ISSN 1561-8323 (Print)
ISSN 2524-2431 (Online)

ФИЗИКА

PHYSICS

УДК 535
https://doi.org/10.29235/1561-8323-2026-70-5-364-369

Поступило в редакцию 23.09.2026
Received 23.09.2026

Т. А. Ефимова, академик С. В. Гапоненко

Институт физики имени Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси,
Минск, Республика Беларусь
пр. Независимости, 68-2, 220072, Минск, Республика Беларусь

ОПТИМИЗАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ ОПТИЧЕСКОГО НАНОТРАНСИВЕРА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Аннотация. Предложен подход к исследованию и оптимизации параметров оптического нанотрансивера на основе модели «металлическая наночастица – квантовый излучатель» с использованием методов машинного обучения. Для ускорения многомерного поиска построена суррогатная модель на основе градиентного бустинга (Gradient Boosting Machine, GBM), для чего было сгенерировано 60 000 точек методом латинского гиперкуба (Latin Hypercube Sampling, LHS) в шестимерном пространстве параметров: длина волны возбуждения и испускания, радиус наночастицы, расстояние частица–излучатель, показатель преломления среды и собственный квантовый выход излучателя. Достигнут коэффициент детерминации R^2 = 0,947 на тестовой выборке. Проведена глобальная оптимизация по предсказаниям модели с последующим уточнением прямым расчетом и показано, что суррогатная модель эффективна для многопараметрического анализа и сужения области поиска параметров, необходимых для оптимизации эксперимента.

Ключевые слова: нанотрансивер, плазмонное усиление, градиентный бустинг, машинное обучение

Для цитирования. Ефимова, Т. А. Оптимизация параметров оптического нанотрансивера с использованием машинного обучения / Т. А. Ефимова, С. В. Гапоненко // Доклады Национальной академии наук Беларуси. – 2026. – Т. 70, № 5. – С. – 364–369. https://doi.org/10.29235/1561-8323-2026-70-5-364-369

Taisia A. Efimova, Academician Sergey V. Gaponenko

B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Republic of Belarus
68-2, Nezavisimosti Ave., 220072, Minsk, Republic of Belarus

OPTIMIZATION OF OPTICAL NANOTRANSCEIVER PARAMETERS USING MACHINE LEARNING

Abstract. The paper proposes an approach to the study and optimization of optical nanotransceiver parameters based on the “metal nanoparticle – quantum emitter” model using machine learning methods. To speed up multidimensional search, a surrogate model based on Gradient Boosting Machine (GBM) was built, for which 60,000 points were generated using the Latin Hypercube Sampling (LHS) method in a six-dimensional parameter space: excitation and emission wavelengths, nanoparticle radius, particle–emitter distance, refractive index of the medium, and intrinsic quantum yield of the emitter. The coefficient of determination R^2 = 0.947 was reached in the test sample. Global optimization based on model predictions was performed, followed by refinement by direct calculation, and it was shown that the surrogate model is effective for multiparametric analysis and narrowing the search area for parameters necessary for optimizing the experiment.

Keywords: nanotransceiver, plasmon enhancement, gradient boosting, machine learning

For citation. Efimova T. A., Gaponenko S. V. Optimization of optical nanotransceiver parameters using machine learning. *Doklady Natsional’noi akademii nauk Belarusi = Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus*, 2026, vol. 70, no. 5, pp. 364–369 (in Russian). https://doi.org/10.29235/1561-8323-2026-70-5-364-369

© Ефимова Т. А., Гапоненко С. В., 2026

Введение. Эффективное проектирование плазмонных наноструктур для усиления люминесценции требует многократного решения прямой электромагнитной задачи при варьировании нескольких геометрических и оптических параметров. Ключевым этапом при проектировании таких систем является оптимизация их геометрических и оптических параметров, которая традиционно опирается на длительные аналитические расчеты или численные методы, такие как метод конечных разностей во временной области (FDTD) и метод конечных элементов (FEM) [1–3]. При этом лишь небольшая часть полученных результатов (оптимальные конфигурации) находит практическое применение, тогда как подавляющее большинство промежуточных расчетов оказываются невостребованными, что приводит к значительным вычислительным затратам.

