г. А. Болдин, "Спонтанное образование скин-слоя в воде с деформацией OH-полосы КР вкладом компоненты льда 3200 $см^{-1}$", Письма в ЖЭТФ **123**, 383 (2026) [S. M. Pershin, E. V. Stepanov, D. G. Artemova et al., "Spontaneous Formation of a Skin Layer in Water with the Deformation of the Raman OH Band Due to the Contribution of the 3200 cm^{-1} Ice Component", JETP Lett. **123**, 375 (2026)].
8. M. Becucci, S. Cavalieri, R. Eramo, and L. Fini, "Accuracy of remote sensing of water temperature by Raman spectroscopy", Appl. Opt. **38**, 928 (1999).
9. C. H. Chang and L. A. Young, *Seawater temperature measurement from Raman spectra*, Research Note 920, # 62269-72-0204, ARPA Order 1911, Advanced Research Projects Agency, Washington, D.C. (1972).
10. A. B. Koc and M. Vatandas, "Ultrasonic velocity measurements on some liquids under thermal cycle: Ultrasonic velocity hysteresis", Food Res. Int. **39**, 1076 (2006).
11. P. Conte and J. Kucerik, "Water dynamics and its role in structural hysteresis of dissolved organic matter", Environ. Sci. Technol. **50**, 2210 (2016).
12. N. F. Bunkin, O. A. Kiseleva, A. V. Lobeyev, T. G. Movchan, B. W. Ninham, and O. I. Vinogradova, "Effect of salts and dissolved gas on optical cavitation near hydrophobic and hydrophilic surfaces", Langmuir **13**, 3024 (1997).
13. G. Genty, L. Salmela, J. M. Dudley, D. Brunner, A. Kokhanovskiy, S. Kobtsev, and S. K. Turitsyn, "Machine learning and applications in ultrafast photonics", Nat. Photonics **15**, 91 (2021).

14. G. M. Sommers, M. F. C. Andrade, L. Zhang, H. Wang, and R. Car, "Raman Spectrum and Polarizability of Liquid Water from Deep Neural Networks", Phys. Chem. Chem. Phys. **22**, 10592 (2020).
15. J. Li, M. Qamar, J. W. Petrich, J. L. Anderson, and E. A. Smith, "Fast and non-destructive determination of water content in ionic liquids at varying temperatures by Raman spectroscopy and multivariate regression analysis", Anal. Chim. Acta **1188**, 339164 (2021).
16. И. А. Ходасевич, А. И. Водчиц, С. М. Першин, В. А. Орлович, М. Я. Гришин, "Кратное повышение эффективности пикосекундного ВКР в воде при возбуждении бесселевыми лазерными пучками", Письма в ЖЭТФ **119**, 94 (2024) [I. A. Khodasevich, A. I. Vodchits, S. M. Pershin, V. A. Orlovich, and M. Ya. Grishin, "Multiple Increase in the Efficiency of Picosecond Stimulated Raman Scattering Excited by Bessel Laser Beams in Water", JETP Lett. **119**, 89 (2024)].
17. S. A. Burikov, I. V. Churina, and S. A. Dolenko, "New approaches to determination of temperature and salinity of water by Raman spectroscopy", EARSel eProceedings **3**, 298 (2004).
18. N. Marchenkov, E. Mareev, F. Potemkin, A. Kulikov, F. Pilyak, E. Ibragimov, and G. Scholar, "Hybrid Approach for Multiscale and Multimodal Time-Resolved Diagnosis of Ultrafast Processes in Materials via Tailored Synchronization of Laser and X-ray Sources at MHz Repetition Rates", Optics **5**, 1 (2023).
19. С. М. Першин, А. П. Брысев, М. Я. Гришин, В. Н. Леднев, А. Ф. Бункин, Р. В. Клопотов, "Реконструкция нелинейного профиля давления ультразвукового пучка в воде по сигналам лидара комбинационного рассеяния", Известия РАН. Серия физическая **85**, 863 (2021) [S. M. Pershin, A. Brysev, M. Y. Grishin, V. N. Lednev, A. F. Bunkin, and R. V. Klopotov, "Reconstructing the Nonlinear Pressure Profile of an Ultrasonic Beam in Water Using Raman Lidar Signals", Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. **85**, 863 (2021)].
20. И. М. Агеев, Ю. М. Рыбин, Г. Г. Шишкин, "Медленные вариации электропроводности дистиллированной воды", ВМУ. Серия 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ **6**, 33 (2016) [I. M. Ageev, Y. M. Rybin, and G. G. Shishkin, "Slow variations of the electroconductivity of distilled water", Moscow Univ. Phys. Bull. **71**, 556 (2016)].
21. О. Н. Нозимов, Н. С. Султонов, Д. Н. Назаров, А. И. Хукматов, "Температурная зависимость электропроводности бидистиллированной и питьевой вод", Вестник Таджикского национального университета. Серия естественных наук **1**, 127 (2017) [O. N. Nozimov, N. S. Sultonov, D. N. Nazarov, and A. I. Khukmatov, "Temperaturnaya zavisimost' elektroprovodnosti bidistillirovannoy i pit'yevoy vod", Vestnik Tadzhikskogo Natsional'nogo Universiteta. Seriya Estestvennykh Nauk **1**, 127 (2017)].
22. С. М. Кузнецов, В. С. Новиков, Д. Д. Васимов, П. К. Лаптинская, В. В. Кузьмин, М. Н. Московский, Е. А. Сагитова, "Спектроскопия комбинационного рассеяния света растительных масел и БАД омега-3: количественный анализ", Фотоника **18**, 650 (2024) [S. M. Kuznetsov, V. S. Novikov, D. D. Vasimov, P. K. Laptinskaya, V. V. Kuzmin, M. N. Moskovskiy, and E. A. Sagitova, "Raman Spectroscopy of Vegetable Oils and Omega-3 Fish Oil Supplements: Quantitative Analysis", Photonics Russia **18**, 650 (2024)].