

Применение методов машинного обучения для идентификации спиновых центров в оксидах металлов

Е.В. Кытина,^{1,*} А.В. Васильев,¹ Е.А. Константинова,¹ Д.Р. Хохлов¹

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, физический факультет
Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2

(Поступила в редакцию 03.02.2026; после доработки 25.02.2026; подписана в печать 27.02.2026)

В данной работе решается задача классификации спектров электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) нанокристаллических оксидов металлов (на примере наноксидов алюминия и титана) и идентификации спиновых центров с применением методов машинного обучения. На основе литературных данных и выполненного исследования наноксидов металлов методом ЭПР были отобраны спиновые центры (радикалы), которые наиболее часто встречаются в наноразмерных оксидах, в частности в оксидах алюминия и титана. Поскольку имеющихся экспериментальных спектров оказалось недостаточно для формирования репрезентативного датасета, для обучения моделей использовался синтетический датасет, полученный путем симуляции экспериментальных спектров и добавления гауссова шума с целью приближения смоделированных спектров ЭПР к реальным. Тестовый датасет состоял из реальных экспериментальных спектров ЭПР. Для решения задачи классификации были протестированы модели классического машинного обучения (SVM, Random Forest, LGBM, CatBoost, XGBoost) и сверточные нейронные сети (ResNet18, Resnet34, Efficientnetb0, Efficientnetb3, Mobilenetv2). Была проведена предварительная предобработка данных, заключающаяся в извлечении дополнительных признаков из спектральных данных для задач классического машинного обучения. Наилучшая средняя точность 98% была получена с использованием модели градиентного бустинга CatBoost и нейросетевой модели ResNet18. Полученные результаты позволят автоматизировать процесс обработки спектров ЭПР, что значительно упростит и ускорит процесс работы ученых, выполняющих научные исследования в областях физики конденсированного состояния, а также будут способствовать популяризации метода ЭПР в научном сообществе.

PACS: 07.05.Mh, 32.30.Dx. УДК: 538.9

Ключевые слова: машинное обучение, ЭПР-спектроскопия, многоклассовая классификация спектров, спиновые центры, идентификация радикалов.

DOI: [10.55959/MSU0579-9392.81.2620501](https://doi.org/10.55959/MSU0579-9392.81.2620501)

ВВЕДЕНИЕ

Нанокристаллические полупроводниковые оксиды металлов представляют собой материалы с хорошо развитой удельной поверхностью (удельная площадь — от десятков до сотен квадратных метров на грамм вещества) и поэтому активно используются для создания различных устройств (например, биосенсоров, фотокатализаторов для очистки воды и воздуха, солнечных элементов) и нанопокрывтий (например, отражающих или антибактериальных защитных слоев) [1–3]. Одним из перспективных металлооксидов, который активно используется для разработки фотокаталитических устройств для экологии и биомедицины, является наноструктурированный оксид титана (TiO_2), поскольку в процессе фотокатализа на поверхности TiO_2 органические вещества (в том числе токсичные) эффективно разлагаются до простых составляющих — углекислого газа и воды [4]. Для создания фотокатализаторов, функционирующих в видимом диапазоне спектра

и обладающих пролонгированной каталитической активностью, то есть продолжающейся и после выключения освещения, необходимо легировать TiO_2 (равно как и другие наноразмерные оксиды металлов) различными элементами (металлами и неметаллами) и создавать на их основе наногетероструктуры [5, 6]. В качестве биосенсорных материалов наиболее перспективны оптические структуры на основе оксида алюминия ввиду простоты и дешевизны синтеза, быстрого действия, высокой чувствительности и селективности [7, 8].

В наноксидах металлов всегда присутствуют различные дефекты с неспаренным электроном — спиновые центры (радикалы) как в объеме, так и на поверхности [9, 10]. Дефекты в полупроводниковых оксидах металлов играют важную роль в физико-химических процессах, имеющих место в данных материалах: являются центрами захвата носителей заряда, обеспечивают примесное поглощение, участвуют в окислительно-восстановительных реакциях [11, 12]. Единственный метод, позволяющий диагностировать спиновые центры, определить их тип, ближайшее локальное окружение, концентрацию и заранее выделить образцы с наличием определенных типов радикалов, — это ме-

* E-mail: kata13012002mail@mail.ru

тод электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) [13, 14]. Однако в силу принципа неопределенности Гейзенберга линии в спектрах ЭПР могут быть уширены за счет теплового фактора, диполь-дипольного и/или обменного взаимодействий, несколько сигналов ЭПР от различных спиновых центров могут накладываться друг на друга, спектры ЭПР могут быть осложнены анизотропией и сверхтонким расщеплением вследствие взаимодействия электронного и ядерного спинов [13, 14]. Таким образом, результирующий спектр ЭПР будет иметь сложную форму, которую, в свою очередь, будет трудно быстро расшифровать. Также значения g -фактора, которые позволяют идентифицировать радикал, могут быть очень близки у различных радикалов и отличаться в 3–4 порядке. Поэтому в большинстве случаев расшифровать спектр ЭПР, используя только справочную литературу, не представляется возможным.