Методы машинного обучения, в частности градиентный бустинг и искусственные нейронные сети, предоставляют мощный и эффективный инструмент для построения точной корреляции между параметрами плазмонной системы (размер наночастицы, расстояние до излучателя, длина волн возбуждения и испускания, показатель преломления среды и собственный квантовый выход излучателя) и итоговым фактором усиления люминесценции [4]. Однако такие модели имеют ограничения, связанные с экстраполяцией на области с резкими резонансами, что обсуждается в недавних обзорах по применению глубокого обучения в фотонике [5; 6]. В настоящей работе исследована возможность применения метода градиентного бустинга для оптимизации и многопараметрического анализа системы «металлическая наночастица – квантовый излучатель» с плазмонным усилением фотолюминесценции – так называемого нанотрансивера. Установлено, что после однократного обучения на ограниченном наборе данных, полученных из точных расчетов, модель способна предсказывать усиление для миллионов новых комбинаций параметров без проведения дополнительных ресурсоемких вычислений. Это позволяет сократить время поиска оптимума с недель до минут, а также исследовать пространство параметров с высокой детализацией, что невозможно при прямом переборе. Систематическое исследование всего шестимерного пространства параметров и анализ не только максимума, но и устойчивости решения к вариациям параметров позволяет не только найти оптимум, но и оценить, насколько критичны отклонения от него в реальном эксперименте.

Материалы и методы исследования. Для описания исследуемой системы ранее было введено понятие оптического нанотрансивера – устройства, преобразовывающего первичное излучение во вторичное с использованием металлической или диэлектрической наноантенны [7]. Эффективность нанотрансивера определяется фактором $F = G(\lambda_{ex})Q(\lambda_{em})$, где $G(\lambda_{ex})$ – усиление поля на частоте возбуждения, а $Q(\lambda_{em})$ – фактор изменения квантовой эффективности излучателя в присутствии наночастицы. Данный параметр непосредственно задает максимально возможное усиление фотолюминесценции.

Теоретической основой анализа исследуемой системы служит аналитический расчет по алгоритму, описанному в [1]. Рассматривались следующие параметры: длина волны возбуждения λ_{ex} (300–700 нм), длина волны испускания λ_{em} (350–750 нм, с условием $\lambda_{em} > \lambda_{ex}$), радиус металлической наночастицы R (5–100 нм), расстояние от поверхности наночастицы до излучателя Δr (0–50 нм), показатель преломления среды n_0 (1,0–2,0) и собственный квантовый выход излучателя Q_0 (0,01–1,0).

Вместо многократного ресурсоемкого точного расчета при поиске оптимума целесообразно построить суррогатную модель – быстрый и достаточно точный аппроксиматор, который обучается на ограниченном наборе предварительно вычисленных данных. Для построения такой модели сгенерирован обучающий набор данных из 60 000 точек методом латинского гиперкуба (Latin Hypercube Sampling, LHS) [8]. Данный метод обеспечивает равномерное покрытие исследуемого шестимерного пространства параметров, что критически важно для корректного обучения модели, особенно в спектральных и пространственных областях с резкими плазмонными резонансами. Для каждой точки выполнен точный расчет F, а целевой переменной служил логарифм $\log_{10}(F)$, что позволило сжать динамический диапазон усиления и сделать задачу регрессии более устойчивой. Полученные данные разделены на обучающую (80 %) и тестовую (20 %) выборки. В качестве алгоритма машинного обучения выбран Gradient Boosting Machine (GBM) из библиотеки scikit-learn [9]. Данный ансамблевый метод основан на последовательном построении решающих деревьев, при котором каждое последующее дерево обучается на остатках (невязках)

предыдущего, что обеспечивает высокую точность предсказаний на структурированных данных и предоставляет возможность количественной оценки вклада каждого входного параметра [10]. Гиперпараметры модели (количество деревьев, максимальная глубина, скорость обучения, минимальное число образцов в листе и др.) подобраны с использованием RandomizedSearchCV со 100 итерациями и 3-кратной кросс-валидацией, что позволило избежать переобучения и достичь оптимальной обобщающей способности. Для оценки точности построенной суррогатной модели были использованы три стандартные метрики регрессии: коэффициент детерминации R^2, среднеквадратичную ошибку (Mean Squared Error, MSE) и среднюю абсолютную ошибку (Mean Absolute Error, MAE).

