

# АНАЛИЗ И ОПТИМИЗАЦИЯ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИХ ДАННЫХ С ВРЕМЕННЫМ РАЗРЕШЕНИЕМ С ПОМОЩЬЮ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ЛАПЛАСА

Нагаев Е.И., Чесалин Д.Д., Забелин А.А.<sup>1</sup>, Саримов Р.М., Гудков С.В.,  
Пищальников Р.Ю.

Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук, Россия, 119991,  
г. Москва, ул. Вавилова 38

<sup>1</sup>Федеральный исследовательский центр «Пушкинский научный центр биологических  
исследований Российской академии наук, Россия, 142290, г. Пушкино, ул. Институтская, 2

Спектроскопия с высоким временным разрешением является основным экспериментальным методом исследования физико-химических процессов в органических и неорганических молекулярных кристаллах и пигментах, поглощающих в видимом, ультрафиолетовом и инфракрасном диапазонах волн. В общем случае для моделирования оптического отклика, пропорционального  $\chi^3$ , необходимо использовать полуклассические теории взаимодействия электронного излучения с веществом. Однако для целого класса объектов исследования (например, органические мономерные пигменты и кристаллы) такие расчёты сложны и требуют серьёзных вычислительных ресурсов. Как следствие, для предварительного анализа экспериментальных данных часто применяется более простой метод, основанный на преобразовании Лапласа, суть которого сводится к представлению измеренных кинетических кривых в виде композиции экспоненциальных компонент. Нами была разработано программное обеспечение, позволяющее проводить оптимизацию с помощью дифференциальной эволюции – эффективного эвристического алгоритма поиска глобального минимума для произвольного типа функций [1]. Работа алгоритма, включающего в себя преобразование Лапласа, процедуру решения дифференциальных уравнений и дифференциальной эволюции, была протестирована на данных, полученных в экспериментах «накачка-зондирование», выполненных на образцах фотосинтетических пигмент-белковых комплексов (фотосистема I и реакционный центр фотосистемы II [2]).

## Литература.

1. Chesalin, D.D.; Kulikov, E.A.; Yaroshevich, I.A.; Maksimov, E.G.; Selishcheva, A.A.; Pishchalnikov, R.Y. Differential evolution reveals the effect of polar and nonpolar solvents on carotenoids: A case study of astaxanthin optical response modeling // *Swarm and Evolutionary Computation*, 75, 2022, 101210, doi: 10.1016/j.swevo.2022.101210.
2. Pishchalnikov, R.Y.; Zabelin, A.A.; Kompanetz, V.O.; Shkuropatov, A.Y.; Razjivin, A.P.; Chekalin, S.V. Excitation energy structure of the photosystem II reaction center: Excitons and charge-separated states // *Proceedings of International Conference Laser Optics 2020, ICLO 2020*. doi: 10.1109/ICLO48556.2020.9285560