Для идентификации спиновых центров проводится компьютерное моделирование спектров ЭПР, например в среде программирования MATLAB при помощи пакета функций EasySpin, разработанного в 2006 г. [15]. Для каждого из полученных спектров ЭПР пишется соответствующий программный код, учитывающий все параметры (g -фактор, сверхтонкое расщепление, анизотропию, ширину линии ЭПР, диапазон магнитного поля, частоту СВЧ-излучения, амплитуда модуляции), особенности и цели каждого конкретного эксперимента ЭПР. При моделировании необходимо задать диапазон варьирования для каждого из параметров и выбрать метод численного подбора. Но такое выполнение моделирования занимает большое количество времени, например даже более суток, несмотря на использование самых мощных компьютеров. Вследствие этого на интерпретацию одного спектра ЭПР могут уходить дни. Поэтому не все ученые, разрабатывающие устройства для солнечной энергетики, экологии, биомедицины и других важнейших областей науки и техники (принцип работы которых основан на процессах обмена зарядом и окислительно-восстановительных реакциях с участием радикалов) готовы использовать метод ЭПР в своей работе.

Целью данного исследования является применение методов машинного обучения для автоматизации процесса анализа и расшифровки спектров ЭПР. Также на основе смоделированных спектров спиновых центров возможно будет создать базу данных спектров ЭПР, аналогов которой в настоящее время не существует. Это откроет широкие возможности для активного и успешного использования метода ЭПР для диагностики радикалов и контроля их концентрации.

На данный момент в научном сообществе классическое машинное обучение и нейронные сети успешно применяются для анализа различных спектров. С помощью алгоритмов SVM и knn удалось определить центральную длину волны и оценить оптическое отношение сигнал/шум с точностью более

98% из оптических спектров [16, 17]. Классическое машинное обучение и нейронные сети применялись и для анализа спектров БИК-спектроскопии (ближняя инфракрасная спектроскопия) [18]. С помощью сверточных нейронных сетей стало возможно автоматизировать идентификацию веществ по их рамановскому спектру без необходимости предварительной обработки [19] и автоматизировать идентификацию белков по спектрам ЯМР [20, 21]. К спектрам ЭПР машинное обучение применялось с целью прогнозирования определенных параметров исследуемых соединений: с помощью сверточной нейронной сети были предсказаны сверхтонкие и квадрупольные константы связи [22] и выявлено наличие нескольких поверхностных частиц в высоко- и низкоспиновых состояниях в алкилах [23]. Однако расшифровка спектров ЭПР в указанных работах делалась вручную. Применение методов машинного обучения позволит повысить точность расшифровки спектров ЭПР и сократить время, необходимое для полного описания спектра в десятки (а возможно, и в сотни раз). Полученная нами на основе классического машинного обучения база данных спектров ЭПР в дальнейшем может быть использована научными лабораториями для интерпретации новых результатов по ЭПР, прогнозирования будущих экспериментов ЭПР и также даст возможность студентам и молодым ученым получить богатый практический опыт в процессе обучения основам метода ЭПР.

1. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Спектры ЭПР записываются в виде массива, содержащего значения интенсивности I сигнала ЭПР в зависимости от значения магнитного поля H . Для создания датасета были решены следующие задачи.

1. На основе литературных данных и собственных наработок определены наиболее часто встречаемые парамагнитные центры в оксиде титана (чистом и с наиболее часто используемыми легирующими примесями) и оксиде алюминия.
2. Создан синтетический датасет для обучения нейронов сети, состоящий из спектров ЭПР радикалов, регистрируемых в выбранных наноксидах металлов.

В данных наноксидах наиболее часто регистрируются сигналы от следующих парамагнитных центров:

- ионы титана: Ti^{3+} (на поверхности и в объеме образцов);
- примесные радикалы (азотный и углеродный радикалы), кислородные радикалы и вакансии кислорода: N^\bullet , C^\bullet , O^\bullet , O_2^- , V_O^\bullet .

Отметим, что в оксиде титана наиболее часто встречаются следующие парамагнитные центры:

ионы титана; азотные, углеродные, кислородные радикалы; вакансии кислорода; в оксиде алюминия — кислородные радикалы и вакансии кислорода.