Результаты и их обсуждение. Обученная модель показала на тестовой выборке значение параметра коэффициента детерминации $R^2 = 0{,}9471$, среднеквадратичной ошибки MSE = 0,0291 и средней абсолютной ошибки MAE = 0,0915 (в логарифмическом масштабе), что означает, что модель описывает 94,71 % дисперсии логарифма усиления. Это можно считать высоким показателем для задачи с шестью независимыми параметрами и сложной резонансной зависимостью участвующих в расчете функций. Оставшиеся 5,29 % дисперсии обусловлены как неизбежным шумом в данных (из-за конечной точности расчетов и дискретизации), так и принципиальной нелинейностью функции, которую ансамбль деревьев не может воспроизвести при данном объеме выборки. На рис. 1, *a* представлен график предсказанных как функция истинных значений: точки хорошо ложатся на график прямой $y = x$, однако разброс возрастает в области тушения, что может быть связано как с недостатком данных в этой области, так и с высокой чувствительностью функции к параметрам в этой области.

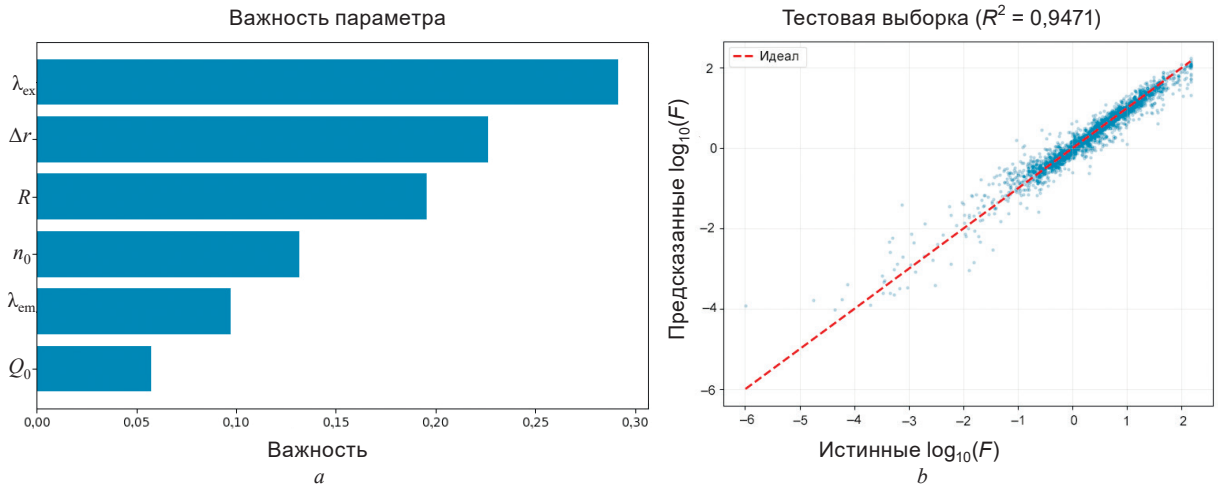


Рис. 1. Сравнение предсказанных и истинных значений эффективности нанотрансивера F на тестовой выборке (*a*); важность параметров задачи плазмонного усиления фотолюминесценции квантового излучателя в модели Gradient Boosting Machine (GBM) (*b*)

Fig. 1. Comparison of predicted and true values of nanotransceiver efficiency F in a test set (*a*); the importance of the parameters in the problem of plasmon photoluminescence enhancement for a quantum emitter within the Gradient Boosting Machine (GBM) framework (*b*)

Анализ важности признаков (рис. 1, *b*) показал, что наибольший вклад вносят длина волны возбуждения λ_{ex} (29 %), расстояние Δr (23 %) и радиус R (19 %). Это согласуется с резонансным характером усиления и быстрым затуханием поля при отдалении излучателя от металлической наночастицы. Полученное ранжирование параметров представляет самостоятельный научный интерес. Во-первых, оно количественно подтверждает, что ключевыми факторами, определяющими эффективность нанотрансивера, являются спектральное согласование (λ_{ex}), ближнепольное взаимодействие (Δr) и геометрический размер плазмонной частицы (R). Во-вторых, сравнительно низкий вклад показателя преломления среды n и собственного квантового выхода Q_0 указывает на то, что в исследуемом диапазоне параметров вариации диэлектрического окружения и внутренней эффективности излучателя оказывают второстепенное влияние на итоговое

усиление. Этот результат нетривиален: из физических соображений можно было бы ожидать более сильной зависимости от n_0, однако модель показывает, что в данной системе доминируют геометрические и спектральные факторы. Таким образом, предложенный подход не только ускоряет расчеты, но и позволяет выявить иерархию параметров, управляющих процессом, что может служить ориентиром для планирования эксперимента.

