

Calibración versus entrenamiento: *machine learning* aplicado a la termometría óptica mediante nanopartículas de *upconversion*

Aguilar, Alfredo M.¹; Navarro Benavides, Tomás²; Jandar, Cecilia N.³; Martínez, Eduardo D.^{4,5,6}

¹ Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación (FaMAF), Universidad Nacional de Córdoba (UNC), Argentina

² Instituto Balseiro (UNCUYO-CNEA), Argentina

³ Departamento de Ingeniería en Telecomunicaciones, Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA), Argentina

⁴ Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Argentina

⁵ Gerencia Física, Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA), Argentina

⁶ Instituto de Nanociencia y Nanotecnología (CNEA - CONICET), Argentina

eduardomartinez@integra.cnea.gob.ar

Área temática: C. Propiedades de nanomateriales

Las nanopartículas dopadas con iones lantánidos trivalentes (Ln^{3+}) poseen propiedades luminiscentes de gran interés para el desarrollo de sensores y dispositivos de óptica integrada. En particular, la dupla Er^{3+} - Yb^{3+} alojada en nanocristales ópticamente inertes, como los fluoruros $\text{NaY}(\text{Gd})\text{F}_4$, se destacan por su aplicación como sensores ópticos de temperatura absoluta.^[1] Los procesos de luminiscencia anti-Stokes (*upconversion*, o conversión ascendente de energía) que tienen lugar en estos nanomateriales permiten emplearlos como sondas termométricas primarias a escala nanométrica. La estrategia convencional para su uso radica en el análisis ratiométrico de dos bandas de emisión asociadas a transiciones térmicamente acopladas.^[2] En este enfoque estándar se realiza una calibración previa destinada a determinar parámetros esenciales, como la sensibilidad relativa y la diferencia de energía entre dichos niveles acoplados.

En este trabajo se presentará un enfoque alternativo en el cual, en lugar de calibrar, se aplican ciclos de calentamiento y enfriamiento a velocidades controladas para entrenar dos modelos diferentes de redes neuronales. Por un lado, una red del tipo perceptrón multicapa (o *feed forward*, FF)^[3] y por otro lado, una red convolucional (CNN) con la posibilidad de utilizar en ella un módulo de atención (*self-attention*). En cada caso, se aplicó un proceso de optimización bayesiana para la selección de sus respectivos hiperparámetros, considerando como criterio la precisión en la predicción de la temperatura. Se presentarán los resultados de una comparación exhaustiva entre los procesos de calibración según el modelo estándar de Boltzmann y de regresión lineal multiparamétrica frente a las predicciones de los modelos entrenados en redes FF y CNN. Se analizaron condiciones experimentales diferentes, correspondientes a combinaciones específicas de relación señal-ruido (alta o baja) y densidad de potencia en el punto de medición (alta o baja). Se discutirán los resultados en función de los distintos indicadores de desempeño (*benchmarks*) obtenidos en cada caso y se introducirá una métrica análoga a la sensibilidad térmica estándar para comparar el desempeño de ambas redes. Se mostrará que la estrategia de *machine learning* es particularmente conveniente para el procesamiento de señales ruidosas.

REFERENCIAS

1. Brites C. D. S., Marin R, Suta M., Carneiro Neto A. N., Ximendes E., Jaque D. and Carlos L. D.. Adv. Mater. 35 (2023) 1–45
2. Aguilar A. M., Saidman E. L., Rosato-Siri M. V., Marpegán L. and Martínez E. D., ACS Appl. Nano Mater. 6 (2023) 20942–53
3. Santos E. P., Pugina R. S., Hilário E. G., Carvalho A. J. A., Jacinto C., Rego-Filho F. A. M. G., Canabarro A., Gomes A. S. L., Caiut J. M. A. and Moura A. L. Sensors Actuators A Phys. 362 (2023) 114666