Так как для использования методов машинного обучения необходим значительный размер обучающей выборки, имеющихся экспериментальных спектров оказалось недостаточно для формирования репрезентативного датасета. Поэтому было принято решение использовать синтетический датасет для обучения нейронной сети, а экспериментальные спектры — для тестирования обученных моделей. Синтетический датасет представляет из себя спектры ЭПР, полученные путем численного моделирования экспериментальных спектров ЭПР. В интернет ресурсах отсутствуют опубликованные в открытом доступе массивы значений $I(H)$, поэтому датасет для обучения нейронной сети был создан вручную путем моделирования всевозможных видов спектров ЭПР для каждого из вышеперечисленных типов парамагнитных центров в среде программирования MATLAB при помощи пакета функций EasySpin. Реальные спектры наноструктур могут содержать аппаратные шумы, приборные «артефакты» (например, фоновые сигналы), поэтому для повышения обобщающей способности моделей машинного обучения и приближения смоделированных спектров ЭПР к реальным экспериментальным данным к синтетическим спектрам был добавлен гауссов шум. Шум моделировался как аддитивный гауссов шум с нулевым математическим ожиданием и стандартным отклонением $\sigma = 1\%$ от максимальной амплитуды нормализованного спектра, что соответствует типичному уровню шума в экспериментальных спектрах. На данный момент в обучающем наборе данных содержится 1056 спектров для 7 типов радикалов. В качестве тестовых данных были использованы экспериментальные спектры ЭПР, измеренные в ЦКП физического факультета МГУ на ЭПР-спектрометре Bruker Elexsys 500 (рабочая частота 9.5 ГГц, чувствительность $5 \cdot 10^{10}$ спин/Гц). Спектры ЭПР регистрировались в температурном интервале 5–300 К.

Ко всем спектрам, входящим в датасет была применена процедура нормировки. Значения магнитного поля были приведены к единому диапазону 3300–3700 Гс для всех спектров, поскольку сигналы от парамагнитных центров в выбранных оксидах металлов наблюдаются только в данном диапазоне. Это позволило использовать в качестве основного признака только значения интенсивности сигнала, исключив необходимость учитывать соответствующие значения магнитного поля. Таким образом, спектры ЭПР в датасете представляют собой зависимость интенсивности сигнала ЭПР от относительных единиц магнитного поля. Для увеличения точности расшифровки спектров методами классического машинного обучения были извлечены дополнительные признаки — количество пиков в спектре, минимальное и максимальное значения магнитного поля, в диапазоне между которыми наблюдаются сигналы ЭПР. Для извлечения признаков

использовался метод `scipy.signal.find_peaks` из библиотеки SciPy.

Полученный датасет был собран в виде таблицы CSV-формата, содержащей:

1. признаки: колонки 0–454 содержат числовые данные, представляющие собой значения интенсивности сигналов ЭПР. Колонки 455–457 содержат числовые данные, а именно количество пиков в спектре, минимальное и максимальное значения магнитного поля, в диапазоне между которыми наблюдаются сигналы ЭПР;
2. метки класса (`label_idx`). Каждому типу радикала была присвоена соответствующая метка класса.

В табл. 1 перечислены все типы радикалов, соответствующие им метки и указано количество спектров в обучающей и тестовой выборке. Пример данных, входящих в датасет, изображен на рисунке.

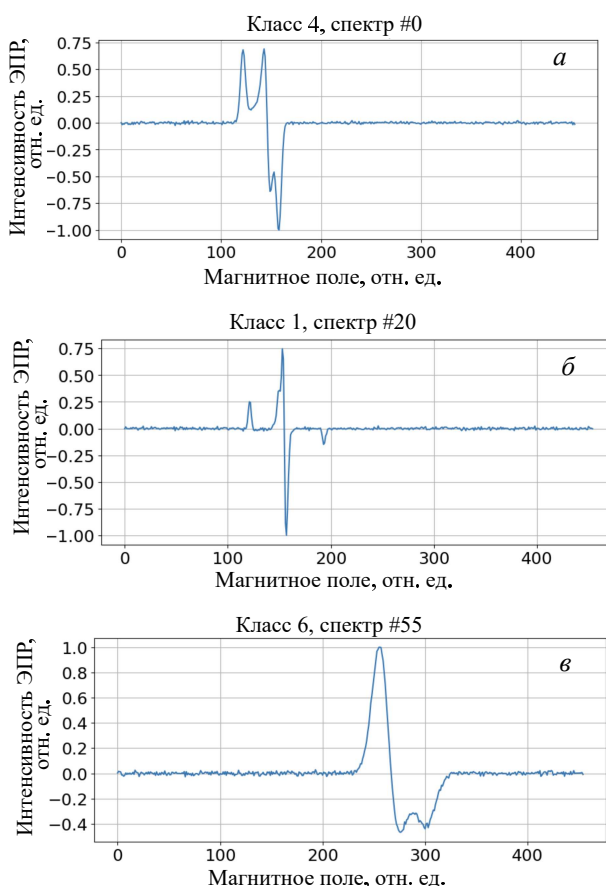


Рисунок: Пример экспериментальных спектров ЭПР, входящих в тестовый датасет, для: *a* — O_2^- с анизотропией g -фактора, *b* — N^\bullet радикала с анизотропией g -фактора и сверхтонкого взаимодействия, *v* — ионов Ti^{3+} с анизотропией g -фактора