Для анализа взаимодействия параметров между собой и их взаимного влияния на усиление люминесценции была построена полная матрица контурных графиков (рис. 2) для пар самых важных рассматриваемых параметров. На рисунке представлены контурные графики зависимости предсказанного усиления $\log_{10}(F)$ от двух параметров, при этом все остальные параметры зафиксированы на своих медианных значениях из набора данных. Медианные значения выбраны в качестве точки отсчета, поскольку они характеризуют типичную конфигурацию системы в обучающей выборке и, в отличие от среднего арифметического, устойчивы к возможным выбросам, что обеспечивает корректную визуализацию парных зависимостей в центральной области распределения данных. Светлые области на контурных графиках соответствуют сочетаниям параметров с высоким усилением, а их ширина позволяет оценить, насколько критичны отклонения параметров от оптимальных значений. Эти графики помогают оценить чувствительность модели к параметрам, их взаимную корреляцию, согласованность полученных результатов с физическими принципами, а также позволяют выбрать «рабочую область»: наиболее широкая светлая область – это сочетание параметров, где усиление высокое и стабильное, т. е. система имеет малую чувствительность к изменению параметров в этой области, что дает воспроизводимый результат.

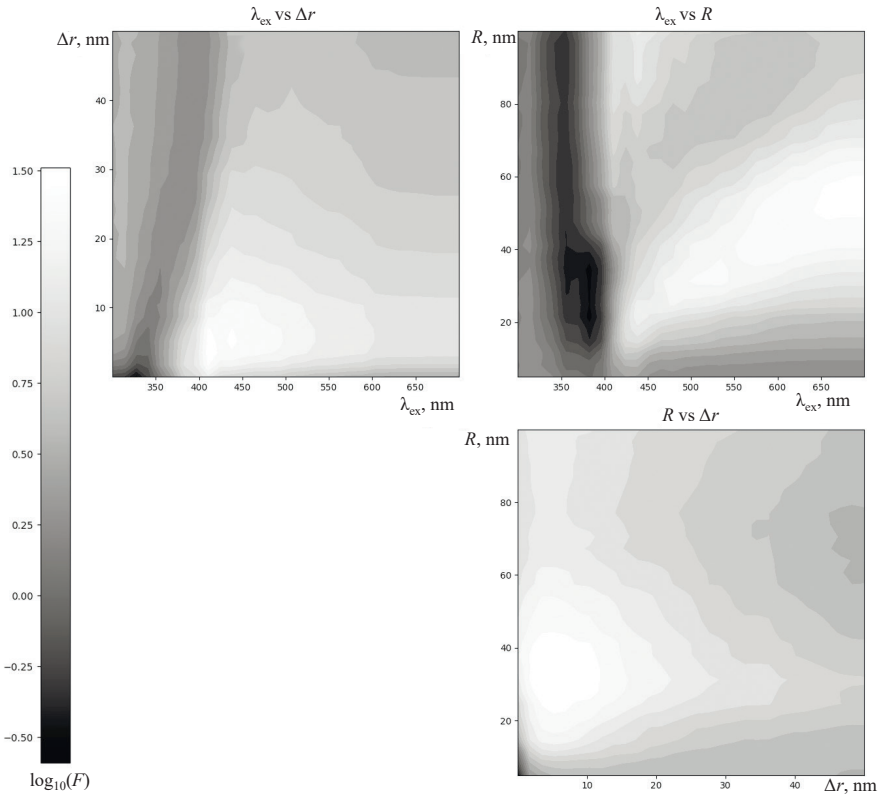


Рис. 2. Матрица контурных графиков предсказанного усиления $\log_{10}(F)$ для пар самых важных параметров. Остальные параметры зафиксированы на медианных значениях

Fig. 2. Matrix of contour plots of predicted $\log_{10}(F)$ enhancement for pairs of the most important parameters. The remaining parameters are fixed at the median values

Заключение. В работе построена суррогатная модель градиентного бустинга (GBM) для оптимизации параметров нанотрансивера на основе Ag-сферы и молекулы-излучателя. Модель продемонстрировала высокую предсказательную способность (R^2 = 0,9471) и позволила сильно

сократить время расчетов, а также обнаружить взаимосвязи между исследуемыми параметрами и определить области высокой и низкой чувствительности модели к параметрам. Полученные результаты находятся в русле современной дискуссии о применении машинного обучения в плазмонике [3–5; 11–13]. Следует подчеркнуть, что применение машинного обучения в данном исследовании не ограничивается созданием быстрого аппроксиматора: дополнительным и не менее ценным результатом является количественное ранжирование входных параметров по степени их влияния на выходную характеристику. Получение такой информации прямым перебором параметров крайне затруднительно, а ее априорное предсказание на основе физической интуиции не всегда представляется возможным. Предложенная модель позволяет сузить область поиска оптимальных конфигураций на несколько порядков; при этом, однако, часть дисперсии остается необъясненной, что указывает на необходимость последующей верификации точными численными методами. Таким образом, гибридные подходы, сочетающие машинное обучение с прямым электродинамическим моделированием, представляются наиболее перспективными для оптимизации плазмонных систем.