В датасете содержится от 150 до 156 примеров на класс, поэтому данные можно считать сбалансированными. Для валидации было использовано

Таблица 1: Тип радикала, соответствующая ему метка и количество радикалов данного типа в тренировочном и тестовом датасетах

Метка	Название радикала	train	test
0	C_rad_noisy_normalized	150	15
1	N_rad_noisy_normalized	150	15
2	O_radical_noisy_normalized	156	15
3	O_vac_noisy_normalized	150	15
4	O2_minus_noisy_normalized	150	15
5	Ti3+_surface_noisy_normalized	150	15
6	Ti3+_bulk_noisy_normalized	150	15

105 спектров (10% от количества спектров в обучающей выборке). В тестовой выборке общее количество спектров — 150, на каждый класс присутствует по 15 спектров. Таким образом, соотношение тренировочная/валидационная/тестовая выборка составило 9:1:1. Во всех трех выборках распределение классов сбалансированное. Обсудим методологию.

- 1) Методы классического машинного обучения:
 - 1.1) Метод опорных векторов с линейным, нелинейным и полиномиальным ядрами,
 - 1.2) Модель Random Forest,
 - 1.3) LGBM,
 - 1.4) CatBoost,
 - 1.5) XGBoost.
- 2) Нейросетевые модели:
 - 2.1) ResNet18,
 - 2.2) ResNet34,
 - 2.3) EfficientNet-B0,
 - 2.4) EfficientNet-B3,
 - 2.5) MobileNetV2.

В качестве функции потерь была использована CrossEntropyLoss. Для оценки качества многоклассовой классификации спектров ЭПР использовались две взаимодополняющие метрики: точность многоклассовой классификации (MultiClass Accuracy) и F1-мера (MultiClass F1-score). Совместное применение этих метрик позволяет получить более полное и объективное представление о качестве работы модели. Точность многоклассовой классификации характеризует долю спектров, корректно отнесённых к соответствующим классам радикалов. Эта метрика отражает общее число правильных предсказаний и позволяет оценить, насколько модель в среднем успешно решает задачу идентификации радикалов. Однако в задаче расшифровки спектров ЭПР модель должна одновременно минимизировать два типа ошибок: ложноположительные (неверная идентификация радикала в спектре)

и ложноотрицательные (пропуск радикала, который действительно присутствует). Метрики точности и полноты отражают эти ошибки по отдельности, однако для практического применения важно и учитывать и точность классификации по классам и полноту. По этой причине в качестве основной метрики использовалась F1-score, определяемая как гармоническое среднее точности и полноты:

$$2 \cdot \frac{\text{precision} \cdot \text{recall}}{\text{precision} + \text{recall}}.$$

Был выбран порог $F1 > 0.9$, который определяет эффективность модели для решения поставленной задачи. Так как в настоящее время интерпретация ЭПР-спектров выполняется специалистами вручную, внедрение автоматизированного метода оправдано тогда, когда его точность сопоставима с качеством расшифровки спектров ЭПР человеком. Архитектуры используемых нейронных сетей были модифицированы для работы с одномерными данными. Операции для работы с двумерными данными заменены на аналогичные для работы с одномерными данными: (Conv2d→Conv1d, MaxPool2d→MaxPool1d, AdaptiveAvgPool2d→AdaptiveAvgPool1d). Таким образом, полученные модели идеально подходят для задач, где входными данными являются одномерные временные ряды или спектры.

2. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Baseline был получен с помощью 5 самых распространенных методов классического машинного обучения (метод опорных векторов, метод случайного леса, LGBM, Catboost, XGBoost), подробное обсуждение каждого из которых будет приведено ниже.

2.1. Метод опорных векторов

Основная идея метода заключается в построении гиперплоскости, способной разделять объекты выборки оптимальным способом. Была обучена модель SVM с линейным ядром (LinearSVC) для случая многоклассовой классификации. Параметр «Регуляризация» был выбран по умолчанию равным 1. Варьирование данного параметра не привело к улучшению метрик классификации. С помощью функции classification_report был выведен отчет, содержащий показатели точности, полноты и f1-меры для отрицательного и положительного классов. Он представлен в табл. 2.