Список использованных источников

1. Plasmonic enhancement of molecular fluorescence near silver nanoparticles: theory, modeling, and experiment / D. V. Guzatov, S. V. Vaschenko, V. V. Stankevich [et al.] // Journal of Physical Chemistry C. – 2012. – Vol. 116, N 19. – P. 10723–10733. https://doi.org/10.1021/jp301598w

2. Gaponenko, S. V. Colloidal plasmonics for active nanophotonics / S. V. Gaponenko, D. V. Guzatov // Proceedings of the IEEE. – 2020. – Vol. 108, N 5. – P. 704–720. https://doi.org/10.1109/jproc.2019.2958875

3. Farsad, M. An extended finite element/level set method to study surface effects on the mechanical behavior and properties of nanomaterials / M. Farsad, F. J. Vernerey, H. S. Park // International Journal for Numerical Methods in Engineerin. – 2010. – Vol. 84, N 12. – P. 1466–1489. https://doi.org/10.1002/nme.2946

4. Plasmonic nanoparticle simulations and inverse design using machine learning / J. He, C. He, C. Zheng [et al.] // Nanoscale. – 2019. – Vol. 11, N 37. – P. 17444–17459. https://doi.org/10.1039/c9nr03450a

5. Deep learning in photonic device development: nuances and opportunities / V. Iyer, B. A. Wilson, Y. Chen [et al.] // npj Nanophotonics. – 2026. – Vol. 3. – Art. 5. https://doi.org/10.1038/s44310-025-00097-y

6. Physics-informed deep learning for plasmonic sensing of nanoscale protein dynamics in solution / C. Wu, S. Yang, K. Zeng [et al.] // Science Advances. – 2025. – Vol. 11, N 39. – Art. eadw0783. https://doi.org/10.1126/sciadv.adw0783

7. Гапоненко, С. В. Оптические нанотрансиверы в фотонике / С. В. Гапоненко, Т. А. Ефимова // Доклады Национальной академии наук Беларуси. – 2024. – Т. 68, № 4. – С. 288–295. https://doi.org/10.29235/1561-8323-2024-68-4-288-295

8. Scikit-learn: Machine learning in Python / F. Pedregosa, G. Varoquaux, A. Gramfort [et al.] // Journal of Machine Learning Research. – 2011. – Vol. 12. – P. 2825–2830. – URL: https://jmlr.csail.mit.edu/papers/v12/pedregosa11a.html (date of access: 02.09.2026).

9. Shields, M. D. The generalization of Latin hypercube sampling / M. D. Shields, J. Zhang // Reliability Engineering & System Safety. – 2016. – Vol. 148. – P. 96–108. https://doi.org/10.1016/j.ress.2015.12.002

10. Friedman, J. H. Greedy function approximation: a gradient boosting machine / J. H. Friedman // Annals of Statistics. – 2001. – Vol. 29, N 5. – P. 1189–1232. https://doi.org/10.1214/aos/1013203451

11. Measurement precision enhancement of surface plasmon resonance based angular scanning detection using deep learning / K. Thadson, S. Sasivimolkul, P. Suvarnaphaet [et al.] // Scientific Reports. – 2022. – Vol. 12. – Art. 2052. https://doi.org/10.1038/s41598-022-06065-2

12. Machine learning assisted plasmonic metascreen for enhanced broadband absorption in ultra-thin silicon films / W. W. Ahmed, H. Cao, C. Xu [et al.] // Light: Science & Applications. – 2025. – Vol. 14. – Art. 42. https://doi.org/10.1038/s41377-024-01723-8

13. Deep neural network for plasmonic sensor modeling / X. Li, J. Shu, W. Gu, L. Gao // Optical Materials Express. – 2019. – Vol. 9, N 9. – P. 3857–3862. https://doi.org/10.1364/ome.9.003857

References

1. Guzatov D. V., Vaschenko S. V., Stankevich V. V., Lunevich A. Y., Glukhov Y. F., Gaponenko S. V. Plasmonic enhancement of molecular fluorescence near silver nanoparticles: theory, modeling, and experiment. *Journal of Physical Chemistry C*, 2012, vol. 116, no. 19, pp. 10723–10733. https://doi.org/10.1021/jp301598w