Точность модели составила 97%, значение f1-меры — 97%, что свидетельствует о возможности применения метода опорных векторов для классификации типов радикалов по их спектральным признакам. Для классов 1, 2, 4, 5, 6 значения основных метрик классификации равны 1 или близки к 1. Небольшие отклонения от идеальных

Таблица 2: Лучшие значения метрик точности, полноты и F1-меры для модели SVM (linear)

Class (Radical)	Precision	Recall	F1-score	Support
0	0.88	1.00	0.94	15
1	1.00	1.00	1.00	15
2	1.00	1.00	1.00	15
3	1.00	0.87	0.93	15
4	1.00	1.00	1.00	15
5	1.00	0.93	0.97	15
6	0.94	1.00	0.97	15
Accuracy			0.97	105
F1-score (macro)			0.97	105

значений наблюдаются для классов 0 и 3. Для интерпретации результатов модели была проведена оценка важности признаков на основе абсолютных значений весов линейного SVM. Поскольку входные данные были предварительно нормализованы, величины весов могут быть использованы как мера вклада соответствующих признаков в процесс классификации. Анализ показал, что наиболее значимыми признаками являются максимумы и минимумы интенсивности. Также в тройке наиболее значимых признаков присутствует параметр `num_peaks`, обозначающий число пиков в спектре. Высокая важность данных признаков для модели объясняет то, что модель ошибочно идентифицирует 3-й класс (кислородная вакансия) как 0-й (углеродный радикал), что и приводит к снижению значений метрики точности для класса 0 и метрики полноты для класса 3. Единственную ошибочную классификацию 5-го класса как 6-го можно считать случайной. Матрица ошибок, подтверждающая данный вывод, приведена на рис. 2.

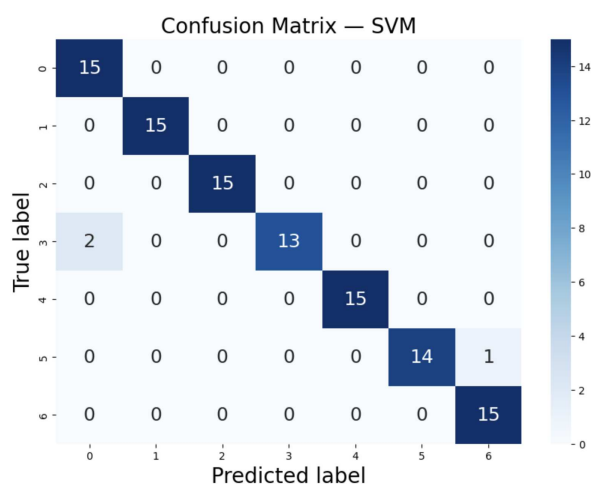


Рис. 2: Матрица ошибок для модели SVM с линейным ядром

Спектры ЭПР кислородных вакансий и углеродных радикалов представляют собой одну изотропную линию, их g -факторы отличаются в 4-м знаке

после запятой. Соответственно различия в положении линии ЭПР относительно магнитного поля для данных радикалов составляют несколько гауссов. Модель SVM с линейным ядром строит линейные разделяющие гиперплоскости в пространстве признаков. Наиболее важные признаки радикалов 0 и 3 частично перекрываются, и линейная SVM не может построить разделяющую поверхность, которая полностью разделяет эти два класса без ошибок.

Использование SVM с нелинейными ядрами (RBF и полиномиальным) привело к резкому снижению точности классификации до 15–20%. Данный результат обусловлен ограниченным объемом обучающей выборки в сочетании с высокой размерностью пространства признаков. В таких условиях все точки в высокоразмерном пространстве становятся равноудаленными и нелинейные модели SVM становятся неспособными разделить признаки.

2.2. Деревья решений — метод случайного леса

Далее задача многоклассовой классификации была решена с применением метода случайного леса — алгоритма машинного обучения, состоящего из множества отдельных независимых «решающих деревьев». Лучшие значения метрик точности, полноты и F1-меры, полученные с применением данной модели, представлены в табл. 3.

Таблица 3: Лучшие значения метрик точности, полноты и F1-меры для модели Random Forest

Class	Precision	Recall	F1-score	Support
0	0.88	0.93	0.90	15
1	1.00	1.00	1.00	15
2	1.00	0.73	0.85	15
3	0.76	0.87	0.81	15
4	0.94	1.00	0.97	15
5	1.00	1.00	1.00	15
6	1.00	1.00	1.00	15
Accuracy			0.93	105
F1-score			0.93	105

Наилучший результат показала модель Random Forest с 1000 решающих деревьев. Общая точность классификации Random Forest составила 93%, значение F1-меры — 93%, что указывает на достаточно высокую эффективность модели, однако качество классификации ниже по сравнению с результатом, полученным с помощью модели SVM с линейным ядром. Для классов 1, 4, 5 и 6 достигнута практически идеальная классификация (значения основных метрик равны 1 или близки к 1).

В то же время для радикалов 0, 2 и 3 наблюдается снижение качества классификации. Модель допускает большее число ошибок при классификации радикала класса 3 (кислородная вакансия), ошибочно относя его к классу 0 (углеродный радикал), что

Таблица 4: Метрики точности (P), полноты (R) и F1-меры, полученные для моделей градиентного бустинга : (а) CatBoost, (б) XGBoost, (в) LightGBM

(а) CatBoost					(б) XGBoost					(в) LightGBM				
C	P	R	F1	S	C	P	R	F1	S	C	P	R	F1	S
0	0.88	1.00	0.94	15	0	0.79	1.00	0.88	15	0	1.00	1.00	1.00	15
1	1.00	1.00	1.00	15	1	1.00	1.00	1.00	15	1	1.00	1.00	1.00	15
2	1.00	1.00	1.00	15	2	1.00	0.73	0.85	15	2	1.00	0.73	0.85	15
3	1.00	0.87	0.93	15	3	1.00	0.87	0.93	15	3	1.00	0.60	0.75	15
4	1.00	1.00	1.00	15	4	1.00	1.00	1.00	15	4	1.00	1.00	1.00	15
5	1.00	1.00	1.00	15	5	1.00	1.00	1.00	15	5	0.64	0.93	0.76	15
6	1.00	1.00	1.00	15	6	0.88	1.00	0.94	15	6	0.83	1.00	0.91	15
Acc			0.98	105	Acc			0.94	105	Acc			0.90	105
F1			0.98	105	F1			0.94	105	F1			0.90	105

отражается в пониженных значениях точности для класса 0 (88%) и полноты для класса 3 (76%).

Понижение значений основных метрик классификации можно объяснить тем, что данные оказываются хорошо линейно разделимы в имеющемся пространстве признаков, поэтому использование более сложных ансамблевых моделей может привести к увеличению чувствительности модели к шуму в данных, обнаружению несуществующих нелинейных зависимостей и, как итог, к снижению обобщающей способности модели.

2.3. Градиентные бустинги: LGBM, CatBoost, XGBoost

В дополнение к вышерассмотренным моделям была протестирована работа методов градиентного бустинга на решающих деревьях: CatBoost, XGBoost и LightGBM. Градиентный бустинг представляет собой эффективный метод машинного обучения, основанный на поэтапном построении ансамбля деревьев решений. На каждом этапе новая модель обучается с учётом ошибок предыдущих, минимизируя градиент функции потерь, что обеспечивает постепенное повышение точности предсказаний.

Результаты, полученные с применением моделей градиентного бустинга, представлены в табл. 4.

Среди протестированных реализаций градиентного бустинга наилучшие результаты продемонстрировал CatBoost с 700 решающими деревьями, максимальной глубиной каждого дерева, равной 7, и шагом градиентного бустинга 0.1, показав точность, равную 98%, и значение f1-меры — 98%. Данная модель показала несколько лучшие итоговые метрики по сравнению с ранее опробованными моделями для некоторых классов радикалов: 5 классов из 7 (а именно классы 1, 2, 4, 5, 6) классифицируются с идеальной точностью (точность=полнота=F1-score=1.00), в то время как наиболее эффективная из ранее рассмотренных модель SVM смогла идеально классифицировать только 3 класса (1, 2, 4). Ошибки CatBoost наблюдаются при классификации тех же классов (0 и 3), что и при применении других моделей, и объясняют-

ся такой же высокой важностью локальных максимумов и минимумов интенсивности, а также параметра числа пиков для градиентного бустинга. XGBoost и LGBM показали более низкое качество классификации — значение точности порядка 93% и 90% соответственно. Мы предполагаем, что данные модели могут переобучаться на локальных особенностях спектров и «заучивать» закономерности, не имеющие никакого физического смысла.

2.4. Нейросетевые архитектуры для одномерных данных

Помимо методов классического машинного обучения, для решения задачи классификации спектров ЭПР были применены нейронные сети. В качестве функции потерь была использована CrossEntropyLoss, в качестве метрик были использованы MultiClass Accuracy и MultiClass F1. В качестве оптимизатора использовался Adam. Все использованные нейросетевые модели (Resnet18, Resnet34, Efficientnetb0, Efficientnetb3, Mobilenetv2) были предварительно адаптированы для работы с одномерными данными. При этом сохранялась исходная структура моделей, без изменения числа входных и выходных каналов и глубины сети. Таким образом, нейросети применялись в их базовой конфигурации, что позволило оценить качество классификации при минимальном вмешательстве в архитектуру. Полученные метрики классификации представлены в табл. 5.

Таблица 5: Метрики точности, полноты и F1-меры, полученные с помощью нейронных сетей

Модель	Accuracy	F1 (macro)
ResNet34	0.94	0.94
ResNet18	0.85	0.84
EfficientNet-B0	0.83	0.83
EfficientNet-B3	0.83	0.83
MobileNetV2	0.67	0.67

Наилучшее качество при этом показала модель ResNet32 — точность классификации при этом составила 94%, F1-метрика — 94%. Однако дальней-