2. Gaponenko S. V., Guzatov D. V. Colloidal plasmonics for active nanophotonics. *Proceedings of the IEEE*, 2020, vol. 108, no. 5, pp. 704–720. https://doi.org/10.1109/jproc.2019.2958875

3. Farsad M., Vernerey F. J., Park H. S. An extended finite element/level set method to study surface effects on the mechanical behavior and properties of nanomaterials. *International Journal for Numerical Methods in Engineerin*, 2010, vol. 84, no. 12, pp. 1466–1489. https://doi.org/10.1002/nme.2946

4. He J., He C., Zheng C., Wang Q., Ye J. Plasmonic nanoparticle simulations and inverse design using machine learning. *Nanoscale*, 2019, vol. 11, no. 37, pp. 17444–17459. https://doi.org/10.1039/c9nr03450a

5. Iyer V., Wilson B. A., Chen Y., Kildishev A. V., Shalaev V. M., Boltasseva A. Deep learning in photonic device development: nuances and opportunities. *npj Nanophotonics*, 2026, vol. 3, art. 5. https://doi.org/10.1038/s44310-025-00097-y

6. Wu C., Yang S., Zeng K., Dai X., Duan Y., Zhang S., Ma P., Guo X., Zhang S., Yang X., Dai Q. Physics-informed deep learning for plasmonic sensing of nanoscale protein dynamics in solution. *Science Advances*, 2025, vol. 11, no. 39, art. eadw0783. https://doi.org/10.1126/sciadv.adw0783

7. Gaponenko S. V., Efimova T. A. Optical nanotransceivers in photonics. *Doklady Natsional'noi akademii nauk Belarusi = Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus*, 2024, vol. 68, no. 4, pp. 288–295 (in Russian). https://doi.org/10.29235/1561-8323-2024-68-4-288-295

8. Pedregosa F., Varoquaux G., Gramfort A., Michel V., Thirion B., Grisel O., Blondel M., Prettenhofer P., Weiss R., Dubourg V., Vanderplas J., Passos A., Cournapeau D., Brucher M., Perrot M., Duchesnay É. Scikit-learn: Machine learning in Python. *Journal of Machine Learning Research*, 2011, vol. 12, pp. 2825–2830. Available at: https://jmlr.csail.mit.edu/papers/v12/pedregosa11a.html (accessed 02 September 2026).

9. Shields M. D., Zhang J. The generalization of Latin hypercube sampling. *Reliability Engineering & System Safety*, 2016, vol. 148, pp. 96–108. https://doi.org/10.1016/j.ress.2015.12.002

10. Friedman J. H. Greedy function approximation: a gradient boosting machine. *Annals of Statistics*, 2001, vol. 29, no. 5, pp. 1189–1232. https://doi.org/10.1214/aos/1013203451

11. Thadson K., Sasivimolkul S., Suvarnaphaet P., Visitsattapongse S., Pechprasarn S. Measurement precision enhancement of surface plasmon resonance based angular scanning detection using deep learning. *Scientific Reports*, 2022, vol. 12, art. 2052. https://doi.org/10.1038/s41598-022-06065-2

12. Ahmed W. W., Cao H., Xu C., Farhat M., Amin M., Li X., Zhang X., Wu Y. Machine learning assisted plasmonic metascreen for enhanced broadband absorption in ultra-thin silicon films. *Light: Science & Applications*, 2025, vol. 14, art. 42. https://doi.org/10.1038/s41377-024-01723-8

13. Li X., Shu J., Gu W., Gao L. Deep neural network for plasmonic sensor modeling. *Optical Materials Express*, 2019, vol. 9, no. 9, pp. 3857–3862. https://doi.org/10.1364/ome.9.003857

Информация об авторах

Ефимова Таисия Адамовна – аспирант, мл. науч. сотрудник. E-mail: t.efimova@ifanbel.bas-net.by.

Гапоненко Сергей Васильевич – академик, д-р физ.-мат. наук, профессор, гл. науч. сотрудник. E-mail: s.gaponenko@ifanbel.bas-net.by.

Information about the authors

Efimova Taisia A. – Postgraduate Student, Junior Researcher. E-mail: t.efimova@ifanbel.bas-net.by.

Gaponenko Sergey V. – Academician, D. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Chief Researcher. E-mail: s.gaponenko@ifanbel.bas-net.by.