шие модификации ее структурных параметров и гиперпараметров не привели к улучшению значений метрик, и модель начала быстро переобучаться. Это объясняется тем, что ResNet32 является более глубокой нейросетевой моделью, и поэтому имеет большие риски переобучения. Было принято решение варьировать структурные параметры модели и гиперпараметры у модели ResNet18, так как метрики, полученные с использованием этой модели без модификаций, оказались ниже, чем у ResNet32, но выше, чем у других опробованных моделей. В нейросетевой архитектуре ResNet18 было увеличено число входных каналов до 128, изменена глубина отдельных блоков ResNet: 128 каналов в первом слое, 256 во втором, 512 в третьем и 512 каналов в четвертом слое, добавлен слой регуляризации с параметром 0.6. Финальный полносвязный слой имел размерность 512×8 и число выходов, равное количеству классов. Значение скорости обучения варьировалось в диапазоне от 10^{-3} до 10^{-6} . Наилучшее качество классификации было достигнуто при скорости обучения 10^{-4} . Более высокие значения приводили к быстрому переобучению: значения метрик на обучающей выборке продолжали расти, а на тестовой в какой-то момент начинали падать и стремиться к нулю. В то же время более низкие значения скорости обучения замедляли сходимость и приводили к недообучению модели.

Также исследовалось влияние коэффициента L2-регуляризации. Оптимальное значение 10^{-5} обеспечило отсутствие быстрого переобучения и сохранило способность модели к обобщению. При меньших значениях коэффициента регуляризация оказывалась недостаточной, а при больших — приводила к чрезмерному сглаживанию весов и ухудшению качества классификации. Лучший результат, который в итоге показала модель ResNet18, следующий: точность и F1-мера, равные 98%, и стопроцентные значения всех метрик для 5 классов. Данные итоговые метрики классификации полностью совпадают с метриками, полученными при использовании модели CatBoost.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты данной работы демонстрируют, что задача многоклассовой классификации ЭПР-спектров наноксидов металлов на примере спектров радикалов, детектируемых в диоксиде титана и оксиде алюминия, может быть решена с высокой степенью точности как классическими алгоритмами машинного обучения, так и сверточными нейронными сетями. Также было показано, что при корректном подборе структурных параметров и гиперпараметров нейросетевая модель ResNet18 может достичь качества классификации, сопоставимого с метриками качества градиентного бустинга (Accuracy и F1-score, равные 98%). Сравнительная табл. 6, демонстрирующая все результаты, получен-

ные в данной работе, представлена ниже. В условиях ограниченного объема экспериментальных данных для обучения моделей путем численного моделирования с добавлением аддитивного гауссова шума был создан синтетический датасет, содержащий 1056 спектров ЭПР для 7 типов радикалов. Такой подход позволил обеспечить успешную классификацию реальных экспериментальных спектров. Лучший результат среди моделей классического машинного обучения показала модель градиентного бустинга CatBoost — средние значения MultiClass Accuracy = 0.98, MultiClass F1 = 0.98.

Таблица 6: Сравнительная таблица, демонстрирующая средние значения метрик точности и F1-меры для всех моделей

Модель	Accuracy	F1 (macro)
CatBoost	0.98	0.98
ResNet18 (лучшие параметры)	0.98	0.98
SVM (линейное ядро)	0.97	0.97
ResNet34	0.94	0.94
XGBoost	0.94	0.94
Random Forest	0.93	0.93
LightGBM	0.90	0.90
EfficientNet-B0	0.83	0.83
EfficientNet-B3	0.83	0.83
MobileNetV2	0.67	0.67
SVM (RBF)	0.23	0.23
SVM (полиномиальное ядро)	0.14	0.14

Результаты данного исследования могут быть использованы для автоматизации обработки спектров ЭПР, что существенно упростит и ускорит процесс идентификации радикалов в наноксидах металлов. Созданный датасет является оригинальным, не имеет аналогов и будет полезен всем ученым, проводящим свои исследования в области физики наноразмерных систем. Он откроет широкие возможности для активного и успешного использования метода ЭПР для диагностики радикалов.

Код и данные

Код и данные для воспроизведения результатов работы представлены в репозитории на GitHub: https://github.com/Kattyssha/Kytina_EPR_spectra_classification

Исследование выполнено при поддержке Некоммерческого Фонда развития науки и образования «Интеллект» (Non-commercial Foundation for the Advancement of Science and Education INTELLECT).

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-19-00402, <https://rscf.ru/project/24-19-00402/> (регистрация, моделирование и интерпретация человеком спектров ЭПР).

- [1] Chen D., Cheng Y., Zhou N. et al. // *J. Clean. Prod.* **268**, 121725 (2020).
- [2] Ku C.-A., Yu C.-Y., Hung C.-W. et al. // *Nanomaterials* **13**, N 21. 2853 (2023).
- [3] Kamnev K. et al. // *Mater. Chem. Front.*, **9**, 866 (2025).
- [4] Ochiai T., Fujishima A. // *J. Photochem. Photobiol. C* **13**, 247 (2012).
- [5] Wei Y., Huang Y., Fang Y. et al. // *Mater. Res. Bull.* **119**, 110571 (2019).
- [6] Faisal M., Harraz F.A., Ismail A.A. et al. // *Ceram. Int.* **44**, 7047 (2018).
- [7] Abd-Elnaiem A.M., Mohamed Z.A., El Soliman S., Almokhtar M. // *Opt. Mater.* **157**, 116390 (2024).
- [8] Huang G.S., Wu X.L., Siu G.G., Chu P.K. // *Solid State Commun.* **137**, N 11. 621 (2006).
- [9] Kokorin A.I. // *Chem. Phys. Nanostruct. Semicond.*, 203 (2003).
- [10] Martin-Gomez J., Hidalgo-Carrillo J., Montes V. et al. // *J. Environ. Chem. Eng.* **9**, 105336 (2021).
- [11] Zhang H., Wang M., Xu F. // *Micro Nano Lett.* **15**, 535 (2020).
- [12] Khan J., Han L. Oxygen Vacancy in TiO₂: Production Methods and Properties. Updates on Titanium Dioxide. IntechOpen, 2023.
- [13] Rieger P.H. Electron Spin Resonance. Analysis and Interpretation. Cambridge: The Royal Society of Chemistry, 2007.
- [14] Верти Дж., Болтон Дж. Теория и практические приложения метода ЭПР. М., 1975.
- [15] Stoll S., Schweiger A. // *J. Magn. Reson.* **178**, N 1. 42 (2006).
- [16] Wang D., Zhang M., Li J. et al. // *IEEE Photonics Society Summer Topical Meeting Series*, 239 (2018).
- [17] Wang D., Zhang M., Zhang Z. et al. // *IEEE Access* **7**, 19726 (2019).
- [18] Zhang W.; Kasun L.C.; Wang Q.J. et al. // *Sensors* **22**, N 24. 9764 (2022). // *Sensors* **22**(24), 9764 (2022).
- [19] Liu J., Osadchy M., Ashton L. et al. // *Analyst* **142**. 4067 (2017).
- [20] Klukowski P., Augoff M., Zięba M. et al. // *Bioinformatics* **34**, N 15. 2590 (2018).
- [21] Klukowski P., Walczak M.J., Gonczarek A. et al. // *Bioinformatics* **31**, N 18. 2981 (2015).
- [22] Taguchi A.T., Evans E.D., Dikanov S.A. et al. // *J. Phys. Chem. Lett.* **10**, N 5. 1115 (2019).
- [23] Ashwiev A., Nabil A.G., Trummer D. et al. // *Angew. Chem. Int. Ed.* **136**, N 1. e202313348 (2024).

Application of Machine Learning Methods for the Identification of Spin Centres in Metal Oxides

E. V. Kytina^a, A. V. Vasiliev, E. A. Konstantinova, D. R. Khokhlov

Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University. Moscow 119991, Russia

E-mail: ^akata13012002@mail.ru

In the present paper, the problem of classifying electron paramagnetic resonance (EPR) spectra of nanocrystalline metal oxides (using nano-oxides of aluminium and titanium as an example) and identifying spin centres using machine learning methods is solved. Based on literature data and the performed study of metal nano-oxides by the EPR method, spin centres (radicals) were selected that are most frequently encountered in nanoscale oxides, in particular in aluminium and titanium oxides. Since the available experimental spectra proved insufficient to form a representative dataset, a synthetic dataset obtained by simulating experimental spectra and adding Gaussian noise in order to approximate the simulated EPR spectra to real ones was used to train the models. The test dataset consisted of real experimental EPR spectra. To solve the classification problem, classical machine learning models (SVM, Random Forest, LGBM, CatBoost, XGBoost) and convolutional neural networks (ResNet18, Resnet34, Efficientnetb0, Efficientnetb3, Mobilenetv2) were tested. Preliminary data preprocessing was carried out, consisting in extracting additional features from the spectral data for classical machine learning tasks. The best average accuracy of 98% was obtained using the CatBoost gradient boosting model and the ResNet18 neural network model. The obtained results will make it possible to automate the processing of EPR spectra, which will significantly simplify and accelerate the work of scientists conducting scientific research in the fields of condensed matter physics, and will also contribute to the popularisation of the EPR method in the scientific community.

PACS: 07.05.Mh, 32.30.Dx.

Keywords: EPR spectroscopy, spin centers, identification of radicals, machine learning, multiclass classification of spectra.

Received 03 February 2026.

English version: *Moscow University Physics Bulletin.* 2026. **81**, No. . Pp. .

Сведения об авторах

1. Кытина Екатерина Владимировна — аспирант; e-mail: kata13012002@mail.ru.
2. Артем Викторович Васильев — аспирант; e-mail: vasiliev.av15@physics.msu.ru.
3. Константинова Елизавета Александровна — доктор физ.-мат. наук, доцент, профессор; e-mail: liza35@mail.ru.
4. Хохлов Дмитрий Ремович — доктор физ.-мат. наук, профессор; e-mail: khokhlov@mig.phys.msu.ru.